



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Jan Šenk

**Dvouelektronový model pro popis
meziatomárního coulombického rozpadu**

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Přemysl Koloreňč, Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2021

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Rád bych zde poděkoval RNDr. Přemyslu Kolorenčovi, Ph.D. za odborné vedení práce, věcné rady a připomínky a trpělivost při konzultacích této bakalářské práce. Dále bych rád poděkoval svým rodičům za podporu při studiu.

Název práce: Dvouelektronový model pro popis meziatomárního coulombického rozpadu

Autor: Jan Šenk

Ústav: Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Přemysl Koloreňč, Ph.D., Ústav teoretické fyziky

Abstrakt: Tato práce se zabývá konstrukcí a zkoumáním dvouelektronového modelu pro popis meziatomárního coulombického rozpadu (ICD). Model je založen na analyticky řešitelném neporušeném hamiltoniánu s potenciálem tvořeným dvěma pravoúhlými konečně hlubokými jámami. Coulombická interakce dvou elektronů zprostředkující ICD je zahrnuta pomocí časově závislé poruchové teorie. Je zkoumána závislost rozpadových šířek na vzdálenosti mezi jámami, hloubce pravé jámy a energii odcházejícího elektronu. Popsaný model dobře popisuje závislost na vzdálenosti jam pro vysoké energie.

Klíčová slova: potenciálový rozptyl, rezonance, excitace, autoionizace, elektronová korelace

Title: Two-electron model of interatomic Coulombic decay

Author: Jan Šenk

Institute: Institute of Theoretical Physics

Supervisor: RNDr. Přemysl Koloreňč, Ph.D., Institute of Theoretical Physics

Abstract: In this thesis we construct and examine a two-electron model of interatomic Coulombic decay (ICD). We base this model on an unperturbed hamiltonian with closed-form stationary solutions with a potential consisting of two finite square wells. The Coulombic interaction mediating the decay between the electrons is incorporated via time-dependent perturbation theory. We then examine the dependence of the decay widths on the inter-well distance, the depth of the right well and the energy of the ICD electron. The model correctly describes the inter-well dependence for high energy ICD electrons.

Keywords: potential scattering, resonance, excitation, autoionization, electron correlation

Obsah

Úvod	2
1 Teorie	3
1.1 Specifikace modelu a separace problému	3
1.2 Volba jednočásticového potenciálu a hledání stacionárních stavů .	4
1.3 Dvoučásticové vlastní stavy a zahrnutí vzájemné interakce	7
1.3.1 Zahrnutí časového vývoje	9
1.4 Rozklad na přenos energie a přenos částice	10
1.5 Multipólový rozvoj coulombické interakce	10
2 Výpočetní metody	13
2.1 Řešení soustavy navazujících podmínek	13
2.2 Maticový element a regularizační parametr	14
3 Výsledky a diskuse	17
3.1 Závislost na vzdálenosti jam – modely A	17
3.2 Závislost na hloubce pravé jámy – model B	24
3.3 Závislost na energii odcházejícího elektronu – model C	28
Závěr	30
Seznam použité literatury	31

Úvod

Meziatomární coulombický rozpad (ICD) je v nejobecnějším slova smyslu děj, při kterém vzájemnou coulombickou interakcí dvou lokalizovaných skupin elektronů dojde k deexcitaci jedné z těchto skupin a k ionizaci druhé [1]. Teoretické i experimentální výzkumy tohoto jevu se zaměřují především na dvě konkrétní realizace ICD: elektrony lokalizované v elektronových orbitalech atomů nebo molekul, nebo elektrony lokalizované v polovodičových nanostrukturách – kvantových tečkách.

V této práci se budeme věnovat konstrukci jednoduchého dvoučásticového modelu ICD, ve kterém bude coulombická interakce mezi elektrony zahrnuta v prvním řádu časově závislé poruchové teorie. Zkoumána bude závislost rozpadových šířek na různých parametrech modelu, především vzdálenosti jam a energii odcházejícího elektronu. Výsledky budou porovnány s literaturou. Bude posouzena vhodnost použití tohoto modelu pro kvalitativní analýzu ICD v reálných atomárních systémech. Záměrem do budoucna je vytvořit numericky řešitelný model, který umožní rovnocenně zahrnout dynamiku elektronů a atomových jader.

Práce je rozčleněna do tří kapitol. V první z nich shrneme teoretické znalosti, které budeme dále používat, a popíšeme jednočásticový potenciál, který bude zprostředkovávat lokalizaci elektronů. V druhé kapitole okomentujeme některé použité výpočetní metody. Ve třetí kapitole uvedeme a okomentujeme vypočtené závislosti rozpadových šířek.

V první kapitole budeme používat jednotky SI, pokud nebude výslovně uvedeno jinak. Ve zbytku práce budeme používat *Hartreeho atomové jednotky* (a.u.), které jsou definovány volbou redukované Planckovy konstanty: $\hbar = 1$, velikosti náboje elektronu: $e = 1$, hmotnosti elektronu: $m_e = 1$ a Bohrova poloměru: $a_0 = 1$.

1. Teorie

1.1 Specifikace modelu a separace problému

Budeme konstruovat co nejjednodušší model, na kterém lze ICD popsat. Omezíme se tedy na situaci, kdy budeme popisovat pouze elektrony podstupující ICD a jejich pohyb omezíme na jednu dimenzi (1D). Jejich lokalizaci zajistíme dvěma pravoúhlými potenciálovými jámami. Hilbertův prostor dvoučásticových stavů lze zapsat jako direktní součin dvou identických kopií Hilbertova prostoru jednočásticových stavů $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 \otimes \mathcal{H}_0$. Dvoučásticové vlnové funkce budeme značit $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, jednočásticové $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_0$. Celkový hamiltonián \hat{H} tohoto systému lze následujícím způsobem rozložit

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{int}} \quad (1.1)$$

na interakční část \hat{V}_{int} , kterou zahrneme jako poruchu v rámci časově závislé poruchové teorie, a neporušený hamiltonián \hat{H}_0

$$\hat{H}_0 = \hat{h} \otimes \hat{I} + \hat{I} \otimes \hat{h}, \quad (1.2)$$

kde \hat{h} je jednočásticový hamiltonián, který je dán jako

$$\hat{h} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}. \quad (1.3)$$

Konkrétní tvar jednočásticového potenciálu \hat{V} a interakční části hamiltoniánu \hat{V}_{int} bude popsán níže.

Prvním úkolem tedy bude najít stacionární stavy neporušené části \hat{H}_0

$$\hat{H}_0 |\Psi_n\rangle = \mathcal{E}_n |\Psi_n\rangle. \quad (1.4)$$

Tento problém lze separací redukovat na hledání stacionárních stavů jednočásticového hamiltoniánu

$$\hat{h} |\psi_m\rangle = E_m |\psi_m\rangle, \quad (1.5)$$

s jejichž pomocí dvoučásticové stavy a jejich energie zrekonstruujeme jako

$$|\Psi_n\rangle = |\psi_{m_1}\rangle \otimes |\psi_{m_2}\rangle, \quad (1.6)$$

$$\mathcal{E}_n = E_{m_1} + E_{m_2}. \quad (1.7)$$

Spektrum jednočásticového hamiltoniánu se skládá z diskrétní a spojité části. Počet vlastních energií v diskrétní části závisí na tvaru a parametrech potenciálu \hat{V} . Energetické hladiny jednočásticových stavů v kontinuu v jedné dimenzi jsou dvakrát degenerované, každé hodnotě energie totiž odpovídají dvě navzájem opačné hodnoty hybnosti $p = \pm\sqrt{2mE}$. Dvoučásticové energetické hladiny tedy mohou být až čtyřikrát degenerované v případě, že se obě částice nachází v kontinuu, s takovými stavy ovšem nebudeme pracovat.

Pro použití časově závislé poruchové teorie prvního řádu potřebujeme najít „počáteční“ a „koncový“ stav systému, které budeme značit $|\Psi_i\rangle$, $|\Psi_f\rangle$ a jejich

energie \mathcal{E}_i , \mathcal{E}_f . Počáteční stav systému je charakterizován dvěma vázanými elektrony, koncový stav jedním vázaným elektronem a jedním elektronem v kontinuu, pohybující se směrem od oblasti potenciálových jam. Ve velké části výpočtů budeme požadovat splnění zákona zachování energie (ZZE)

$$\mathcal{E}_i = \mathcal{E}_f. \quad (1.8)$$

1.2 Volba jednočásticového potenciálu a hledání stacionárních stavů

Jak již bylo zmíněno, jednočásticový potenciál \hat{V} má tvar dvou pravoúhlých potenciálových jam a je tedy dán jako

$$V(x) = \begin{cases} V_1 = 0, & x \in (-\infty, -d_{1/2} - d_L] \equiv I_1, \\ V_2 = -V_L, & x \in (-d_{1/2} - d_L, -d_{1/2}] \equiv I_2, \\ V_3 = 0, & x \in (-d_{1/2}, d_{1/2}] \equiv I_3, \\ V_4 = -V_R, & x \in (d_{1/2}, d_{1/2} + d_R] \equiv I_4, \\ V_5 = 0, & x \in (d_{1/2} + d_R, \infty) \equiv I_5, \end{cases} \quad (1.9)$$

kde jsme zavedli značení I_k intervalů, na kterých je potenciál konstantní. Hranice těchto intervalů budeme značit

$$\{b_k\}_{k=1}^4 \equiv \{-d_{1/2} - d_L, -d_{1/2}, d_{1/2}, d_{1/2} + d_R\}. \quad (1.10)$$

Zavedení tohoto potenciálu můžeme také vidět na obrázku 1.1.

Parametry jednočásticového potenciálu budeme v duchu minimalismu celého modelu volit tak, aby v jedné z jam (bez újmy na obecnosti levé) existovaly dva vázané stavy a v druhé pouze jeden. Příslušnost jednočásticových stavů a jejich energií k levé nebo pravé jámě nebo ke spojitě části spektra budeme značit dolním indexem, tedy postupně $|\psi_L\rangle$, $|\psi_R\rangle$, $|\psi_C\rangle$. U vázaných stavů budeme navíc horním indexem naznačovat jejich pořadí při seřazení vzestupně dle energie v rámci stavů příslušných dané jámě. Celkem tedy tři vázané stavy v našem jednočásticovém potenciálu budeme značit $|\psi_L^0\rangle$, $|\psi_L^1\rangle$ a $|\psi_R^0\rangle$. Na obrázku 1.1 vidíme zavedení parametrů jednočásticového potenciálu \hat{V} zároveň se schematickým naznačením procesu ICD. V případě, že dvě z energetických hladin modelu jsou sobě blízké, nelze jednoznačně rozhodnout o lokalizaci příslušných vlastních stavů k té či oné jámě. Toto nepředstavuje problém, protože naším modelem popisujeme elektrony – nerozlišitelné částice.

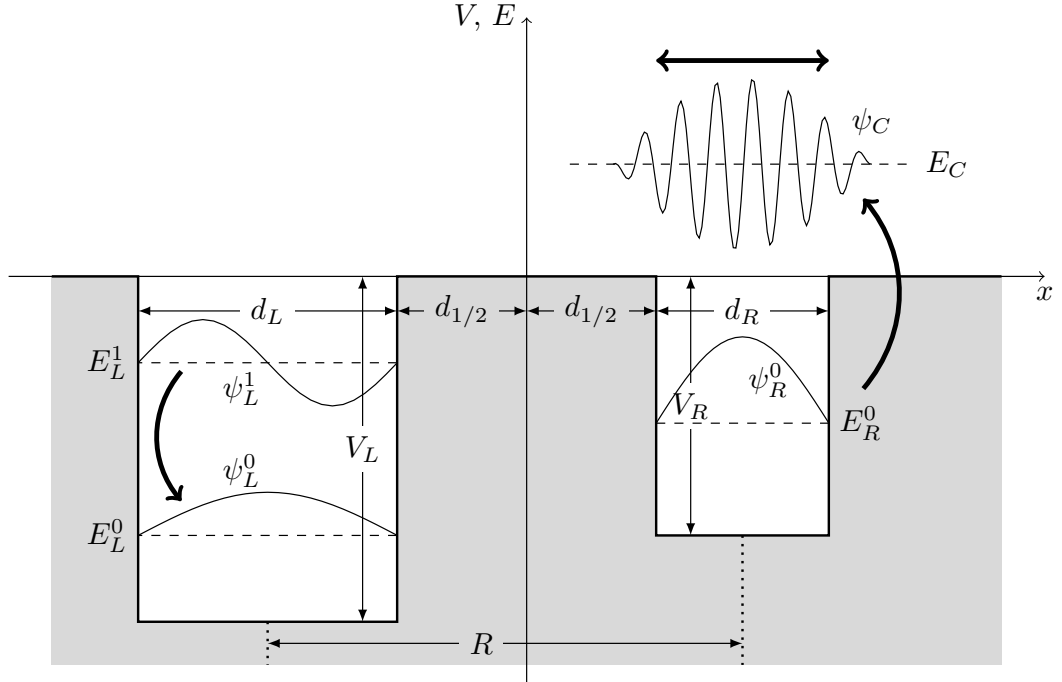
Jednočásticový potenciál \hat{V} je dle (1.9) po částech konstantní, nabývá hodnot V_k na intervalech I_k , kde $k \in \{1, \dots, 5\}$. Na každém z intervalů I_k je třeba řešit stacionární Schrödingerovu rovnici pro vlnovou funkci $\psi_k(x)$ ve tvaru

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_k(x) = -\frac{2m(E - V_k)}{\hbar^2} \psi_k(x). \quad (1.11)$$

Na každé oblasti má řešení charakter

$$\psi_k(x) = A_k e^{\kappa_k x} + B_k e^{-\kappa_k x}, \quad \kappa_k = \sqrt{-\frac{2m(E - V_k)}{\hbar^2}}, \quad (1.12)$$

$$\psi_k(x) = A_k e^{ik_k x} + B_k e^{-ik_k x}, \quad k_k = \sqrt{\frac{2m(E - V_k)}{\hbar^2}}, \quad (1.13)$$



Obrázek 1.1: Zavedení nezávislých parametrů ($d_{1/2}$, d_L , d_R , V_L a V_R) jednočásticového potenciálu \hat{V} a závislého parametru R – vzájemné vzdálenosti středů jam. Dále vidíme schematické znázornění modelové situace: v levé jámě se nachází částice v excitovaném stavu, v pravé jámě v základním. Částice v levé jámě přejde do základního stavu a přebytečnou energii předá pomocí coulombické interakce částici v pravé jámě, která se tímto přesune do kontinua. Částice v kontinuu opouští oblast potenciálových jam směrem doprava nebo doleva. Vlnové funkce jsou zachyceny pouze schematicky, přesná hustota pravděpodobnosti vázaných stavů je v našem modelu nenulová i v klasicky zakázané oblasti a elektron v kontinuu modelujeme pomocí rovinné vlny namísto vlnového balíku.

nebo

$$\psi_k(x) = A_k x + B_k, \quad (1.14)$$

a to v závislosti na tom, jestli je hodnota výrazu

$$-\frac{2m(E - V_k)}{\hbar^2} \quad (1.15)$$

na dané oblasti kladná (1.12), záporná (1.13), nebo nulová (1.14). Poslední případ nebudeme dále uvažovat, protože příslušná hodnota energie E není striktně vzato prvkem spektra našeho jednočásticového hamiltoniánu \hat{h} . Vlnová funkce $\psi(x)$ na celém \mathbb{R} je potom dána jako

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x), & x \in I_1, \\ \psi_2(x), & x \in I_2, \\ \psi_3(x), & x \in I_3, \\ \psi_4(x), & x \in I_4, \\ \psi_5(x), & x \in I_5. \end{cases} \quad (1.16)$$

Na čtyřech hranicích $\{b_k\}_{k=1}^4$ zmíněných oblastí budeme (díky konečnosti skoků potenciálu) požadovat spojitost vlnové funkce $\psi(x)$ a její derivace

$$\lim_{x \rightarrow b_k^+} \psi(x) = \lim_{x \rightarrow b_k^-} \psi(x), \quad (1.17)$$

$$\lim_{x \rightarrow b_k^+} \psi'(x) = \lim_{x \rightarrow b_k^-} \psi'(x). \quad (1.18)$$

Celkové řešení na všech pěti oblastech má deset volných (komplexních) parametrů, které jsou vázány osmi navazujícími podmínkami. V kontinuu, tedy pro $E > 0$ jsme tímto vyčerpali všechny podmínky, které lze na vlnovou funkci naložit. Pro každou kladnou energii tvoří stacionární vlnové funkce dvoudimenzionální lineární vektorový prostor. V tomto prostoru budeme volit bázi, kterou budeme značit $|E, s\rangle$, a vlnové funkce v kontinuu budeme normovat k delta funkci v energii, tedy

$$\langle E, s | E', s' \rangle = \delta(E - E') \delta_{ss'}, \quad (1.19)$$

kde s je degenerační index. Budeme rozlišovat dva rozpadové kanály: částice opouští oblast jam směrem doprava ($s = +$) nebo doleva ($s = -$). Tomuto podřídíme volbu báze v kontinuu. Funkce e^{ikx} reprezentuje (po přidání časové závislosti) rovinnou vlnu postupující doprava, funkce e^{-ikx} reprezentuje rovinnou vlnu postupující doleva. Zajímají nás tedy příspěvky k vlnové funkci reprezentující částici odcházející směrem od jam, tedy ta, která má na intervalu I_1 pouze příspěvek e^{-ikx} a ta, která má na intervalu I_5 pouze příspěvek e^{ikx} . Zbylé dva stupně volnosti vlnových funkcí v kontinuu tedy odstraníme volbou konstant A_5 a B_1 z (1.13), tato volba je specifikována v tabulce 1.1.

Vázané stavy budeme hledat v oblasti energií

$$-\min\{V_L, V_R\} < E_n < 0. \quad (1.20)$$

Vlnové funkce vázaných stavů mají tedy na z jedné strany neomezených intervalech I_1 a I_5 exponenciální charakter (1.12). Od vázaných stavů požadujeme tradiční podmínku $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, jejíž splnění zařídíme volbou $A_5 = 0$ a $B_1 = 0$. Tím nám zbude osm volných parametrů celkové vlnové funkce, od které požadujeme splnění osmi navazujících podmínek. To zdánlivě jednoznačně určuje celkovou vlnovou funkci. Ve skutečnosti z obecné teorie stacionárních stavů v 1D víme, že požadavek na řešitelnost soustavy (nulovost determinantu matice této soustavy) navazujících podmínek vygeneruje podmínku na energii E – „nakvantuje energii“.

Tabulka 1.1: Volba konstant z (1.13) definujících vlnové funkce v kontinuu tak, aby reprezentovaly dva rozpadové kanály a zároveň splňovaly normalizaci (1.19).

vlnová funkce	konstanta A_5	konstanta B_1
$\psi_C^+ = \langle x E, + \rangle$	$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\sqrt{2mE}}}$	0
$\psi_C^- = \langle x E, - \rangle$	0	$\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\sqrt{2mE}}}$

Splnění požadavku řešitelnosti soustavy (volbou $E = E_n$) nám umožní najít řešení soustavy – jednodimenzionální lineární vektorový prostor. Jako vlnové funkce $\psi_n(x)$ vybereme z něj vybereme řešení normované k jedničce

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}. \quad (1.21)$$

Ortogonalita je zaručena díky hermitovskosti jednočásticového hamiltoniánu \hat{h} . Podmínka řešitelnosti soustavy je, podobně jako v případě jedné konečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámy, daná transcendentní rovnicí pro E , která je zde navíc různá pro $0 > E > -\min\{V_L, V_R\}$ a $-\min\{V_L, V_R\} > E > -\max\{V_L, V_R\}$.

1.3 Dvoučásticové vlastní stavy a zahrnutí vzájemné interakce

Nejdříve zkonstruujeme dvoučásticové vlastní stavy neporušeného hamiltoniánu (1.4). Je třeba vzít v úvahu, že elektron je nerozlišitelná částice se spinem $1/2$, tedy fermion, a celková vlnová funkce systému fermionů je antisymetrická. Model je jednodimenzionální, nemáme tedy k dispozici jiný než spinový moment hybnosti. Celkově tedy máme soustavu dvou částic se spinem $1/2$, která se může nacházet ve stavu spinového singletu s antisymetrickou spinovou částí vlnové funkce, nebo ve stavu spinového tripletu se symetrickou spinovou částí vlnové funkce. Pro antisymetrii celkové vlnové funkce je třeba prostorové části přiřadit opačnou symetrii než má část spinová. Budeme tedy brát v úvahu obě symetrizace dvoučásticových vlnových funkcí

$$|\Psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_{m_1}\rangle \otimes |\psi_{m_2}\rangle \pm |\psi_{m_2}\rangle \otimes |\psi_{m_1}\rangle). \quad (1.22)$$

Symetrické vlnové funkce odpovídají stavu spinového singletu a antisymetrické vlnové funkce odpovídají stavu spinového tripletu. Níže uvidíme, že některé aspekty zkoumaného problému nebudou záviset na symetrii dvoučásticových vlnových funkcí, proto budeme někdy pracovat i s nesymetrizovanými vlnovými funkcemi (1.6).

Nyní můžeme napsat počáteční a koncový dvoučásticový stav systému, které budeme dále uvažovat. Oba stavy byly popsány na obrázku 1.1, nyní navíc uvažujeme výše popsanou (anti)symetrizaci

$$|\Psi_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_L^1\rangle \otimes |\psi_R^0\rangle \pm |\psi_R^0\rangle \otimes |\psi_L^1\rangle), \quad (1.23)$$

$$|\Psi_f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_L^0\rangle \otimes |\psi_C^\pm\rangle \pm |\psi_C^\pm\rangle \otimes |\psi_L^0\rangle). \quad (1.24)$$

Stavy $|\psi_C^\pm\rangle$ jsou takové dva stavy z kontinua, jejichž energie E_C splňuje spolu s energiemi vázaných stavů zákon zachování energie, tedy

$$E_C = E_L^1 + E_R^0 - E_L^0. \quad (1.25)$$

Nyní zahrňme vzájemnou interakci částic. Interakční část \hat{V}_{int} hamiltoniánu (1.1) popisuje vzájemnou coulombickou repulzi dvou elektronů, částic s nábojem

$-e$, a má v souřadnicové reprezentaci tvar

$$\hat{V}_{\text{int}}^{\text{Coulomb}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|x_1 - x_2|}. \quad (1.26)$$

V následující sekci uvidíme, že bude třeba počítat maticové elementy tohoto operátoru, které v souřadnicové reprezentaci přejdou na dvourozměrné integrály. Vyjádření (1.26) má však v bodě $x_1 = x_2$ singularitu, kterou odstraníme následující regularizací převzatou z [2]

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + \alpha \exp[-\beta(x_1 - x_2)^2]}}. \quad (1.27)$$

Jak můžeme vidět na obrázku 1.2, závislost této regularizace na proměnné $r \equiv |x_1 - x_2|$ může být pro jisté hodnoty parametrů¹ α , β na jistém podintervalu \mathbb{R}^+ rostoucí. Na tomto podintervalu taková regularizace reprezentuje přitažlivé působení částic, které je pro coulombickou interakci dvou částic stejného náboje nefyzikální. Aby tato situace nenastala, budeme požadovat, aby funkce

$$f(r) = \frac{1}{\sqrt{r^2 + \alpha e^{-\beta r^2}}} \quad (1.28)$$

byla ryze klesající na intervalu $(0, \infty)$. Tento požadavek dá následující podmínku na parametry regularizace

$$\alpha\beta \leq 1. \quad (1.29)$$

Pro zjednodušení přejdeme k jedinému parametru volbou

$$\alpha = \frac{1}{\beta}. \quad (1.30)$$

Poté $\hat{V}_{\text{int}} \rightarrow \hat{V}_{\text{int}}^{\text{Coulomb}}$ pro $\beta \rightarrow \infty$.

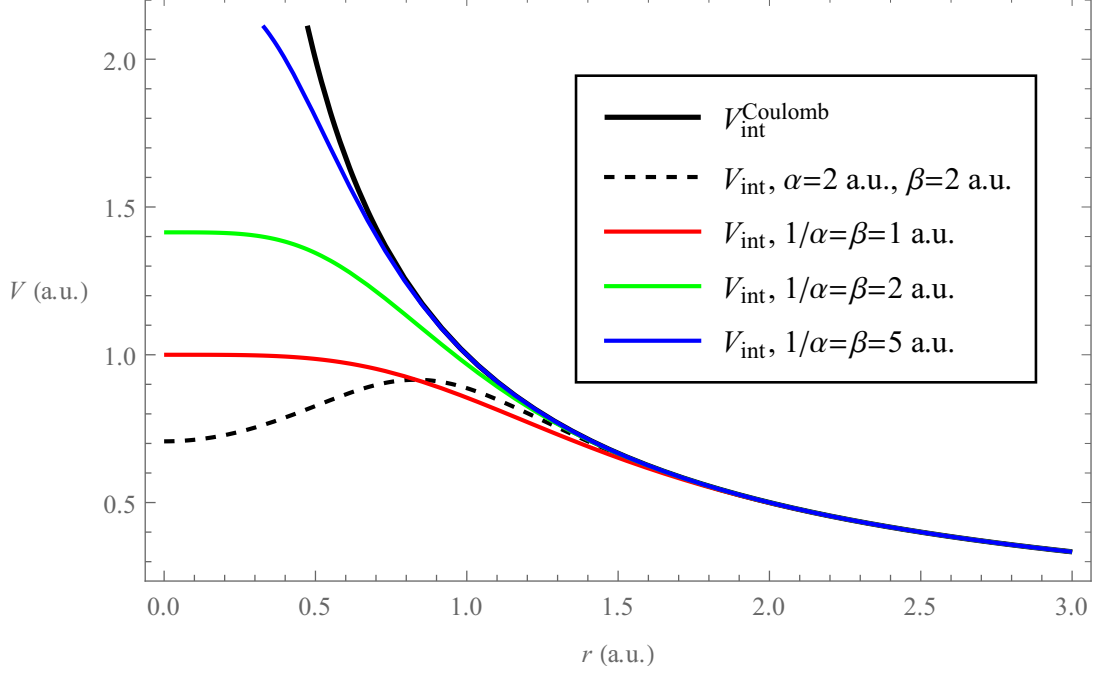
Coulombická interakce zprostředkovává vazbu mezi vázanými stavy a stavy v kontinuu, a je tedy mechanismem ICD. Kromě toho přispívá k celkovým energiím \mathcal{E}^{tot} dvoučásticových stavů $|\Psi\rangle$. Tento příspěvek zahrneme pomocí stacionární poruchové teorie prvního řádu. Přesněji řečeno takto zahrneme opravu energie pouze u počátečního vázaného stavu $|\Psi_i\rangle$. Interakční příspěvek k energii koncového stavu v kontinuu $|\Psi_f\rangle$ takto zahrnout nelze, protože stacionární poruchová teorie je budovaná pro stavy, které lze normovat k jedničce. V článku [3], kde se problém řeší numericky přesně, což umožňuje určit příspěvek vzájemné interakce k energiím všech dvoučásticových stavů, se ukázalo, že tento příspěvek je pro $|\Psi_f\rangle$ malý ve srovnání s příspěvkem k energii vázaného stavu $|\Psi_i\rangle$, my ho tedy budeme zanedbávat. Fyzikálně to je v souladu s náhledem, že částice v kontinuu je delokalizovaná, a tedy vzájemná repulze s druhou, lokalizovanou, částicí bude zanedbatelná. Zákon zachování energie (1.8) po této opravě tedy nabude tvaru

$$\mathcal{E}_i + \langle \Psi_i | \hat{V}_{\text{int}} | \Psi_i \rangle = \mathcal{E}_f, \quad (1.31)$$

kde \mathcal{E}_i a \mathcal{E}_f jsou dány dle (1.7). Energie stavů $|\psi_C^\pm\rangle$ je potom

$$\bar{E}_C = E_L^1 + E_R^0 - E_L^0 + \langle \Psi_i | \hat{V}_{\text{int}} | \Psi_i \rangle. \quad (1.32)$$

¹V jednotkách SI mají parametry regularizace následující rozměr: $[\alpha] = \text{m}^2$, $[\beta] = \text{m}^{-2}$, my s nimi budeme pracovat výhradně v atomových jednotkách.



Obrázek 1.2: Závislost $\hat{V}_{\text{int}}^{\text{Coulomb}}(r \equiv |x_1 - x_2|)$ a $\hat{V}_{\text{int}}(r)$ pro několik kombinací parametrů regularizace. Čárkovaná čára značí regularizaci, jejíž parametry nesplňují podmínku (1.29), a tudíž její průběh není ryze klesající na \mathbb{R}^+ . Barevné čáry poté značí regularizaci redukovanou na jeden volný parametr dle (1.30) pro různé hodnoty tohoto parametru (za volný parametr považujeme β). Vidíme, že pro zvyšující se hodnotu β se regularizace přibližuje aproximovanému coulombickému potenciálu. Na osách jsou použity atomové jednotky.

1.3.1 Zahrnutí časového vývoje

Následující postup je přímou aplikací odvození z [4, str. 1303–1319] na náš konkrétní problém, přičemž hlavní modifikací je přechod od spojitého k diskrétnímu degeneračnímu indexu, protože se pohybujeme v 1D. Máme hamiltonián \hat{H}_0 a jeho stacionární stavy $|\Psi_n\rangle$. Necht' je systém v čase $t = 0$ ve stacionárním vázaném stavu $|\Psi_i\rangle$ dle (1.23). Na interakční část celkového hamiltoniánu (1.1) reprezentovanou regularizací potenciálu (1.27) s výše diskutovanou volbou $\alpha = 1/\beta$ se díváme jako na v čase konstantní poruchu, kterou „zapneme“ v čase $t = 0$ a která způsobí časový vývoj $|\Psi(t)\rangle$ původně stacionárního stavu. Pravděpodobnost nalezení částice v čase t v koncovém stavu $|\Psi_f\rangle$ dle (1.24), který patří do spojitě části spektra a je charakterizován energií \mathcal{E}_f a degeneračním indexem $s \in \{+, -\}$ je

$$\mathcal{P}_{i,f}(t; \mathcal{E}_f, s) = |\langle \Psi_f | \Psi(t) \rangle|^2. \quad (1.33)$$

Pravděpodobnost přechodu na jednotku času je potom

$$\Gamma_s = \frac{d}{dt} \mathcal{P}_{i,f}(t; \mathcal{E}_f, s) \quad (1.34)$$

a lze pro ni odvodit vztah známý jako *Fermiho zlaté pravidlo* [4, str. 1319]

$$\Gamma_s = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_f | \hat{V}_{\text{int}} | \Psi_i \rangle \right|^2 \varrho_s(\mathcal{E}_f). \quad (1.35)$$

V naší aplikaci je hustota stavů $\varrho_s(\mathcal{E}_f) = 1$ díky normování jednočásticových vlnových funkcí v kontinuu k delta funkci v energii (1.19). Veličina Γ_s se také někdy nazývá (parciální) rozpadovou šířkou. Dále

$$\Gamma = \Gamma_+ + \Gamma_- \quad (1.36)$$

je celková rozpadová šířka, tedy pravděpodobnost přechodu do kontinua bez rozlišování rozpadových kanálů. Převrácená hodnota této veličiny má význam střední doby života počátečního stavu.

1.4 Rozklad na přenos energie a přenos částice

Maticové elementy interakčního potenciálu vystupující ve vztahu pro rozpadové šířky (1.35) lze rozdělit na dva příspěvky [5]. Dosadíme počáteční a koncový stav z (1.23) a (1.24) a dostaneme

$$\langle \Psi_f | \hat{V}_{\text{int}} | \Psi_i \rangle = \langle \psi_L^0 | \otimes \langle \psi_C^\pm | \hat{V}_{\text{int}} | \psi_L^1 \rangle \otimes | \psi_R^0 \rangle \pm \langle \psi_L^0 | \otimes \langle \psi_C^\pm | \hat{V}_{\text{int}} | \psi_R^0 \rangle \otimes | \psi_L^1 \rangle. \quad (1.37)$$

První příspěvek se nazývá *přímý člen* (*energy transfer, přenos energie*) a popisuje situaci, která je zachycena na obrázku 1.1, tedy částice v levé jámě přechází z excitovaného stavu do základního a energii předává částici v pravé jámě, kterou tím vysune do kontinua. V následující sekci uvidíme, že tento člen na vzájemné vzdálenosti jam R , viz obrázek 1.1, závisí jako $1/R^3$.

Druhý příspěvek se nazývá *výměnný člen* (*particle transfer, přenos částice*) a popisuje situaci, kdy částice z pravé jámy přejde do základního stavu v levé jámě a přebytečná energie je využita k uvolnění částice z excitovaného stavu v levé jámě do kontinua. Tento příspěvek závisí na překryvu vlnových funkcí základních stavů v jednotlivých jámách, a proto na jejich vzdálenosti R závisí jako e^{-aR} , kde a je kladná konstanta. Je tedy vidět, že pro větší vzdálenosti jam je dominantní přímý člen, který přispívá stejně pro symetrizované i antisymetrizované počáteční a koncové stavy. Pokud bychom uvažovali nesymetrizované stavy, výměnný člen by se v (1.37) vůbec neobjevil.

1.5 Multipólový rozvoj coulombické interakce

Provedme nyní multipólový rozvoj přímého členu z (1.37) [5]. Pro jednoduchost použijme v této podsekci atomové jednotky, ve kterých má coulombický interakční potenciál tvar

$$\hat{V}_{\text{int}}^{\text{Coulomb}} = \frac{1}{\sqrt{(\hat{x}_2 - \hat{x}_1)^2}}. \quad (1.38)$$

Nyní od operátorů souřadnic \hat{x}_1, \hat{x}_2 přejdeme k operátorům nových souřadnic $\hat{\xi}_1, \hat{\xi}_2$, které mají počátek ve středech jednotlivých jam

$$\hat{\xi}_1 = \hat{x}_1 + d_{1/2} + d_L/2, \quad \hat{\xi}_1 \equiv \hat{\xi}_1 \otimes \hat{I}, \quad (1.39)$$

$$\hat{\xi}_2 = \hat{x}_2 - d_{1/2} - d_R/2, \quad \hat{\xi}_2 \equiv \hat{I} \otimes \hat{\xi}_2, \quad (1.40)$$

a pro zjednodušení značení ztotožňujeme jednočásticové a dvoučásticové verze těchto operátorů. Zároveň označíme vzájemnou vzdálenost středů jam jako

$$R = 2d_{1/2} + d_L/2 + d_R/2. \quad (1.41)$$

Nyní můžeme provést rozvoj interakčního potenciálu do druhého řádu

$$\hat{V}_{\text{int}} = \frac{1}{\sqrt{(R + \hat{\xi}_2 - \hat{\xi}_1)^2}} = \frac{1}{R\sqrt{\left(1 + \frac{\hat{\xi}_2 - \hat{\xi}_1}{R}\right)^2}} \quad (1.42)$$

$$= \frac{1}{R} - \frac{\hat{\xi}_2 - \hat{\xi}_1}{R^2} + \frac{(\hat{\xi}_2 - \hat{\xi}_1)^2}{R^3} + O\left(\frac{(\hat{\xi}_2 - \hat{\xi}_1)^3}{R^4}\right). \quad (1.43)$$

Spočítáme-li nyní přímý člen maticového elementu tohoto rozvoje interakčního potenciálu, zjistíme, že první dva členy díky ortogonalitě jednočásticových vlnových funkcí vymizí a vedoucí člen tedy bude řádu $1/R^3$, konkrétně

$$\langle \psi_L^0 | \otimes \langle \psi_C^\pm | \hat{V}_{\text{int}} | \psi_L^1 \rangle \otimes | \psi_R^0 \rangle \approx -2 \frac{\langle \psi_L^0 | \hat{\xi}_1 | \psi_L^1 \rangle \langle \psi_C^\pm | \hat{\xi}_2 | \psi_R^0 \rangle}{R^3}, \quad (1.44)$$

kde $\langle \psi_L^0 | \hat{\xi}_1 | \psi_L^1 \rangle$ ($\langle \psi_C^\pm | \hat{\xi}_2 | \psi_R^0 \rangle$) je maticový element dipólového momentu v levé (pravé) jámě zprostředkující přechod $|\psi_L^1\rangle \mapsto |\psi_L^0\rangle$ ($|\psi_R^0\rangle \mapsto |\psi_C^\pm\rangle$), proto přibližný vztah (1.44) vyjadřuje, že ICD je v nejnižším netriviálním řádu zprostředkovaný dipól-dipólovou interakcí.

Na závěr teoretické části se pokusíme nahlédnout, jak jednotlivé maticové elementy dipólových momentů závisí na E_C a R . Pro tento účel uvažme vlnové funkce v takovém tvaru, který neodpovídá přesně našemu jednočásticovému potenciálu, ale umožní nám maticové elementy spočítat jednoduše analyticky. Zajímají nás pouze tvary závislostí, nebudeme tedy vlnové funkce přesně normovat. Jako vázané stavy vezmeme vlastní stavy harmonického oscilátoru s vlastní úhlovou frekvencí ω_i

$$\psi_L^0(\xi_1) \propto \omega_1^{1/4} \exp\left(-\frac{\omega_1 \xi_1^2}{2}\right), \quad (1.45)$$

$$\psi_L^1(\xi_1) \propto 2\omega_1^{3/4} \xi_1 \exp\left(-\frac{\omega_1 \xi_1^2}{2}\right), \quad (1.46)$$

$$\psi_R^0(\xi_2) \propto \omega_2^{1/4} \exp\left(-\frac{\omega_2 \xi_2^2}{2}\right), \quad (1.47)$$

kde používáme atomové jednotky. Pro vyšší hodnotu ω_i je potenciál harmonického oscilátoru užší, stejně jako profily vlnových funkcí vázaných stavů. Jako stav v kontinuu vezmeme rovinnou vlnu postupující doprava

$$\psi_C(\xi_2) \propto \frac{e^{ik\xi_2}}{\sqrt{k}}, \quad (1.48)$$

kde $k \propto \sqrt{E_C}$ a faktor $1/\sqrt{k}$ pochází z normování k energii. S výše zavedenými vlnovými funkcemi vychází pro jednotlivé maticové elementy dipólových momentů vztahy

$$\langle \psi_C^\pm | \hat{\xi}_2 | \psi_R^0 \rangle \propto -i \frac{\sqrt{2\pi k}}{\omega_2^{5/4}} e^{-\frac{k^2}{2\omega_2}}, \quad (1.49)$$

$$\langle \psi_L^0 | \hat{\xi}_1 | \psi_L^1 \rangle \propto \sqrt{\frac{\pi}{\omega_1}}. \quad (1.50)$$

Celkem dostáváme pro rozpadovou šířku v aproximaci (1.44) závislost na E_C a R ve tvaru

$$\tilde{\Gamma} \propto \sqrt{E_C} e^{-\frac{E_C}{\omega_2}} \frac{1}{\omega_1 \omega_2^{5/2} R^6}. \quad (1.51)$$

2. Výpočetní metody

Při řešení byl ke všem výpočtům použit program *Mathematica* [6]. K vykreslení grafů závislostí rozpadových šířek na různých parametrech a jejich případným fitům, vykreslením závislostí spekter jednotlivých modelů na jejich volných parametrech a hustot pravděpodobnosti jednočásticových stavů byl použit program *Origin* [7].

2.1 Řešení soustavy navazujících podmínek

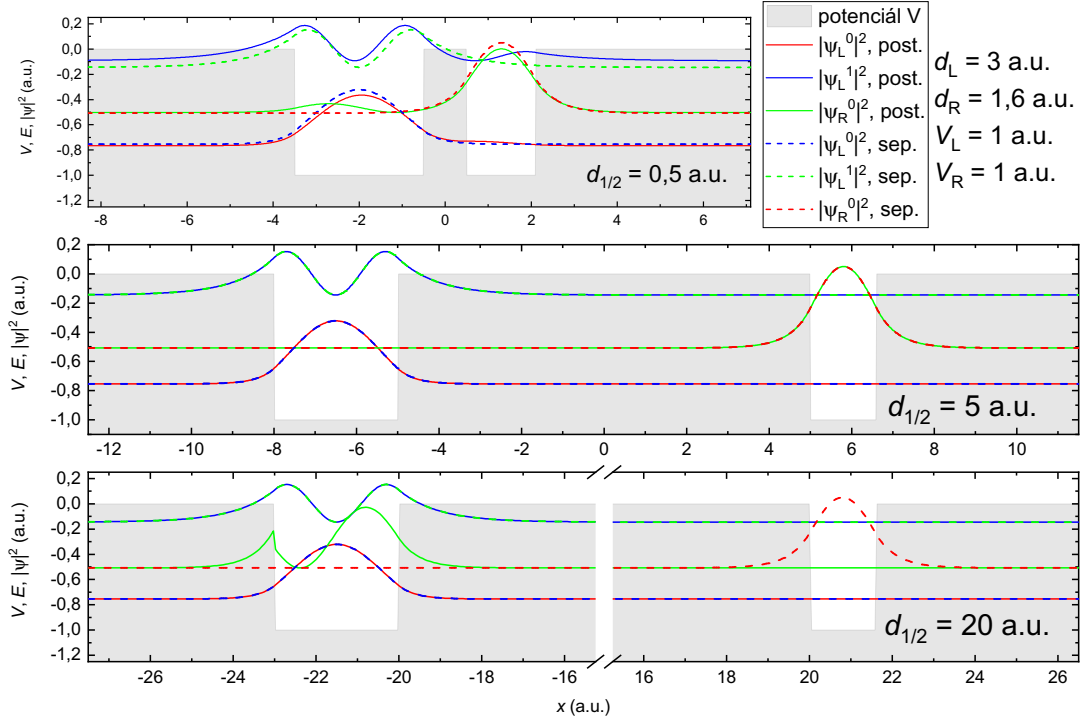
Jak již bylo zmíněno v první kapitole, podmínka řešitelnosti soustavy navazujících podmínek (1.17), (1.18) přejde na transcendentní rovnici. Její řešení je tedy třeba hledat numericky, a proto je nutné numericky řešit i samotnou soustavu. Zabudovaná funkce softwaru *Mathematica* na numerické řešení soustav rovnic ovšem pro jisté parametry jam, zejména velká $d_{1/2}$, selhává.

Popíšeme zde dvě metody hledání vlnových funkcí vázaných stavů, které budou v dalších výpočtech použity. *Separátní* metoda spočívá v nezávislém hledání vlnových funkcí vázaných stavů v potenciálu s jednou pravouhloú jámou o parametrech levé nebo pravé jámy našeho modelu. Jak uvidíme, tato metoda bude výhodná v oblasti, kde zabudovaná funkce selhala. Např. pro malé $d_{1/2}$ bude však dávat odlišné výsledky od přesného řešení.

Důvodem zavedení *postupné* metody řešení namísto použití zmíněné zabudované funkce bude osvětlit příčinu jejího selhání pro určité konfigurace modelu. Díky $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R})$ dostáváme $B_1 = 0 = A_5$, viz (1.12). Dále ponecháme konstantu B_5 , volnou pro dourčení z požadavku normalizace k jedničce na konci procesu. Metoda poté spočívá v postupném řešení navazujících podmínek v bodech b_4, b_3 , a b_2 , čímž získáváme vyjádření koeficientů $A_j, B_j, j \in \{2,3,4\}$ pomocí B_5 . V tomto momentě máme k dispozici poslední volný parametr A_1 , a potřebujeme splnit ještě dvě rovnice reprezentující navazující podmínky v bodě b_1 . Obě rovnice však nelze přesně splnit současně, protože podmínka řešitelnosti soustavy je splněna pouze v rámci numerické přesnosti řešení výše zmíněné transcendentní rovnice. Vybereme si tedy rovnici pro spojitost derivace vlnové funkce (1.18). Ukázalo se, že volba druhé navazující podmínky, ani jiná volba parametru dourčovaného normalizací, nezlepší numerickou stabilitu *postupné* metody.

Separátní metoda řešení je pouze aproximace, která je tím přesnější, čím je menší překryv vázaných stavů příslušejících různým jámám. *Postupná* metoda je z analytického hlediska přesná, nicméně numericky nestabilní v případě velmi malé hustoty pravděpodobnosti daného stavu na I_3 – mezi jámami. To způsobuje mnohařádkový rozdíl mezi hodnotami koeficientů A_k, B_k příslušejících jednotlivým intervalům I_k , což omezuje přesnost stanovení těch koeficientů, jejichž hodnoty mají nejnižší řád.

Na obrázku 2.1 vidíme srovnání hustot pravděpodobnosti jednočásticových vázaných stavů vypočtených oběma výše zmíněnými metodami pro různé vzdálenosti jam. Vidíme, že pro blízké jámy se hustoty mírně liší a pro jámy vzdálenější jsou hustoty v rámci rozlišení totožné. Pro ještě větší hodnoty $d_{1/2}$ vidíme, že numerická nepřesnost způsobila přesunutí hustoty pravděpodobnosti vlastního stavu příslušejícího pravé jámě do jámy levé. Příslušná hustota pravděpodob-



Obrázek 2.1: Hustoty pravděpodobnosti jednočásticových vázaných stavů vypočtených pomocí *postupné* a *separátní* metody řešení soustavy navazujících podmínek pro tři různé hodnoty $d_{1/2}$. Grafy hustot pravděpodobnosti jsou vertikálně posunuty o hodnotu energie příslušného vázaného stavu.

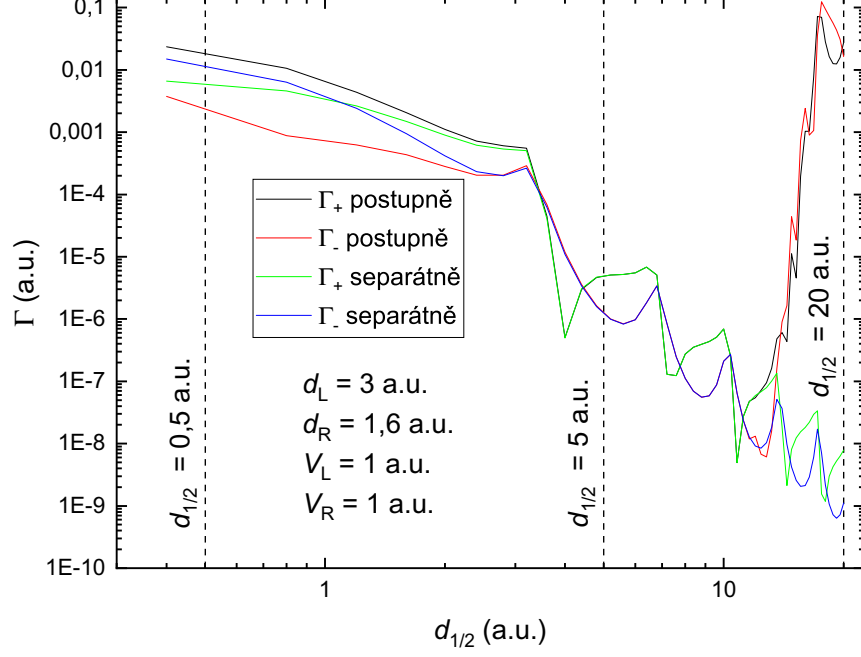
nosti je nespojitá v bodě b_1 , což odpovídá tomu, že jsme podmínku na spojitost vlnové funkce v tomto bodě v *postupné* metodě nepožadovali a numerické chyby se „nasčítaly“ tak, že není splněna automaticky.

Pro ilustraci důsledků nepřesnosti nalezení jednočásticových vázaných stavů můžeme na obrázku 2.2 vidět srovnání rozpadových šířek vypočtených s využitím vázaných stavů nalezených oběma výše popsanými metodami. Vidíme, že pro $d_{1/2} \lesssim 3$ a.u. se výsledky obou metod liší. Charakter závislosti je však pro obě metody přibližně stejný. Pro větší $d_{1/2}$ dávají oba přístupy stejné výsledky, ale pro $d_{1/2} \gtrsim 10$ a.u. začíná *postupná* metoda řešení dávat rozpadové šířky o mnoho řádů vyšší než metoda *separátní* v důsledku nesprávné lokalizace stavu $|\psi_R^0\rangle$, viz obrázek 2.1.

Při výpočtech finálních závislostí parciálních rozpadových šířek na $d_{1/2}$ byly nejprve provedeny výpočty oběma metodami (s větším krokem $d_{1/2}$), a z intervalu, kde se výsledky jednotlivých metod překrývaly, byla vybrána mezní hodnota $d_{1/2}^{\text{mez}}$ která v dalších výpočtech vymezovala přechod mezi použitím jednotlivých metod.

2.2 Maticový element a regularizační parametr

Výpočet maticových elementů $\langle \Psi_f | \hat{V}_{\text{int}} | \Psi_i \rangle$, potřebných pro stanovení rozpadových šířek pomocí Fermiho zlatého pravidla (1.35) přejde v souřadnicové



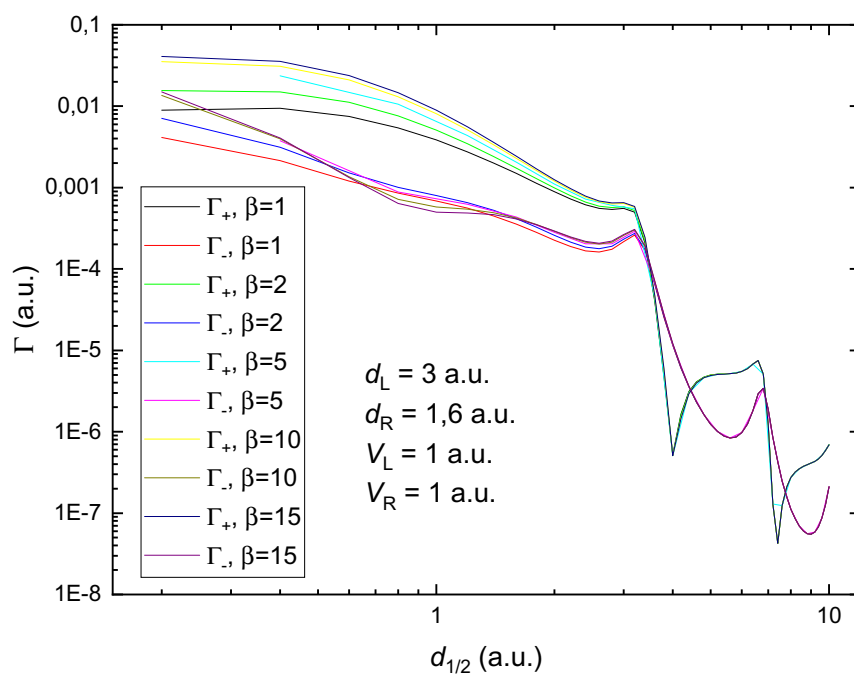
Obrázek 2.2: Srovnání parciálních rozpadových šířek vypočtených pomocí *postupné* a *separátní* metody řešení soustavy navazujících podmínek. Parametry výpočtu: $\beta = 5$ a.u., $L = 35$ a.u.

reprezentaci na integrál

$$\langle \Psi_f | \hat{V}_{\text{int}} | \Psi_i \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Psi_f^*(x_1, x_2) \Psi_i(x_1, x_2)}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + \frac{1}{\beta} \exp[-\beta(x_1 - x_2)^2]}} dx_1 dx_2, \quad (2.1)$$

kde jsme použili regularizovaný potenciál (1.27) s redukcí parametrů regularizace (1.30). Z tvarů jednotlivých vlnových funkcí lze nahlédnout, že čitatel integrandu exponenciálně klesá pro $x_{1,2} \rightarrow \pm\infty$, zatímco jmenovatel pro $|x_1 - x_2| \equiv r \rightarrow +\infty$ roste pouze lineárně. Toto společně s odražeností jmenovatele od nuly zajišťuje nejen konvergenci integrálu, ale také možnost nahrazení celé integrační oblasti $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$ čtvercem $(-L, L) \times (-L, L)$ se zanedbatelnou chybou pro dostatečně velké L . Omezení integrační oblasti umožňuje numerickou integraci, kterou provedeme pomocí zabudované funkce programu *Mathematica*. Parametr regularizace β a polovinu strany L čtverce, přes který integrujeme, budeme souhrnně označovat jako *parametry výpočtu*.

Na obrázku 2.3 můžeme vidět srovnání vypočtených rozpadových šířek s použitím různých hodnot β . Vidíme, že pro $d_{1/2} \gtrsim 3$ a.u. dávají všechny regularizace téměř stejné výsledky. Pro menší vzdálenosti jam dává vyšší hodnota parametru regularizace β vyšší hodnoty rozpadových šířek, což koresponduje s vlivem β na regularizovaný potenciál, viz obrázek 1.2.



Obrázek 2.3: Srovnání parciálních rozpadových šířek vypočtených s různými hodnotami parametru regularizace β . $L = 35 \text{ a.u.}$

3. Výsledky a diskuse

Zaměříme se na závislost rozpadových šířek na dvou parametrech jednočásticového potenciálu. Prvním z nich bude polovina vzdálenosti jam $d_{1/2}$, potažmo vzájemná vzdálenost jejich středů R , a druhým hloubka pravé jámy V_R . Závislost na V_R souvisí se závislostí na energii částice v kontinuu E_C , protože změnou hloubky pravé jámy se bude měnit energie v ní lokalizovaného vázaného stavu a tedy prostřednictvím ZZE (1.8), nebo „opraveného“ ZZE (1.31), se bude analogicky měnit i energie odpovídajícího stavu v jednočásticovém kontinuu. Závislost rozpadových šířek na E_C budeme vyšetřovat i nezávisle na ZZE. Získanou $\Gamma(E_C)$ lze interpretovat jako aproximaci k rozpadové šířce ve Fanově teorii rezonancí [8] a [9], která představuje v principu přesné řešení rozpadového problému.

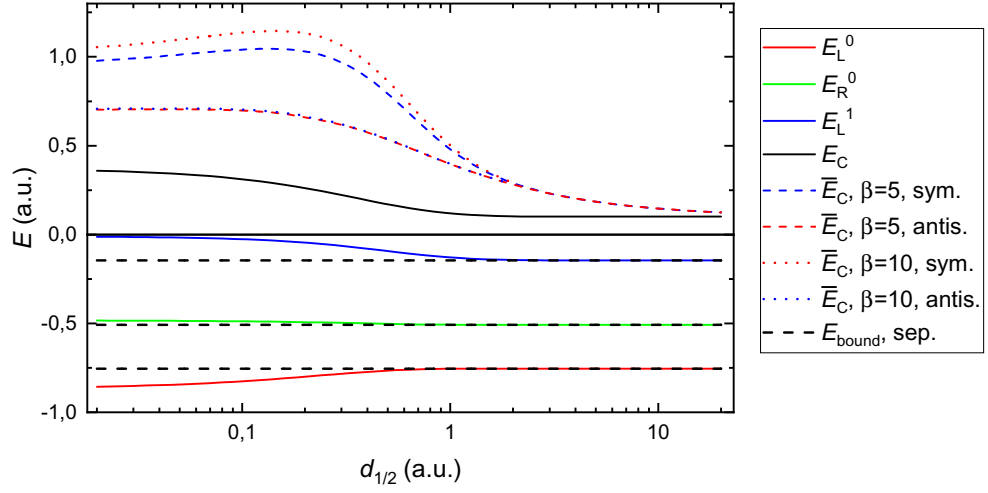
Závislost na $d_{1/2}$ budeme nazývat modelem A, závislost na V_R modelem B a závislost na E_C bez požadavku na ZZE modelem C. V tabulce 3.1 můžeme vidět specifikaci hodnot fixovaných parametrů jednočásticového potenciálu v jednotlivých modelech.

Tabulka 3.1: Označení jednotlivých modelů, na kterých budou dále prováděny výpočty, specifikace jejich volného parametru a hodnot fixovaných parametrů jednočásticového potenciálu \hat{V} (1.9). Zákonem zachování energie zde myslíme jeden ze vztahů (1.25) nebo (1.32).

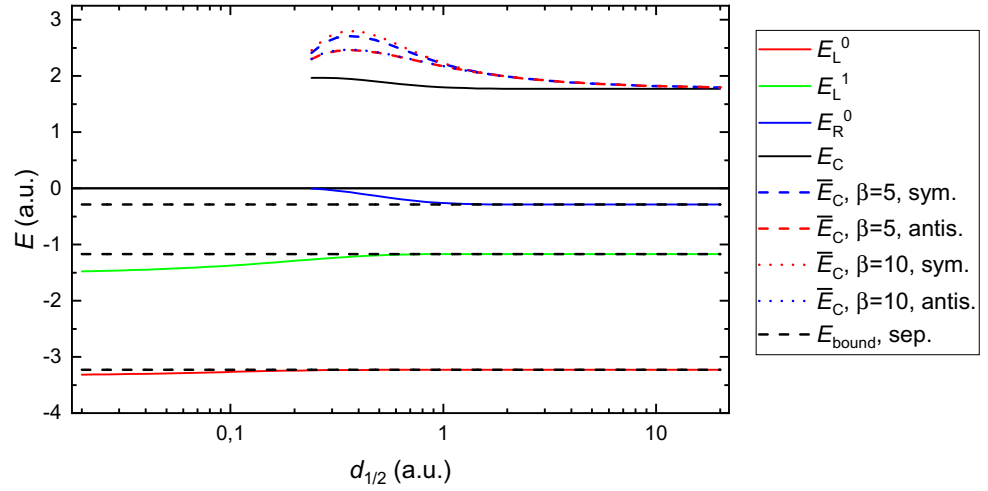
označení	$d_{1/2}$ (a.u.)	d_L (a.u.)	d_R (a.u.)	V_L (a.u.)	V_R (a.u.)	E_C
A1	volný	3	1,6	1	1	ZZE
A2	volný	1,8	0,2	4	4	ZZE
B1	10	1,5	1,1	4	volný	ZZE
C1	10	1,5	1,1	4	1	volný

3.1 Závislost na vzdálenosti jam – modely A

Na obrázku 3.1 jsou vykreslena energetická schémata modelů A1 a A2. V obou modelech vidíme, že pro velké vzdálenosti jam odpovídají energie vázaných stavů, energiím vázaných stavů v potenciálu s jednou pravoúhlou jámou o parametrech levé nebo pravé jámy potenciálu \hat{V} . Vzájemná blízkost jam způsobí změnu energetických hladin vázaných stavů v celkovém jednočásticovém potenciálu. Energie stavu v kontinuu příslušející na základě ZZE (1.25) je pro menší $d_{1/2}$ vyšší. Oprava energie prvního řádu způsobí další zvýšení energie stavu v kontinuu odpovídající na základě opraveného ZZE (1.32). Pro velké vzdálenosti jam nicméně oprava pozvolna klesá k nule. Navíc jsou takovéto hodnoty \bar{E}_C obecně vyšší pro symmetrizované než pro antisymmetrizované dvoučásticové vlnové funkce a pro symmetrizované je také vidět výrazný nárůst pro zvolenou vyšší hodnotu parametru regularizace. Oba tyto fakty souvisí s tím, že antisymmetrizací se sníží hustota pravděpodobnosti v okolí $x_1 = x_2$, tedy $r = 0$, kde se regularizovaný potenciál nejvíce liší od původního coulombického, a nejvíce se tam mění s rostoucí hodnotou β .



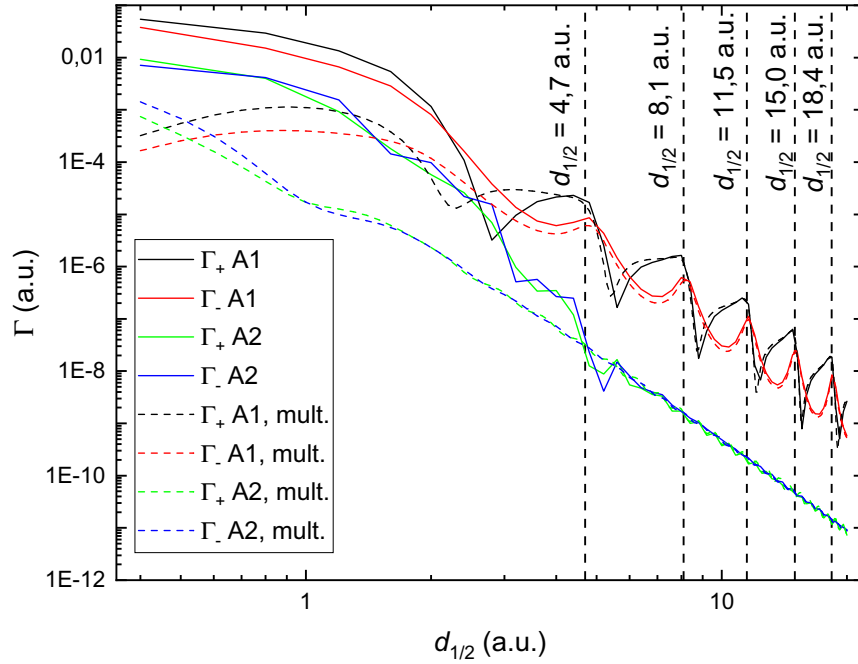
(a) Model A1.



(b) Model A2.

Obrázek 3.1: Energetická schémata modelů A1 a A2, tedy závislost energií vázaných jednočásticových stavů E_L^0 , E_L^1 a E_R^0 na polovině vzdálenosti jam $d_{1/2}$. Dále je uvedena závislost energie jednočásticového stavu v kontinuu E_C dle (1.25) a dle (1.32) pro symetrizované i antisymetrizované dvoučásticové vlnové funkce a pro dvě různé hodnoty parametru regularizace β . Vodorovné úsečky označené $E_{\text{bound, sep.}}$ označují hodnotu energií vázaných stavů v jedné pravoúhlé konečně hluboké potenciálové jámě o parametrech odpovídajících levé nebo pravé jámě v příslušném modelu.

Dále si všimněme, že jednočásticový potenciál modelu A2 nemá dle obrázku 3.1b tři vázané stavy pro $d_{1/2} \lesssim 0,2$ a.u., a tudíž závislost rozpadových šířek v tomto modelu nemá smysl počítat pro tyto malé vzdálenosti jam. Závislost hodnot \bar{E}_C (1.32) v modelech A1 a A2 klesá (alespoň pro symetrizované dvoučásticové vlnové funkce) s klesajícím $d_{1/2}$ pro malé hodnoty $d_{1/2}$. Tento efekt souvisí s přibližováním energie nejvýše excitovaného vázaného stavu k hraně potenciálové jámy. V důsledku toho je vlnová funkce příslušného stavu méně lokalizována v oblasti jam, tedy i v oblasti maxima regularizovaného interakčního potenciálu, což vysvětluje pokles příspěvku \hat{V}_{int} k energii, a tedy i pokles příslušného \bar{E}_C .

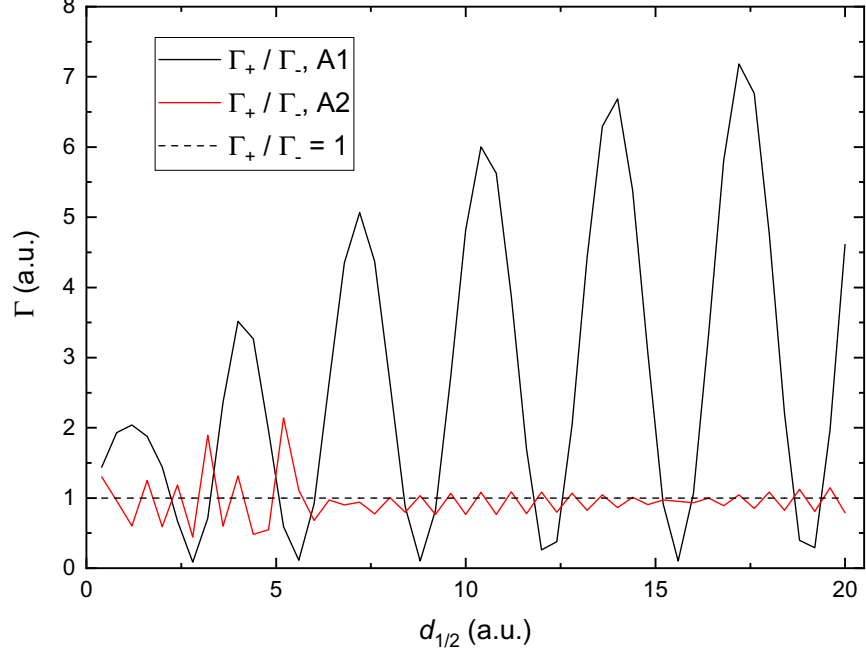


Obrázek 3.2: Srovnání parciálních rozpadových šířek vypočtených přesně dle (2.1) (plné křivky) a v dipólové aproximaci (1.44) (přerušované křivky) v modelech A1 a A2 pro nesymetrizované vlnové funkce. Uvažujeme opravený ZZE (1.32). Parametry výpočtu: $\beta = 5$ a.u., $L = 35$ a.u.

Nyní obecně popišme charakter závislosti $\Gamma_{\pm}(d_{1/2})$. Na obrázku 3.2 vidíme závislost parciálních rozpadových šířek na polovině vzdálenosti jam $d_{1/2}$ v modelech A1 a A2 srovnanou s rozpadovými šířkami odpovídajícími dipólové aproximaci (1.44). Závislost v modelu A1 má pro $d_{1/2} \gtrsim 3$ a.u. dvě složky, a to složku, která má v grafu s logaritmickou škálou na obou osách charakter klesající lineární funkce, a složku periodickou. Tvar periodické složky se navíc liší pro jednotlivé rozpadové kanály.

V modelu A2 pozorujeme podobné chování s následujícími rozdíly: asymptotické podoby zde závislost nabývá až pro $d_{1/2} \gtrsim 5$ a.u., rozpadové šířky jsou přibližně o dva řády nižší pro stejnou hodnotu $d_{1/2}$ než u modelu A1, a amplituda periodické části je nižší než u modelu A1. Poslední z rozdílů je lépe zachycen na obrázku 3.3, kde je vykreslena závislost podílu Γ_+/Γ_- na polovině vzdálenosti jam $d_{1/2}$. Kromě větší amplitudy periodické části u modelu A1 je zde také vidět, že u modelu A1 dominuje kanál Γ_+ . U modelu A2 tento závěr učinit nemůžeme, protože krok hodnoty $d_{1/2}$, s jakým byl proveden výpočet, k tomu není dostatečný. Nakonec z tohoto grafu také vidíme, že perioda oscilační složky závislosti $\Gamma_{\pm}(d_{1/2})$ je pro model A2 nižší než pro model A1, což souvisí s vyšší hodnotou energie E_C .

Na obrázku 3.2 dále vidíme vypočtené parciální rozpadové šířky odpovídající dipólové aproximaci (1.44) maticového elementu $\langle \Psi_f | \hat{V}_{\text{int}} | \Psi_i \rangle$. Vidíme, že pro hodnotu $d_{1/2}$, pro kterou přejde závislost $\Gamma_{\pm}(d_{1/2})$ do výše popsané asymptotiky, se zároveň začne velmi dobře shodovat s příslušnou závislostí danou pouze příspěvkem vedoucího členu multipólového rozvoje.



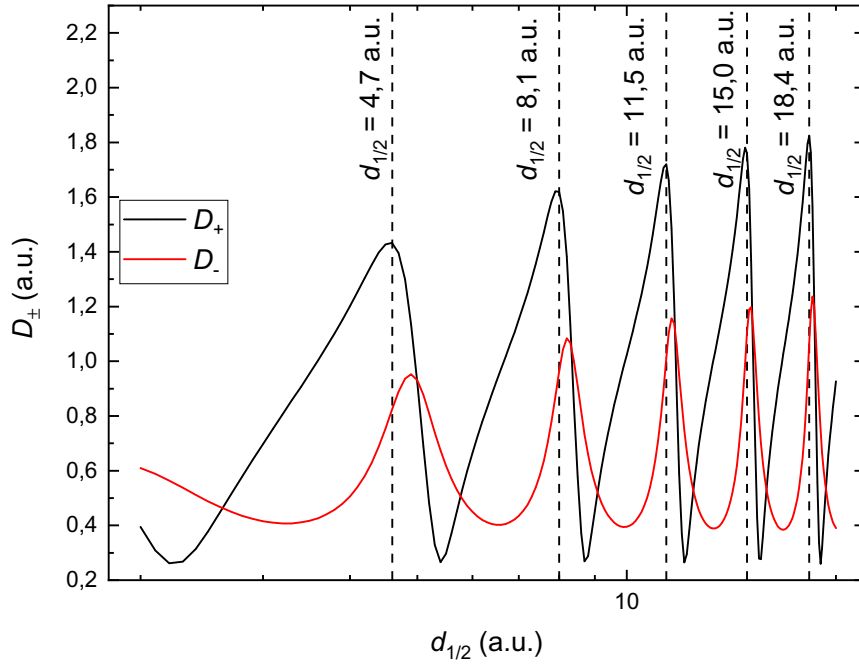
Obrázek 3.3: Srovnání závislosti veličiny Γ_+/Γ_- na $d_{1/2}$ pro modely A1 a A2 a nesymetrizované vlnové funkce. Uvažujeme opravený ZZE (1.32). Parametry výpočtu: $\beta = 5$ a.u., $L = 35$ a.u.

V reálných slabě vázaných systémech, např. atomárních klastrech s van der Waalsovou nebo vodíkovou vazbou, rozpadové šířky podobnou periodickou složku závislosti $\Gamma(d_{1/2})$ nevykazují [10]. Podobné oscilace se naopak objevily v článku [3], kde byl zkoumán ICD v kvantových tečkách pomocí časové Schrödingerovy rovnice. Zde byly oscilace vysvětleny pomocí efektivního potenciálu působícího na odcházející elektron, daného součtem jednočásticového potenciálu a coulombické repulze od vázaného elektronu v levé jámě [3]

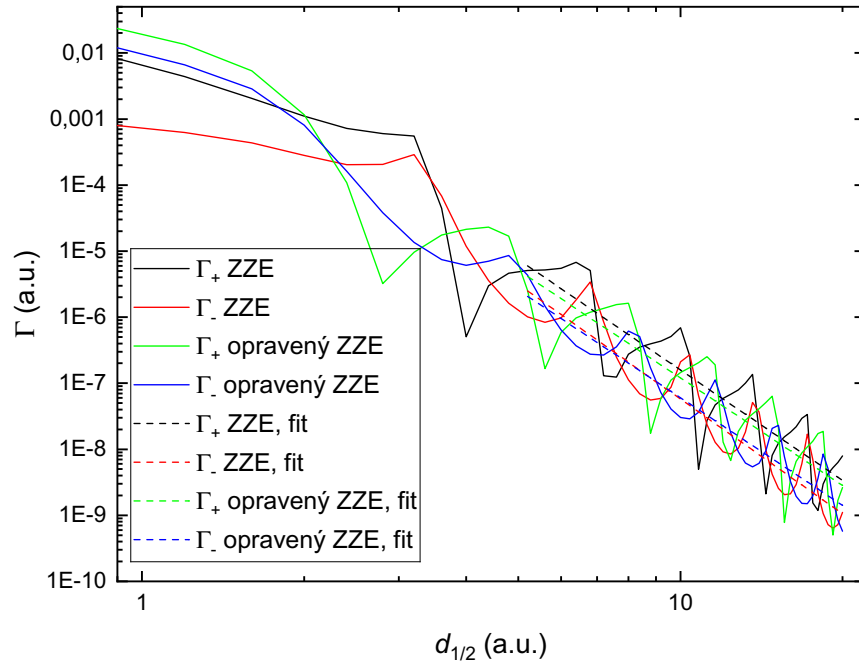
$$\hat{V}_{\text{eff}} = \hat{V} + \langle \psi_L^0 | \hat{V}_{\text{int}} | \psi_L^0 \rangle. \quad (3.1)$$

Pokud má tento efektivní potenciál na okrajích levé jámy maxima, a mezi nimi nižší hodnoty, může se v něm odcházející elektron dočasně zachytit v metastabilním stavu. My jsme však v našem modelu dostali oscilace i přesto, že s takovýmto efektivním potenciálem vůbec nepracujeme. V rámci našeho přístupu lze oscilace dosledovat do maticového elementu dipólového momentu $\langle \psi_C^\pm | \hat{\xi}_2 | \psi_R^0 \rangle$ (1.44), vykresleného na obrázku 3.4. Svislé čáry jsou vykresleny pro stejné hodnoty $d_{1/2}$ také na obrázku 3.2, vidíme, že se shodují polohy maxim obou závislostí, a profil oscilací je velice podobný.

Také dominanci rozpadového kanálu + lze vysvětlit pomocí efektivního potenciálu (3.1), ten totiž představuje dodatečnou bariéru pro odcházející elektron, který se uvolnil z pravé jámy. Pro elektron bude snadnější se od bariéry odrazit, a odejít doprava (kanál +), než skrz ni protunelovat a odejít doleva (kanál -). V prvním řádu poruchové teorie, aplikovaném v této práci, kde není efektivní potenciál zahrnut, lze stále dominanci kanálu + vysvětlit odrazem elektronu v kontinuu od levé jámy, ke kterému dochází i bez dodatečné bariéry.

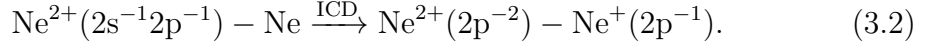


Obrázek 3.4: Závislost $D_{\pm} \equiv |\langle \psi_C^{\pm} | \hat{\xi}_2 | \psi_R^0 \rangle|$ na $d_{1/2}$ v modelu A1. Parametry výpočtu: $\beta = 5$ a.u., $L = 35$ a.u.



Obrázek 3.5: Srovnání parciálních rozpadových šířek vypočtených se zahrnutím ZZE (1.25) a opraveného ZZE (1.32) v modelu A1 pro nesymetrizované vlnové funkce. Parametry výpočtu: $\beta = 5$ a.u., $L = 35$ a.u.

Narozdíl od oscilací závislosti $\Gamma(d_{1/2})$ je dominance jednoho z rozpadových kanálů skutečně pozorována. Např. článek [12] popisuje následující schéma



Ukazuje se, že odlétající elektron preferuje směr od těžiště dimeru k atomu $\text{Ne}^+(2p^{-1})$, ze kterého byl uvolněn. Tento směr odpovídá našemu kanálu +.

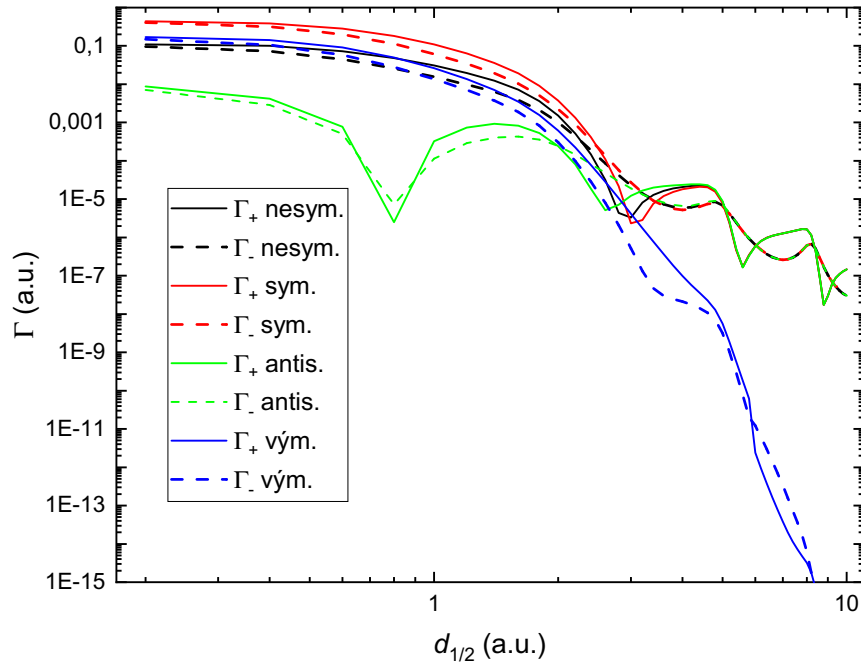
Nyní se věnujme rozdílu mezi vypočtenými závislostmi, uvažujeme-li ZZE (1.25) nebo opravený ZZE (1.32). Na obrázku 3.5 můžeme vidět porovnání těchto dvou přístupů v modelu A1. Pro malé hodnoty $d_{1/2}$ dává opravený ZZE vyšší hodnoty rozpadových šířek. Pro vyšší hodnoty $d_{1/2}$, pro které obě závislosti přechází do asymptotiky popsané výše, vidíme, že profil periodických složek závislostí pro jednotlivé rozpadové kanály je téměř stejný v obou přístupech. Periodické části se však zdají být posunuté o přibližně polovinu periody.

Pro lepší charakterizaci klesajícího trendu asymptotické závislosti $\Gamma_{\pm}(d_{1/2})$ byly tyto vypočtené hodnoty nafitovány v modelu A1 pro $d_{1/2} > 5$ a.u. a v modelu A2 pro $d_{1/2} > 7$ a.u. funkcí $\Gamma_{\pm} = a d_{1/2}^b$. Výsledky fitu můžeme vidět v tabulce 3.2. Nafitovaná závislost pro model A2 není vykreslena v grafu, protože by se v rámci rozlišení překrývala se samotnými vypočtenými hodnotami Γ_{\pm} . Všechny nafitované hodnoty koeficientu b leží v rozsahu $b \in (-5,8; -5,4)$ a.u., jsou tedy systematicky vyšší než hodnota $b = -6$ a.u., která odpovídá asymptotice $\Gamma(R)$ dle multipólového rozvoje (1.43). Hodnoty statisticky určené odchylky jsou přibližně o řád větší v modelu A1, což je způsobeno větší amplitudou periodické složky závislosti. Dále vidíme, že hodnota koeficientu fitu a je v modelu A1 výrazně vyšší pro rozpadový kanál označený +, což jsme již diskutovali výše. V modelu A2 jsou hodnoty koeficientu a přibližně o dva řády nižší, než ty v modelu A1. Příčinu můžeme nahlédnout v odhadu $\tilde{\Gamma}$ (1.51). V modelu A2 je totiž přibližně desetkrát větší E_C než v modelu A1 a zároveň jsou v něm vázané stavy více lokalizovány z důvodu jejich nižší energie, viz obrázek 3.1.

Tabulka 3.2: Tabulka koeficientů fitu vypočtených závislostí rozpadových šířek $\Gamma_{\pm}(d_{1/2})$ funkcí ve tvaru $\Gamma_{\pm} = a d_{1/2}^b$. První tři sloupce specifikují model, rozpadový kanál, a informaci o zahrnutí ZZE (neop.), či opraveného ZZE (op.). Jsou uvedeny také standardní statistické odchylky σ_b koeficientu b .

model	kanál	ZZE	a (a.u.)	b (a.u.)	σ_b (a.u.)
A1	+	neop.	$5,6 \times 10^{-2}$	-5,55	0,57
A1	-	neop.	$3,9 \times 10^{-2}$	-5,77	0,38
A1	+	op.	$3,1 \times 10^{-2}$	-5,41	0,55
A1	-	op.	$1,5 \times 10^{-2}$	-5,41	0,36
A2	+	op.	$2,1 \times 10^{-4}$	-5,67	0,08
A2	-	op.	$2,7 \times 10^{-4}$	-5,74	0,03

Na obrázku 3.6 můžeme vidět závislosti parciálních rozpadových šířek pro různé symetrizace dvoučásticových vlnových funkcí pro $d_{1/2} \rightarrow 0^+$ v modelu A1. Vidíme, že se pro všechny symetrizace blíží rozpadové šířky při zmenšující se hodnotě $d_{1/2}$ k určité hodnotě přibližně konstantně. Navíc se v této limitě sobě blíží parciální rozpadové šířky pro jednotlivé kanály. Tato skutečnost souvisí s tím, že v limitě $d_{1/2}$ se jámy spojí v jednu, a jednočásticový potenciál se tedy stane symetrickým. Dále vidíme, že pro velmi malé hodnoty $d_{1/2}$ je nejvyšší Γ odpovídající symetrizovaným vlnovým funkcím a nejnižší Γ odpovídající antisymetrizovaným vlnovým funkcím. Vysvětlení je analogické jako u poruchových příspěvků k energiím dvoučásticových stavů, antisymetrizace způsobí pokles hustoty pravděpodobnosti vlastních stavů v okolí $x_1 = x_2$, kde má regularizovaný potenciál maximální hodnotu. Pro $d_{1/2} \gtrsim 3$ a.u. je příspěvek výměnného členu nižší než člen přímý (nesymetrizované vlnové funkce). Pro $d_{1/2} \gtrsim 4$ a.u. je již rozdíl řádový, výměnný člen je tedy zanedbatelný a rozpadové šířky vychází stejně pro symetrizované i antisymetrizované vlnové funkce.



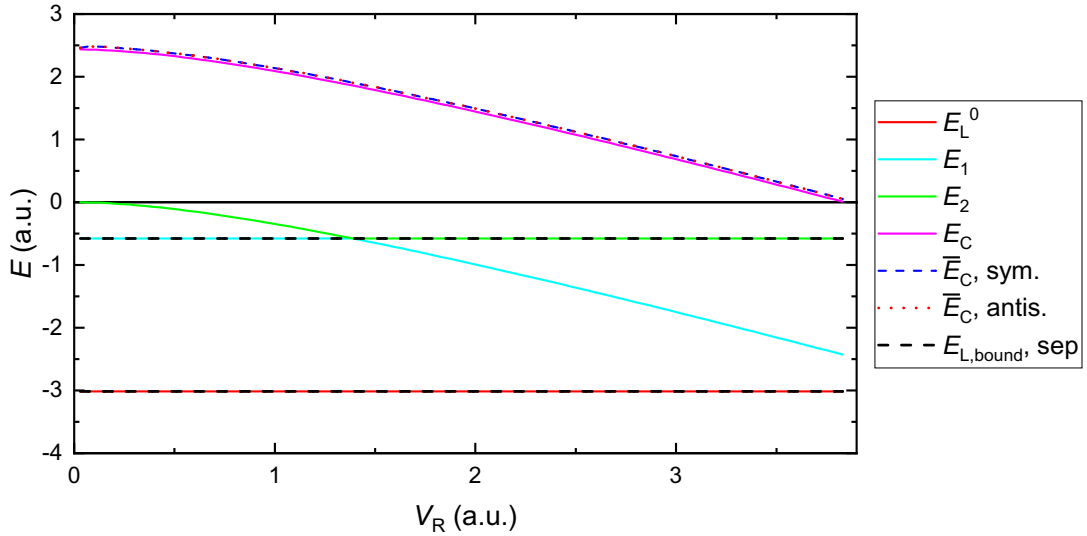
Obrázek 3.6: Srovnání parciálních rozpadových šířek pro nesymetrizované, symetrizované a antisymetrizované vlnové funkce a parciálních rozpadových šířek odpovídajících výměnnému členu (1.37) v modelu A1. Parametry výpočtu: $\beta = 30$ a.u., $L = 30$ a.u.

Shrňme nyní podstatné výsledky této kapitoly. Náš model dobře popisuje asymptotiku $\propto R^{-6}$ parciálních rozpadových šířek, které se pro větší vzdálenosti jam R shodují s dipólovou aproximací. Pro nízké energie odlétajícího elektronu se však v modelu projeví výrazné nefyzikální oscilace. Porovnáním s literaturou [3] jsme zjistili, že tyto oscilace se objevují v efektivně 1D modelu i bez použití poruchové teorie. Konceptně přímočarým rozšířením by bylo přejít do vyšší dimenze. Oscilace se však v závislosti $\Gamma(R)$, byť s menší amplitudou, ukázaly také v dvourozměrném časově závislém modelu ICD, viz [11]. Pro nízké energie odlétajícího elektronu náš model předpovídá experimentálně pozorovanou dominanci rozpadového kanálu +.

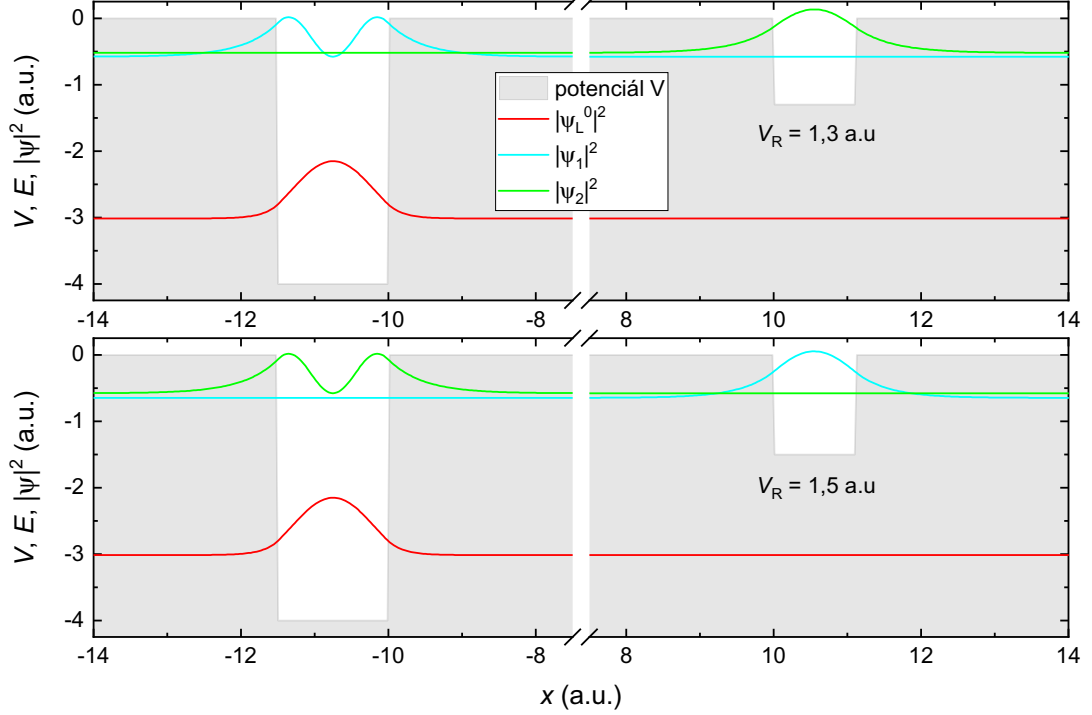
3.2 Závislost na hloubce pravé jámy – model B

Na obrázku 3.7 jsou vykreslena energetická schémata modelu B1. Jámy se v něm nacházejí poměrně daleko od sebe, $d_{1/2} = 10$ a.u., jsou tedy v takové vzdálenosti, kdy jsou zanedbatelné rozdíly mezi hodnotami \bar{E}_C , získanými opravami pro symetrizované a antisymetrizované dvoučásticové stavy, a pro různé hodnoty β , proto jsou na obrázku 3.7 uvedeny pouze závislosti $\bar{E}_C(V_R)$ pro $\beta = 5$ a.u.. Zároveň vidíme, že v rámci rozlišení na daném obrázku je \bar{E}_C odpovídající na základě opraveného ZZE mírně vyšší než E_C odpovídající na základě neopraveného ZZE, nicméně rozdíl mezi těmito dvěma hodnotami je velmi malý. Budeme proto v tomto modelu počítat s neopraveným ZZE.

Rozsah hodnot hloubky pravé jámy V_R v modelu B1 je zdola omezen podmínkou na existenci tří vázaných stavů: $V_R \gtrsim 0,03$ a.u., a zhora omezen podmínkou na kladnou hodnotu E_C odpovídajícího na základě ZZE: $V_R \lesssim 3,84$ a.u. (viz obrázek 3.7). V okolí $V_R \approx 1,4$ a.u. nejsou stavy s energiemi E_1 , E_2 lokalizovány každý v jedné jámě. Kdybychom se na spektrum energie modelu B1 na obrázku 3.7 podívali s vyšším rozlišením, viděli bychom, že zde dochází k tzv. *vyhnutému křížení* [13, str. 415]. Na obrázku 3.8 můžeme vidět hustoty pravděpodobnosti jednočásticových vázaných stavů v modelu B1 pro dvě různé hloubky pravé jámy V_R , které jsou v blízkém okolí zmíněného vyhnutého křížení. Vidíme, že pro nižší hodnotu V_R je $|\psi_1\rangle \equiv |\psi_L^1\rangle$ a $|\psi_2\rangle \equiv |\psi_R^0\rangle$, pro vyšší hodnotu V_R je naopak $|\psi_1\rangle \equiv |\psi_R^0\rangle$ a $|\psi_2\rangle \equiv |\psi_L^1\rangle$.



Obrázek 3.7: Závislost energií vázaných jednočásticových stavů E_L^0 a $\{E_1, E_2\} = \{E_L^1, E_R^0\}$ na hloubce pravé jámy V_R v modelu B1. Dále je uvedena závislost energie jednočásticového stavu v kontinuu E_C dle (1.25) a dle (1.32) pro symetrizované dvoučásticové vlnové funkce pro hodnotu parametru regularizace $\beta = 5$ a.u.. Vodorovné úsečky označené E_{bound} označují hodnotu energií vázaných stavů v jedné pravoúhlé konečně hluboké potenciálové jámě o parametrech odpovídajících levé jámě.



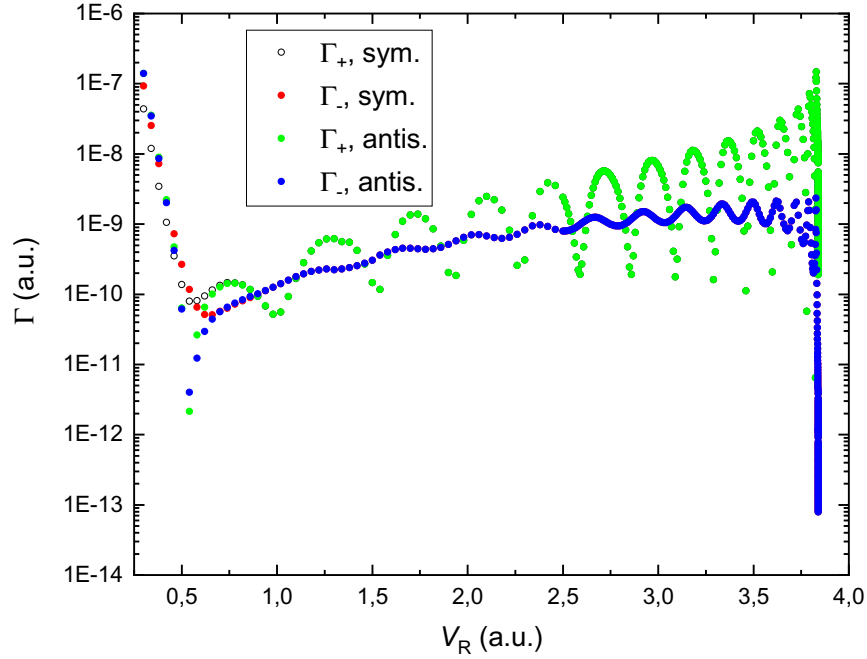
Obrázek 3.8: Hustoty pravděpodobnosti jednočásticových vázaných stavů v modelu B1 pro dvě různé hodnoty V_R . Grafy funkcí jsou vertikálně posunuty o hodnotu energie příslušného vázaného stavu.

Závislost $\Gamma_{\pm}(V_R)$ v modelu B1 můžeme vidět v plném rozsahu hloubek pravé jámy na obrázku 3.9. Pomineme-li chování v obou koncích rozsahu V_R , vidíme kromě obecného rostoucího trendu závislosti opět i oscilační složku, jejíž amplituda roste a perioda klesá s rostoucím V_R .

Dále vidíme, že pro $V_R \gtrsim 0,7$ a.u. se v rámci rozlišení v grafu neliší hodnoty odpovídající symetrizovaným a antisymetrizovaným vlnovým funkcím. To souvisí s tím, že pro větší hodnoty hloubky pravé jámy V_R jsou všechny vázané stavy v jednočásticovém potenciálu dobře lokalizovány v příslušných jámách, a tudíž překryv mezi vázanými stavy příslušujícími různým jámám, který vystupuje ve výměnném členu, je zanedbatelný. Pro menší hodnoty V_R se výměnný člen projeví, protože vázaný stav příslušující pravé jámě se přibližováním ke kontinuu stává méně lokalizovaným.

Podrobněji můžeme vidět rozdíl mezi závislostmi $\Gamma_{\pm}(V_R)$ pro symetrizované a antisymetrizované vlnové funkce pro $V_R < 0,7$ a.u. na obrázku 3.10. Pro zmenšující se V_R výsledné parciální rozpadové šířky rostou a nabývají maxima pro $V_R \approx 0,06$ a.u., při dalším zmenšování V_R začínají opět klesat. Nárůst souvisí s delokalizací vázaného stavu s nejvyšší energií, jak bylo zmíněno výše. Stejný efekt má zřejmě za následek i maximum závislosti Γ_{\pm} , protože od jistého momentu další delokalizace daného vázaného stavu začne zmenšovat překryv s vázanými stavy v druhé jámě. Všimněme si, že pro symetrizované i antisymetrizované vlnové funkce je pro malé hodnoty V_R dominantní rozpadový kanál $-$. Toto lze vysvětlit podobně jako dominantní kanál $+$ v modelu A1: pro malé hodnoty V_R převládne výměnný člen reprezentující uvolnění elektronu z levé jámy, ten se poté může odrazit od jámy pravé.

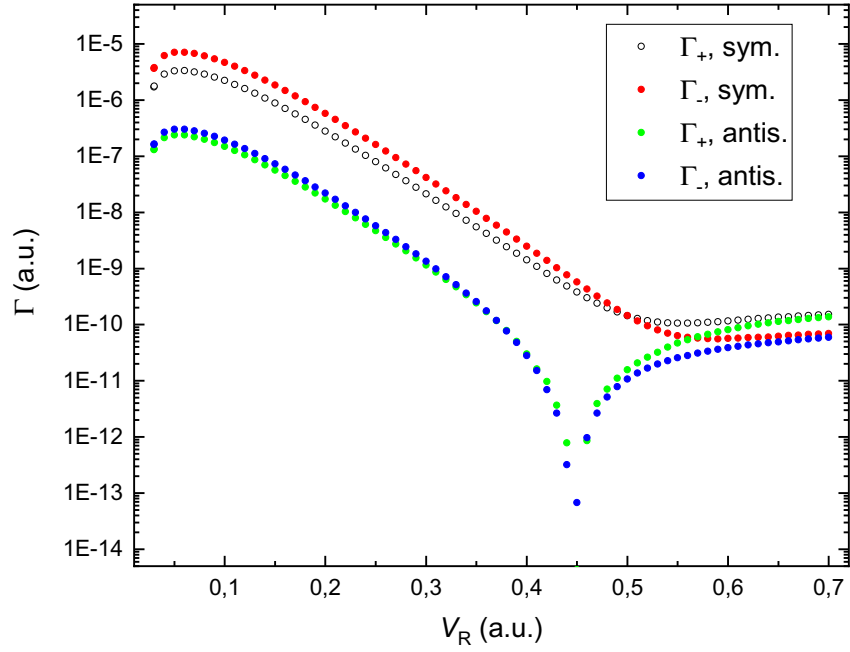
Na obrázku 3.11 můžeme vidět závislost parciálních rozpadových šířek na energii E_C , která odpovídá energiím vázaných stavů skrze ZZE. Je zobrazena oblast pro velmi malé hodnoty E_C a závislost je nafitována funkcí $\Gamma_{\pm} = a E_C^b$. Výsledky fitu shrnuje tabulka 3.3. Vidíme, že pro oba rozpadové kanály jsou parciální rozpadové šířky v asymptotice $E_C \rightarrow 0^+$ dány přibližně jako $\Gamma_{\pm} \propto \sqrt{E_C}$, což odpovídá limitnímu chování funkce $\bar{\Gamma}$ (1.51). Dále opět vidíme dominanci rozpadového kanálu označeného jako +, hodnoty Γ_+ jsou pro malé hodnoty E_C o 3 řády vyšší než hodnoty Γ_- .



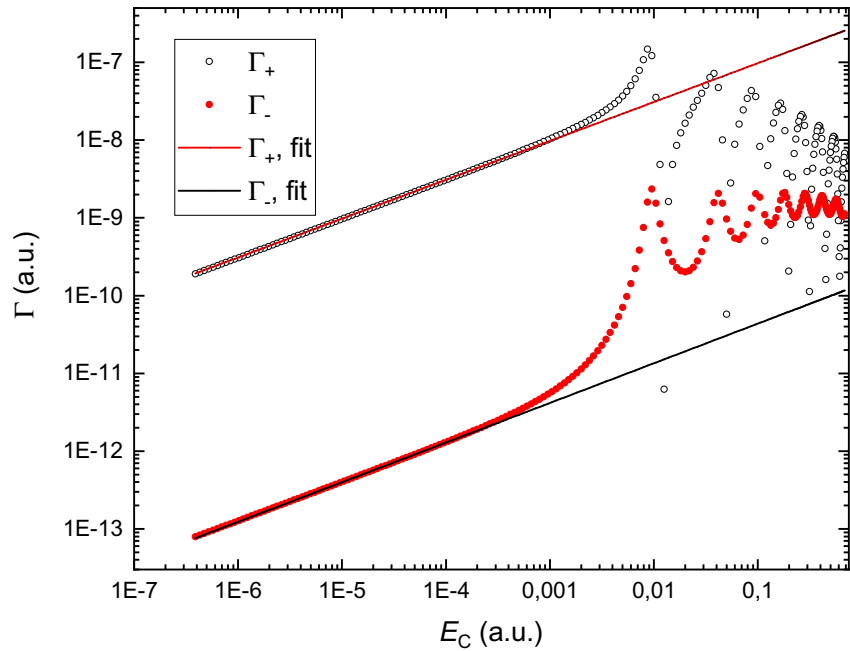
Obrázek 3.9: Srovnání závislosti parciálních rozpadových šířek Γ_{\pm} na hloubce pravé jámy V_R pro symetrizované a antisymetrizované vlnové funkce v modelu B1. Parametry výpočtu: $\beta = 5$ a.u., $L = 25$ a.u.

Tabulka 3.3: Tabulka koeficientů fitu vypočtených závislostí rozpadových šířek $\Gamma_{\pm}(E_C)$ z modelu B1 funkcí ve tvaru $\Gamma_{\pm} = a E_C^b$. První sloupec specifikuje rozpadový kanál. Jsou uvedeny také standardní statistické odchylky σ_b koeficientu b .

kanál	a (a.u.)	b (a.u.)	σ_b (a.u.)
+	$3,1 \times 10^{-7}$	0,5017	0,0002
-	$1,4 \times 10^{-10}$	0,5087	0,0008



Obrázek 3.10: Srovnání závislostí partiálních rozpadových šířek Γ_{\pm} na hloubce pravé jámy V_R pro symetrizované a antisymetrizované vlnové funkce v modelu B1, detail pro $V_R < 0,7$ a.u. Parametry výpočtu $\beta = 5$ a.u., $L = 25$ a.u.



Obrázek 3.11: Srovnání závislostí partiálních rozpadových šířek Γ_{\pm} na energii E_C elektronu v kontinuu odpovídající na základě ZZE (1.25) pro symetrizované vlnové funkce v modelu B1. Nafitovaná asymptotika pro $E_C \rightarrow 0^+$. Parametry výpočtu $\beta = 5$ a.u., $L = 25$ a.u.

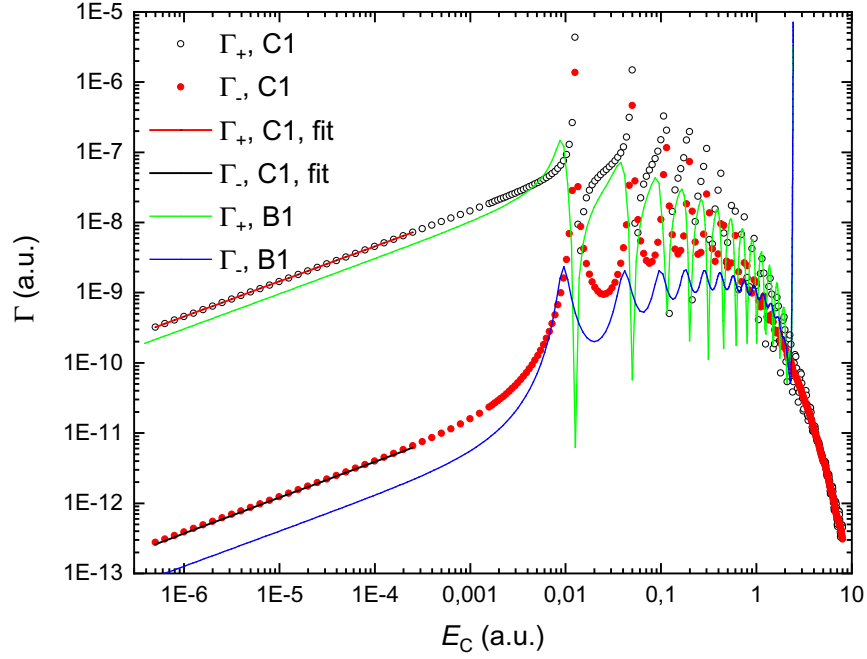
3.3 Závislost na energii odcházejícího elektronu – model C

Připomeňme, že model C zkoumá závislost $\Gamma_{\pm}(E_C)$ bez požadavku na splnění ZZE, tedy pro fixní hodnoty všech parametrů jednočásticového potenciálu. Tato závislost je vykreslena na obrázcích 3.12 a 3.13 pro symetrizované vlnové funkce. Závislosti pro antisymetrizované vlnové funkce jsou v rámci rozlišení na grafech totožné. Závislost byla nafitována pro $E_C \rightarrow 0^+$ funkcí ve tvaru $\Gamma = aE_C^b$. Výsledky fitu můžeme vidět v tabulce 3.4. Opět vidíme, že v limitě nízkých energií přibližně platí $\Gamma_{\pm} \propto \sqrt{E_C}$, a opět je dominantní rozpadový kanál +, s hodnotami vyššími přibližně o tři řády než pro druhý kanál. Závislosti na obrázku 3.13 byly pro $E_C > 2$ a.u. nafitovány funkcí ve tvaru $\Gamma_{\pm} = aE_C^b e^{cE_C}$, výsledky fitu můžeme opět vidět v tabulce 3.4. Zde se nepodařilo data nafitovat funkcí ve tvaru $\tilde{\Gamma}$ (1.51), v limitě vysokých energií tedy tato aproximace není použitelná. Vidíme, že pro vysoké energie je oscilační složka závislosti Γ_- ve srovnání s Γ_+ velmi malá. Pro vysoké energie $E_C \gtrsim 1$ a.u. jsou parciální rozpadové šířky pro oba kanály srovnatelné. Takto rychlý elektron již „nevidí“ potenciálové jámy a je velmi malá pravděpodobnost, že se od nich odrazí.

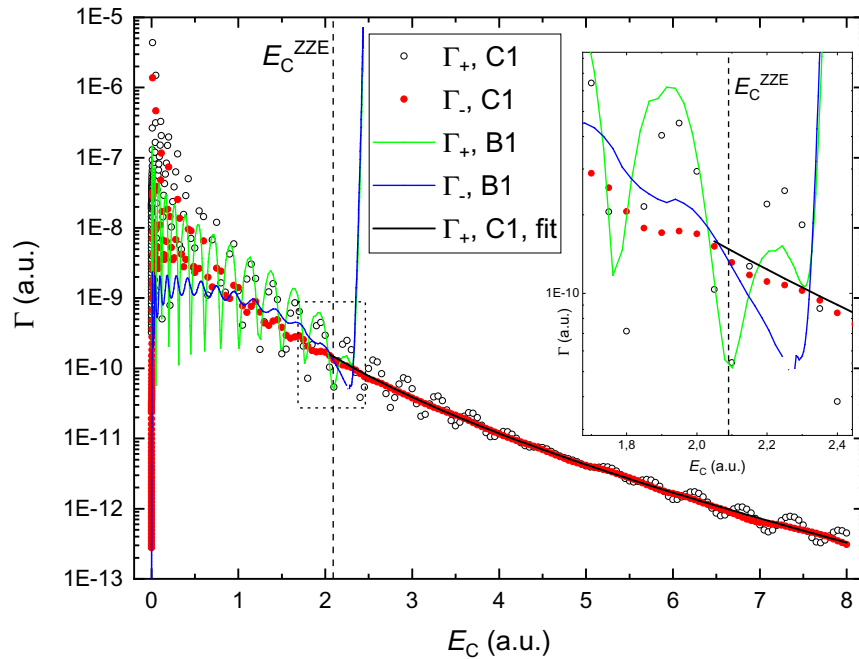
Ve zmíněných obrázcích též vidíme analogické závislosti z modelu B1. Vidíme, že pro rozsah energií E_C , které povoluje ZZE v kombinaci s parametry modelu B1 jsou závislosti pro oba modely velice podobné, vykazují podobné oscilační chování a pro $E_C < 1$ a.u. jsou hodnoty z modelu B1 systematicky nižší. V obrázku 3.13 také vidíme svislou čarou naznačenou energii E_C , která odpovídá energiím vázaných stavů v modelu C1 na základě ZZE (1.25). Pro tuto energii musí vyjít stejné parciální rozpadové šířky pro model B1 a C1. Tak se skutečně stalo, jak můžeme vidět na detailním pohledu na podoblast grafu vyznačenou obdélníkem.

Tabulka 3.4: Tabulka koeficientů fitu vypočtených závislostí rozpadových šířek $\Gamma_{\pm}(E_C)$ z modelu C1 funkcí ve tvaru $\Gamma_{\pm} = aE_C^b$ pro asymptotiku $E_C \rightarrow 0^+$ a funkcí ve tvaru $\Gamma_{\pm} = aE_C^b e^{cE_C}$ pro $E_C > 2$ a.u.. První sloupec specifikuje oblast hodnot energií E_C , v které byl proveden fit, druhý sloupec specifikuje rozpadový kanál. Jsou uvedeny také standardní statistické odchylky σ_b , σ_c koeficientů b , c .

asymptotika	kanál	a (a.u.)	b (a.u.)	σ_b (a.u.)	c (a.u.)	σ_c (a.u.)
$E_C \rightarrow 0^+$	+	$4,6 \times 10^{-7}$	0,50042	0,00006	–	–
$E_C \rightarrow 0^+$	–	$4,3 \times 10^{-10}$	0,507	0,001	–	–
$E_C > 2$ a.u.	+	$2,5 \times 10^{-9}$	–2,57	0,39	–0,45	0,09
$E_C > 2$ a.u.	–	$2,2 \times 10^{-9}$	–2,31	0,06	–0,51	0,01



Obrázek 3.12: Srovnání závislostí parciálních rozpadových šířek Γ_{\pm} na energii E_C elektronu v kontinuu vypočtených v modelech B1 a C1 pro symetrizované vlnové funkce. Nafitovaná asymptotika $E_C \rightarrow 0^+$ v modelu C1. Parametry výpočtu: $\beta = 5$ a.u., $L = 25$ a.u.



Obrázek 3.13: Srovnání závislostí parciálních rozpadových šířek Γ_{\pm} na energii E_C elektronu v kontinuu vypočtených v modelech B1 a C1 pro symetrizované vlnové funkce. Hodnoty z modelu C1 jsou pro $E_C > 2$ a.u. nafitovány funkcí $\Gamma_{\pm} = a E_C^b e^{c E_C}$. Svislá čára označuje na vodorovné ose hodnotu E_C^{ZZE} – energii elektronu v kontinuu odpovídající energiím vázaných stavů v modelu C1 na základě ZZE (1.25). Parametry výpočtu: $\beta = 5$ a.u., $L = 25$ a.u.

Závěr

V první kapitole jsme zformulovali náš model ICD, zavedli jsme jednočásticový potenciál se dvěma pravoúhlými konečně hlubokými potenciálovými jámami a shrnuli postup hledání stacionárních stavů příslušného hamiltoniánu. Dále jsme zahrnuli coulombickou interakci elektronů pomocí Fermiho zlatého pravidla a interakční potenciál jsme pro účely numerické integrace zregularizovali. Ukázali jsme multipólový rozvoj elementu interakčního potenciálu a jeho rozklad na přímý a výměnný člen.

V druhé kapitole jsme popsali numerický přístup k výpočtům, především k řešení soustavy navazujících podmínek. Srovnali jsme hustoty pravděpodobnosti vypočtené dvěma zavedenými metodami a srovnali jsme vhodnost jejich využití v různých konfiguracích modelu. Zvolili jsme volné a fixované jednočásticového potenciálu určené pro další výpočty a vykreslili jsme závislost energií vázaných stavů v jednočásticovém potenciálu v závislosti na volných proměnných.

Ve třetí kapitole jsme uvedli vypočtené závislosti parciálních rozpadových šířek na různých parametrech modelu. Závislost na vzdálenosti jam v asymptotě velkých vzdáleností vykazuje pokles o něco pomalejší než R^{-6} , předpovězený multipólovým rozvojem. Model dobře popisuje závislost rozpadových šířek na vzdálenosti atomů pro vyšší hodnoty energie odcházejícího elektronu. Pro pomalejší elektrony se ukázala významná nefyzikální periodická složka a fyzikální dominance jednoho z rozpadových kanálů. Dále byla uvedena závislost parciálních rozpadových šířek na hloubce pravé jámy a závislost na energii odcházejícího elektronu bez požadavku na ZZE. Obě tyto závislosti vykazovaly v limitě malých energií chování přímo úměrné odmocnině z energie odcházejícího elektronu a silnou dominanci jednoho z rozpadových kanálů.

Seznam použité literatury

- [1] T. Jahnke et al. Interatomic and intermolecular Coulombic decay. *Chem. Rev.*, 120(20):11295–11369, 2020.
- [2] T. Goldzak et al. Interatomic Coulombic decay in two coupled quantum wells. *Phys. Rev. B*, 91:165312, 2015.
- [3] A. Bande, K. Gokhberg, and L. Cederbaum. Dynamics of interatomic Coulombic decay in quantum dots. *J. Chem. Phys.*, 135:144112, 2011.
- [4] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum mechanics Volume II*. Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2nd edition, 2020.
- [5] R. Santra, J. Zobeley, and L. Cederbaum. Electronic decay of valence holes in clusters and condensed matter. *Phys. Rev. B*, 64:245104, 2001.
- [6] Wolfram Research, Inc. Mathematica, Version 12.2. Champaign, IL, 2020.
- [7] OriginLab Corporation. Origin, Version 2019. Northampton, MA, USA.
- [8] U. Fano. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. *Phys. Rev.*, 124:1866–1878, 1961.
- [9] P. Kolorenč and V. Averbukh. Fano-ADC(2,2) method for electronic decay rates. *J. Chem. Phys.*, 152:214107, 2020.
- [10] V. Averbukh and L. Cederbaum. Ab initio calculation of interatomic decay rates by a combination of the Fano ansatz, Green’s-function methods, and the Stieltjes imaging technique. *J. Chem. Phys.*, 123:204107, 2005.
- [11] A. Haller, D. Peláez, and A. Bande. Inter-Coulombic decay in laterally arranged quantum dots controlled by polarized lasers. *J. Phys. Chem. C*, 123(23):14754–14765, 2019.
- [12] K. Kreidi et al. Localization of inner-shell photoelectron emission and interatomic Coulombic decay in Ne₂. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 41(10):101002, 2008.
- [13] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum mechanics Volume I*. Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2nd edition, 2020.