

Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta

## **DIPLOMOVÁ PRÁCE**



Jiří Eliášek

### **Tvorba protonia při srážce antiprotonu s atomem vodíku**

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Martin Čížek, Ph.D.

Studijní program: Fyzika, teoretická fyzika

2007

Na tomto místě bych rád poděkoval RNDr. Martinu Čížkovy za jeho ochotu a vytrvalost při vysvětlování problematiky, konzultování výsledků a za mnoho užitečných nápadů a rad.

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce.

V Praze dne 10. 8. 2007

Jiří Eliášek

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>6</b>
<b>2</b>	<b>Separace elektronové a nukleonové dynamiky</b>	<b>7</b>
2.1	Použitá aproximace . . . . .	7
2.2	Odstranění diskretního stavu z kontinua . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Greenova funkce elektronu v poli protonu s antiprotonem</b>	<b>11</b>
3.1	Hamiltonián a jeho separace . . . . .	11
3.2	Angulární část . . . . .	12
3.3	Radiální část . . . . .	13
3.4	Konstrukce Greenovy funkce . . . . .	14
<b>4</b>	<b>Výpočet Greenovy funkce</b>	<b>15</b>
4.1	Závislost na numerických parametrech . . . . .	16
4.2	Póly Greenovy funkce . . . . .	25
<b>5</b>	<b>Výpočet veličiny <math>F(E)</math> (complex level shift)</b>	<b>26</b>
<b>6</b>	<b>Závěr</b>	<b>29</b>
<b>A</b>	<b>Sferoidální souřadnice</b>	<b>30</b>

Název práce: Tvorba protonia při srážce antiprotonu s atomem vodíku

Autor: Jiří Eliášek

Katedra (ústav): Ústav teoretické fyziky

Vedoucí diplomové práce: RNDr. Martin Čížek, Ph.D.

e-mail vedoucího: cizek@mbox.troja.mff.cuni.cz

Abstrakt: Cílem této práce je studovat srážky antiprotonů s atomy vodíku. Tuto srážku lze dobře popsat Bornovým-Oppenheimerovým přiblížením až do doby, než se jejich vzdálenost přiblíží k takzvanému Fermiho-Tellerovu poloměru. Zde již neexistuje vázaný stav pro elektron a ten opouští systém, zanechávaje za sebou vysoce excitovaný, vázaný stav protonu a antiprotonu, takzvaného protonia. Aby zůstala zachována platnost (zobecněné) Bornovy-Oppenheimerovy aproximace, můžeme zkonstruovat takzvanou diabatickou bázi v elektronovém Hilbertově prostoru. Tato práce se věnuje převážně konstrukci této diabatické báze. Nejprve vyřešíme časově nezávislou Schrödingrovu rovnici pro elektron v elektrostatickém poli dvou bodových nábojů, jejíž řešení použijeme ke konstrukci elektronových Greenových funkcí ve stejném systému. Tento úkol řešíme numericky ve sferoidálních souřadnicích a testujeme konvergenci v závislosti na použitých numerických parametrech. Dále popisujeme vyjmutí diskrétního stavu a důsledky této procedury na stavy kontinua. Spočteme Greenovu funkci ortogonalizovanou na diskrétní stav a z ní vypočítáme veličinu  $F(E)$  (complex level shift). Ta hraje klíčovou roli pro (budoucí) výpočet nukleonové dynamiky srážky antiprotonu s vodíkem. Studujeme vlastnosti této veličiny, abychom ověřili správnost našich výpočtů. Nakonec studujeme možnost nalezení jednoduché parametrizace veličiny  $F$ , popisující její závislost na energii a vzdálenosti mezi nukleony.

Klíčová slova: srážky částic, antiproton, neadiabatická aproximace

Title: Protonium formation in collisions of antiproton and hydrogen atom

Author: Jiří Eliášek

Department: Institute of Theoretical Physics

Supervisor: RNDr. Martin Čížek, Ph.D.

Supervisor's e-mail address: cizek@mbox.troja.mff.cuni.cz

Abstract: The goal of this work is to study collisions of antiprotons with hydrogen atoms. Colliding atomic hydrogen and antiproton can safely be described within Born-Oppenheimer approximation until the particles separation becomes close to the so called Fermi-Teller radius, where electron is no longer bound and escapes leaving behind metastable, bound state of proton and antiproton (protonium). The validity of (generalized) Born-Oppenheimer approximation can be restored by constructing the so called diabatic basis in the Hilbert space of electron moving in the Coulomb field of the two charged nucleons. The present work is devoted mainly to the construction of this diabatic basis. The first step is solving of time-independent Schrödinger equation for electron in electrostatic field of two point charges and construction of respective electronic Green's function. We solved this task numerically in spheroidal coordinates and tested convergence with respect to changes of all relevant numerical parameters. Then we describe the elimination of the discrete state and what consequence it has on the continuum. Then we compute Green's function orthogonalized to this discrete state and in terms of this function we construct the complex level-shift  $F(E)$ . This quantity will play key role in future calculation of the hadron motion in the antiproton-hydrogen collision. Properties of complex level shift are studied to verify our results. Finally we test possibility to find a simple analytic fit to dependence of  $F$  on energy and distance between nucleons.

Keywords: Particle collisions, antiproton, non-adiabatic dynamics, rearrangement collision

# 1 Úvod

Určení účinného průřezu tvorby protonia je důležité pro konstrukci antiprotonových pastí. V nich se vyskytují zbytkové plyny jako je například vodík. Vytvoří-li se při reakci s vodíkem v antiprotonové pasti protonium, dojde k jeho deexcitaci a následné anihilaci protonu s antiprotonem. Tento proces tak negativně přispívá k uchovávání antiprotonů v pastech. Antiprotony v pastech mají malou energii a to je obast, kterou se budeme zabývat. Tvorba protonia srážkou antiprotonu s vodíkovým atomem je také nejjednodušším příkladem procesu



a tedy hraje důležitou roli při ověřování přibližných metod. V blízké budoucnosti by se také měly objevit experimenty s antiprotony při nízkých energiích, jak uvádějí B. D. Esry a H. R. Sadeghpour v [15]. Tedy bude existovat možnost srovnání teoretických výsledků s experimentem. Stejně by bylo možné provést výpočty i pro jiné záporně nabitě exotické částice jako jsou miony, kaony, piony.

Teoretický popis procesu (1) můžeme rozdělit do tří částí: Elektronové dynamiky, parametrizace veličin k popisu dynamiky jader a popisu dynamiky jader. Tento rozklad vychází z Bornovy-Oppenheimerovy aproximace, i když, jak uvidíme v následujícím textu, musíme postupovat opatrně. Tato práce se bude zabývat prvními dvěma částmi. Spočteme elektronovou Greenovu funkci při fixní vzdálenosti protonu a antiprotonu a ukážeme její konvergenci v závislosti na numerických parametrech. Vypočítáme veličinu  $F(E)$  (complex level shift), která je významná při řešení nukleonové dynamiky a pokusíme se jí parametrizovat.

Protonium vzniká typicky blízko Fermiho-Telerova poloměru, který, jak se uvádí například v práci [14], má velikost  $R_{FT} = 0,639a.u.$ , tedy v místech původního elektronového orbitalu. Proton a antiproton jsou vzdáleny natolik, abychom mohli zanedbat silnou interakci a hamiltonián našeho problému bude:

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} + \frac{Z_1 Z_2}{R}, \quad (2)$$

kde  $M$  je redukovaná hmotnost pro soustavu proton antiproton,  $P$  je operátor relativní hybnosti protonu a antiprotonu,  $p$  je operátor hybnosti elektronu v těžiškové soustavě a  $r_1$  resp.  $r_2$  je vzdálenost elektronu od protonu resp. antiprotonu s nábojem  $Z_1 = 1$  resp.  $Z_2 = -1$ ,  $R$  je pak vzdálenost protonu

a antiprotonu. (používáme atomové jednotky  $\hbar = m = e = 1$ .)

Rozptyl antiprotonu na vodíku je tříčásticový problém. Ten není analyticky řešitelný ani v mechanice klasické. Budeme problém řešit numericky. V kvantové mechanice je i tento problém příliš složitý a musíme tedy přistoupit k dalším aproximacím. Jelikož proton a antiproton jsou mnohem těžší než elektron, můžeme předpokládat, že se elektronové stavy stihnou přizpůsobovat vzdálenosti těžkých baryonů. Tento popis je vhodný, pokud je vzdálenost protonu a antiprotonu  $R$  mnohem větší než Fermiho-Tellerův poloměr  $R_{FT}$ , kde se základní stav zanořuje do kontinua. My se tedy budeme zabývat zobecněním adiabatické aproximace, spočívajícím v konstrukci takzvané diabatické báze a to s jedním diabatickým stavem odpovídajícím (v nekonečnu) atomu vodíku v základním stavu.

Práce je uspořádána následovně: Nejprve ukážeme, jak lze separovat elektronovou a nukleonovou dynamiku a jakou bychom měli volit elektronovou bázi pro problém rozptylu antiprotonu na vodíkovém atomu. Následuje část o konstrukci této báze. V další kapitole pak řešíme bezčasovou Schrödingerovu rovnici a pomocí jejího řešení konstruujeme retardovanou Greenovu funkci. Diskutujeme numerické konvergence Greenovy funkce. Nakonec ukážeme vlastnosti veličiny  $F(E)$  a studujeme možnost její parametrizace.

## 2 Separace elektronové a nukleonové dynamiky

### 2.1 Použitá aproximace

Nejprve pár slov k aproximaci adiabatické. Ta spočívá v separaci vlnové funkce na část závislou na vzdálenosti (těžkých) jader a na elektronovou část, která je závislá na vzdálenosti jader jen parametricky. Tedy hamiltonián rozdělíme na:

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(R) + H_{el}(R), \quad (3)$$

kde elektronová část je v našem případě

$$H_{el} = \frac{p^2}{2} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_1} \quad (4)$$

a  $V(R) = \frac{Z_1 Z_2}{R}$ . Nyní definujeme vlastní stavy  $H_{el}$ , které splňují rovnici

$$H_{el}\phi_n(x, R) = E_n(R)\phi_n(x, R). \quad (5)$$

Nyní  $\phi_n(x, R)$  diagonalizuje  $H_{el}$  a tvoří (pro každé  $R$  jinou) úplnou bázi v elektronovém prostoru. A pro úplnou vlnovou funkci  $\Psi$  našeho tříčásticového problému můžeme psát:

$$\Psi = \sum_m \varphi_m(R) \phi_m(x, R). \quad (6)$$

Dosazením do Schrödingerovy rovnice dostaneme rovnici pro  $\varphi_n$  [2]:

$$i \frac{\partial \varphi_n}{\partial t} = -\frac{1}{2M_p} \Delta \varphi_n + (V(R) + E_n(R)) \varphi_n + \sum_m (\mathbf{c}_{nm} \nabla \varphi_m + d_{nm} \varphi_m), \quad (7)$$

$$\mathbf{c}_{nm} = -\frac{1}{M_p} \int \phi_n^*(x, R) \nabla \phi_m(x, R) d^3x, \quad (8)$$

$$d_{nm} = -\frac{1}{2M_p} \int \phi_n^*(x, R) \Delta \phi_m(x, R) d^3x,$$

kde všechny derivace jsou podle souřadnic pro jádra, tedy podle  $R$ . Pokud  $\phi_m(x, R)$  málo závisí na  $R$ , tedy derivace a jejich kombinace v posledním členu jsou mnohem menší než  $\Delta \varphi_n$ , můžeme v rovnici (7) zanedbat poslední dva členy. Dostaneme rovnici pro  $\varphi_n$ , totožnou s rovnicí pro částice ve vnějším poli  $U(R) = V(R) + E_n(R)$ . Suma v rovnici (6) běží přes celou bázi konstruovanou z vlastních vektorů  $H_{el}$ . Prakticky se stačí omezit na několik prvních členů. Omezíme-li se na jeden, dostáváme Bornovu-Oppenheimerovu aproximaci pro molekulární vibrace.

Problém ovšem nastane pokud se dostaneme do místa křížení elektronových hladin. Tam se mění jejich charakter v závislosti na  $R$  rychle a nelze tedy poslední členy zanedbat. V tomto případě musíme v rovnici (6) sčítat přes všechny stavy, které se na křížení podílejí. Problém s velkými derivacemi můžeme odstranit volbou jiné báze, ve které se nebude měnit při průchodu křížením význam nových bázevých funkcí  $\phi_n(x, R)$ . Takto konstruované báze se říká diabatická. V této bázi již není elektronový hamiltonián diagonální a rovnice (7) se zanedbáním členů (8) se modifikuje na rovnici

$$i \frac{\partial \varphi_n}{\partial t} = -\frac{1}{2M_p} \Delta \varphi_n + V(R) + \varphi_n + \sum_m a_{nm}(R) \varphi_m, \quad (9)$$

kde

$$a_{nm} = \int \tilde{\phi}_n^*(x, R) H_{el} \tilde{\phi}_m(x, R) d^3x. \quad (10)$$

Jelikož v našem případě rozptylu antiprotonu a vodíku dochází k přechodu všech vázaných stavů do kontinua<sup>1</sup>, je nutno vzít do naší báze nekonečný

<sup>1</sup>Pro vzdálenost menší než je Fermiho-Tellerův poloměr  $R_{FT}$  neexistuje vázaný stav [13], a tedy všechny vázané stavy přešly do stavů kontinua.



počet stavů. Proto si vybereme v prvním přiblížení právě jeden stav odpovídající základnímu stavu atomu vodíku a ten budeme prvkem diabatické báze. Toho lze dosáhnout tak, že naše báze bude tvořena stavem  $\phi_d$  odpovídajícím základnímu stavu atomu vodíku pro  $R \rightarrow \infty$  a stavy  $\hat{\phi}_k$  odpovídající kontinuu s dodatečnou podmínkou ortogonality na  $\phi_d$ .

## 2.2 Odstranění diskrétního stavu z kontinua

Podobně jako W. Domcke v [3], budeme i my používat projektorový Feshbachův formalismus. Tedy rozdělíme Hilbertův prostor elektronu na část obsahující rezonance  $Q$  a kontinuum  $P$ . Pro ně platí

$$P + Q = 1, \quad PQ = QP = 0. \quad (11)$$

Za projektor  $Q$  vezmeme projekci na jeden jediný stav  $|\phi_d\rangle$ . Tedy:

$$\begin{aligned} Q &= |\phi_d\rangle\langle\phi_d|, \\ P &= \sum_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k| = 1 - Q, \end{aligned} \quad (12)$$

kde  $|\phi_k\rangle$  jsou stavy odpovídající kontinuu, které tvoří s  $|\phi_d\rangle$  úplnou bázi a splňují podmínku

$$\langle\phi_d|\phi_k\rangle = 0. \quad (13)$$

K definici  $P$  lze tedy s výhodou použít  $|\hat{\phi}_k^{(\pm)}\rangle$ , což jsou vlastní vektory hamiltoniánu  $PHP$ .

Nyní explicitně ukážeme rozložení rozptylu na část v  $P$ -prostoru a část zahrnující diskrétní stav.

Rozepišme hamiltonián

$$H = H_0 + (PHP - H_0) + (H - PHP), \quad (14)$$

kde  $H_0 = \frac{1}{2}p^2$  je hamiltonián pro volný elektron s vlastními vektory  $|k\rangle$ .

Nyní napíšeme Lippmann-Schwingerovy rovnice pro vlastní vektory hamiltoniánu  $PHP$

$$|\hat{\phi}_k^{(\pm)}\rangle = |k\rangle + G_0^{(\pm)}(PHP - H_0)|\hat{\phi}_k^{(\pm)}\rangle \quad (15)$$

a úplný hamiltonián  $H$

$$|\psi_k^{(\pm)}\rangle = |\hat{\phi}_k^{(\pm)}\rangle + \hat{G}^{(\pm)}(H - PHP)|\psi_k^{(\pm)}\rangle, \quad (16)$$

kde  $G_0^{(\pm)}$  respektive  $\hat{G}^{(\pm)}$  je Greenova funkce odpovídající hamiltoniánu  $H_0$  respektive  $PHP$ . Navíc platí  $Q|\hat{k}^{(\pm)}\rangle = 0$ . Pro T-matici pak z dvoupotenciálové formule teorie rozptylu plyne

$$T(k', k) = T_{bg}(k', k) + T_{res}(k', k), \quad (17)$$

kde

$$T_{bg}(k', k) = \langle k' | (PHP - H_0) | \hat{\phi}_k^{(\pm)} \rangle \quad (18)$$

a

$$T_{res}(k', k) = \langle \hat{\phi}_{k'}^{(\pm)} | (H - PHP) | \psi_k^{(\pm)} \rangle = \langle \hat{\phi}_{k'}^{(\pm)} | PHQ | \psi^{(\pm)(k)} \rangle. \quad (19)$$

Zaobírejme se nyní řešením rovnice (16). Vynásobíme-li ji postupně projekory  $P$  a  $Q$  a vyloučíme členy úměrné  $P|\psi\rangle$  (to proto, že  $\langle \hat{\phi}_{k'}^{(\pm)} | (H - PHP) = \langle \hat{\phi}_{k'}^{(\pm)} | PHQ$ ) dostaneme

$$Q|\psi^{(\pm)(k)}\rangle = \frac{1}{E - E_d - F \pm i\epsilon} QHP|\hat{\phi}_k^{(\pm)}\rangle. \quad (20)$$

Kde jsme zavedli energii diabatického stavu  $E_d$ , vazbu mezi diabatickým stavem a kontinuem  $V_{dk}$  a veličinu  $F(E)$  (complex level-shift) [10]:

$$E_d = \langle \phi_d | H | \phi_d \rangle, \quad (21)$$

$$V_{dk} = \langle \phi_d | H | \hat{\phi}_k \rangle, \quad (22)$$

$$F(E) = \langle \phi_d | HPG^{(+)}(E)PH | \phi_d \rangle = \Delta(E) - \frac{i}{2}\Gamma(E), \quad (23)$$

kde  $\Delta(E)$  je energetické posunutí a  $\Gamma(E)$  je rozpadová šířka.

Z těchto funkcí již lze jednoduše poskládat rezonanční T-matici. Pro úlohu rozptylu elektronu na poli protonu a antiprotonu se zdá být výhodné jako diabatický stav zvolit základní stav atomu vodíku. To proto, že pro  $R \rightarrow \infty$  musí tento stav přejít ve vázaný stav atomu vodíku a tato volba je nejjednodušší.

Při této volbě, jednoduchou integrací, dostaneme závislost energie diabatického stavu na vzdálenosti p- $\bar{p}$   $R$ :

$$E_d(R) = \frac{1 - (1 + R)e^{-2R}}{R} - \frac{1}{2}. \quad (24)$$

Pro (ortogonalizovanou) Greenovu funkci  $\hat{G}$  platí

$$\hat{G} = G - \frac{G|\phi_d\rangle\langle\phi_d|G}{\langle\phi_d|G|\phi_d\rangle}. \quad (25)$$

Vlastnosti  $F(E)$  pro naši volbu stavu  $|\phi_d\rangle$  budeme diskutovat v jedné z následujících kapitol. V této kapitole jsme ukázali význam  $F(E)$  pro rozptyl elektronu v poli protonu a antiprotonu. Význam vytažení  $|\phi_d\rangle$  pro tvorbu diabatické báze jsme diskutovali v kapitole předchozí. V [10] se ukazuje, že  $F(E)$  hraje důležitou roli v řešení (9) v takto konstruované diabatické bázi.

### 3 Geenova funkce elektronu v poli protonu s antiprotonem

#### 3.1 Hamiltonián a jeho separace

Budeme používat sferoidálních souřadnic (viz dodatek A). Schrödingerova rovnice pro stacionární stavy má tvar<sup>2</sup>:

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta + V - E\right)\psi = 0. \quad (26)$$

Potenciál od dvou nabitých jader má ve sferoidálních souřadnicích tvar:

$$V = -\left(\frac{Z_1}{r_1} + \frac{Z_2}{r_2}\right) = -\left(\frac{Z_1}{R(\xi + \eta)} + \frac{Z_2}{R(\xi - \eta)}\right), \quad (27)$$

kde

$$r_1 = \sqrt{x^2 + y^2 + (z + R/2)^2}, \quad r_2 = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - R/2)^2}, \quad (28)$$

$R$  je vzdálenost nabitých jader v našem případě protonu a antiprotonu,  $Z_1$ ,  $Z_2$  jsou náboje jader.  $\xi$ ,  $\eta$  jsou pak definovány vztahy (52) pro sferoidální souřadnice. Schrödingerova rovnice se separuje ve sferoidálních souřadnicích. Napíšeme proto řešení ve tvaru:

$$\psi = NR_{lm}(\xi)A_{lm}(\eta)e^{im\phi}, \quad (29)$$

kde  $m$  je celé číslo.

Po dosazení do rovnice (26) s využitím rovnic (54) a (27) se nám řešení separuje a dostáváme rovnice:

$$\left\{ \frac{d}{d\xi} \left[ (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} \right] + c^2(\xi^2 - 1) + c^2 + R(Z_1 + Z_2)\xi - A_{lm} - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right\} R_{lm}(\xi) = 0 \quad (30)$$

---

<sup>2</sup>při použití atomových jednotek

pro radiální část,

$$\left\{ \frac{d}{d\eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} \right] + c^2(1 - \eta^2) - c^2 + R(Z_1 - Z_2)\eta + A_{lm} - \frac{m^2}{\eta^2 - 1} \right\} A_{lm}(\eta) = 0 \quad (31)$$

pro část angulární. Toto názvosloví se odvíjí od limity pro velká  $\xi$  kdy sferoidální souřadnice přecházejí ve sférické.

Závislost na energii do rovnic vchází zkrz  $c = \frac{R}{2}k$  a rovnice jsou svázány separační konstantou  $A_{lm}$  závislou na energii a vlastních číslech  $l$  resp.  $m$  číslicích řešení angulární části resp. velikost projekce impulsmomentu do osy  $z$ .

## 3.2 Angulární část

Sférická limita sferoidálních souřadnic nás motivuje k hledání řešení angulární části v bázi přidružených Legendových polynomů. Hledáme řešení ve tvaru řady:

$$A(\eta) = e^{ic(1-\eta)} \sum_{j=0}^{\infty} d_j P_{m+j}^m(\eta). \quad (32)$$

Po dosazení do (31) a použití několika identit pro přidružené Laganderovy polynomy dostaneme rovnici pro koeficienty  $d_j$

$$d_{-1} = 0, \quad d_0 = c, \quad (33)$$

$$\alpha_i d_{i+1} + \beta_i d_i + \gamma_i d_{i-1} = 0,$$

$$\alpha_j = \frac{(2m+j+1)[b+2ic(j+m+1)]}{2(j+m)+3},$$

$$\beta_j = A_{lm} - c^2 - (j+m)(j+m+1), \quad (34)$$

$$\gamma_j = \frac{j[b-2ic(j+m)]}{2(j+m)-1},$$

kde  $b = (Z_1 - Z_2)R = 2ZR$

Řešení (31) musí být kvadraticky integrabilní, což implikuje okrajovou podmínku  $d_i \rightarrow 0$ , když  $i \rightarrow \infty$  pro rovnici (34). To je úloha na vlastní čísla a vlastní vektory tridiagonální reálné matice, omezíme-li se na konečný počet členů. Nejprve se budeme zabývat otázkou hledání vlastních čísel. Jak řešit úlohu tohoto typu je nastíněno například článku od J. W. Liuho [5]. Úloha je ekvivalentní hledání kořenů řetězového zlomku:

$$\beta_0 = \frac{-\alpha_0 \gamma_1}{\beta_1 - \frac{-\alpha_1 \gamma_2}{\beta_2 - \dots}} \equiv F_{ml}(A_{ml}), \quad (35)$$

nebo lze nesymetrickou matici odpovídající soustavě rovnic (34) převést podobnostní transformací na symetrickou reálnou matici<sup>3</sup>

$$\begin{bmatrix} \beta & \sqrt{\alpha_0\gamma_1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{\alpha_0\gamma_1} & \beta_1 & \sqrt{\alpha_1\gamma_2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{\alpha_1\gamma_2} & \beta_2 & \sqrt{\alpha_2\gamma_3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{\alpha_2\gamma_3} & \beta_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (36)$$

a diagonalizovat tu.

K nalezení vlastních čísel můžeme tedy řešit buď původní úlohu, nebo rovnici s řetězovým zlomkem nebo hledat vlastní čísla reálné symetrické matice. Nejjednodušší je použít procedury na hledání vlastních čísel, přičemž hledání vlastních čísel reálné symetrické tridiagonální matice je o mnoho rychlejší než komplexní nesymetrické. K výpočtu jsem tedy použil proceduru z Numerických receptů [8] na hledání vlastních čísel tridiagonálních symetrických matic. Pokud spočtu vlastní čísla takto, pak se vlastní vektory dají hledat tak, že naleznu transformaci, která převádí původní matici danou rovnicí (34) na matici symetrickou (36), a využiji znalost vlastních vektorů této symetrické matice. Druhou možností je zvolit počáteční podmínku (33) pro diferenční rovnici (34) a pak spočítat koeficienty přímo z ní. Tento způsob je numericky nestabilní, jelikož, jak je vidět z (33), má rovnice obecně dvě řešení: naše hledané a druhé exponenciálně rostoucí. V důsledku zaokrouhlovacích chyb se vždy druhé řešení přimísí a jeho přírůstek nakonec převáží. Budeme tedy postupovat obráceně. Zvolíme počáteční podmínku  $d_i = konst.$ ,  $d_{i+1} = 0$  daleko od počátku a budeme propagovat  $d_i$  pro hledané  $i \rightarrow 0$ . V tomto případě se úlohy obou výše uvedených řešení prohodí, rostoucí řešení se rychle utlumí a nalezneme velmi přesně požadované řešení. Pro větší  $l$  je pak výhodné provést propagaci i od začátku, jelikož hledané řešení nejprve roste, a navázat je tak, aby byla odchylka od rovnice (34) v bodě spoje minimální (dávala minimální příspěvek k  $A_{lm}(\eta)$  - tedy minimum chyby násobené normou  $P_{m+j}^m$ ).

### 3.3 Radiální část

Pro výpočet Greenovy funkce budeme potřebovat dvě nezávislá řešení. Jedno regulární v počátku a druhé definované podmínkou v nekonečnu - iregulární řešení. Projekce impulsmomentu do osy  $z$   $m$  je integrálem pohybu, tj. pro srážku anti-protonu s vodíkem v základním stavu je podstatné jen  $m = 0$ . Pro toto  $m$ , pro

<sup>3</sup>je názorně vidět, že tuto matici lze převést na stejný řetězový zlomek(35)

regulární řešení rovnice (30) položíím v počátku podmínku

$$2 \frac{dR_{lm}}{d\xi}(\xi = 1) + [c^2 - A_{lm}] R_{lm}(\xi = 1) = 0, \quad (37)$$

tj. požadujeme aby pro  $\xi$  blízké 1 byla funkce konečná. Pak již stačí propagovat hledanou funkci pomocí libovolné metody pro numerické řešení diferenciálních rovnic. Pro iregulární řešení  $\tilde{R}_{lm}$  položííme počáteční podmínku v nekonečnu a to takovou, že

$$\xi \tilde{R}_{lm}(\xi) = C \exp(ic\xi) \quad (38)$$

pro  $\xi \rightarrow \infty$ , což je chování shodné s chováním odcházející vlny. Známe tedy okrajovou podmínku a můžeme opět provést numerickou integraci a získat tak řešení. Jelikož  $\tilde{R}_{lm}$  v okolí  $\xi = 1$  diverguje, můžeme rovnici napsat pro  $\tilde{R}_{lm}(\xi) = \tilde{R}_{lm}(\ln(\xi - 1))$ ,  $y = \ln(\xi - 1)$  a roztáhnout tak singularitu v bodě  $\xi = 1$  do  $-\infty$  a zlepšit tak přesnost výpočtu v jeho okolí. Dostaneme rovnici:

$$(e^y + 2) \frac{d^2 \tilde{R}_{lm}}{dy^2}(y) + e^y \frac{d\tilde{R}_{lm}}{dy}(y) + (c^2(e^y + 1)^2 e^y - e^y A_{lm}) \tilde{R}_{lm}(y) = 0. \quad (39)$$

Okrajové podmínky (37) a (38) jsou konzistentní s retardovanou Greenovou funkcí.

### 3.4 Konstuckce Greenovy funkce

Dle práce [5] Greenova funkce splňuje rovnici

$$(H - E)G(\xi, \xi', \eta, \eta', \phi, \phi') = \frac{4}{R} \delta(\xi - \xi') \delta(\eta - \eta') \delta(\phi - \phi') \quad (40)$$

a též se separuje ve sferoidálních souřadnicích

$$G(\xi, \xi', \eta, \eta', \phi, \phi') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} e^{im(\phi-\phi')} A_{lm}(\eta) A_{lm}(\eta') g_{lm}(\xi, \xi'), \quad (41)$$

kde  $A_{lm}(\eta)$  jsou angulární funkce normalizované podle Meixnera a Schäpfkeho (například v práci [6]), tj.  $A_{lm}(\eta)$  splňují normalizační podmínku shodnou s přidruženými Legenderymi polynomy:

$$\int_{-1}^1 A_{lm}^2(\eta) d\eta = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \quad (42)$$

a  $g_{lm}(\xi, \xi')$  splňuje rovnici:

$$\left\{ \frac{d}{d\xi} \left[ (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} \right] + c^2(\xi^2 - 1) + c^2 + \right. \\ \left. + R(Z_1 + Z_2)\xi - A_{lm} - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right\} g_{lm}(\xi, \xi') = \frac{4}{R} \delta(\xi - \xi'), \quad (43)$$

jejíž řešení lze napsat pomocí regulárního a iregulárního řešení rovnice (30)  $R_{lm}(\xi)$ ,  $\tilde{R}_{lm}(\xi)$  takto:

$$g_{lm}(\xi, \xi') = \frac{4}{R} \frac{R_{lm}(\xi_{<}) \tilde{R}_{lm}(\xi_{>})}{W(\xi')(\xi'^2 - 1)} \quad (44)$$

kde

$$W(\xi) = R'_{lm}(\xi) \tilde{R}_{lm}(\xi) - R_{lm}(\xi) \tilde{R}'_{lm}(\xi) \quad (45)$$

a kde  $\xi_{<}$  respektive  $\xi_{>}$  je menší respektive větší z argumentu funkce  $g(\xi, \xi')$ .

Pro záporné energie lze postupovat podobně jako pro kladné, je zde ovšem několik rozdílů. Pokud v rovnici (34) dosadíme za  $c$  hodnotu odpovídající záporné energii - tj.  $c = i \frac{R}{2} \sqrt{2E}$  můžeme součin  $\alpha_j \gamma_{j+1}$  nabývat záporných hodnot a tedy nelze použít stejnou metodu na hledání vlastních čísel. Zde je výhodné použít proceduru pro hledání vlastních vektorů a čísel reálné nesymetrické matice. Čímž získáme řešení angulární části. Pro radiální část budeme postupovat podobně jako v případě kladných energií, počáteční podmínka v nekonečnu pak bude  $\tilde{R}_{lm}(\xi) = e^{-|c|\xi}$ . Prakticky volíme počáteční podmínku  $\tilde{R}_{lm}(\xi_{max}) = 0$ ,  $\tilde{R}'_{lm}(\xi_{max}) = konst.$  a propagací ve směru  $\xi \rightarrow 1$  automaticky vybereme exponenciálně klesající řešení.

## 4 Výpočet Greenovy funkce

Výpočet se provádí zvlášť pro kladné a záporné energie. Nejprve nalezneme vlastní čísla angulárního problému. V případě kladných energií pomocí hledání vlastních čísel matice (36). Poté řešíme diferenční rovnici (34), normalizujeme podle Meixnera a Schäfkeho (42), dosadíme do řady, a vyhodnotíme v bodech gridu. Následuje řešení radiální části. Počáteční podmínky vezmeme tak, jak bylo popsáno výše. Regulární část integrujeme v souřadnici  $\xi$ , začínáme od jedničky a končíme v  $\xi_{max}$ . Iregulární pak integrujeme v proměnné  $\ln(\xi - 1)$ . Započneme v  $\xi = \tilde{\xi}_{max}$  a integrujeme do  $\xi \cong 1$ , uchováваме hodnoty ve stejném rozsahu, ve kterém byla spočtena regulární část. Přičemž  $\xi_{max} \ll \tilde{\xi}_{max}$ , protože podmínka (38) platí asymptoticky a vývoj fáze odcházející vlny je velice důležitý pro získání správné, tj. retardované, Greenovy funkce. Pro další výpočty ovšem postačí podstatně menší oblast, jelikož budeme počítat maticové elementy Greenovy se stavem, který exponenciálně ubývá s  $\xi$  (základní stav atomu vodíku).

Pro záporné hodnoty je situace trochu odlišná. Jelikož (34) je reprezentována reálnou a nesymetrickou maticí, řešíme přímo procedurou specializovanou na tento druh matic [12] a získáme jak vlastní čísla tak vlastní vektory. Pro výpočet angulárních funkcí tedy stačí normalizovat a vypočíst hodnoty v bodech gridu. Radiální část počítáme podobně jako výše, jen s iregulární funkcí začínáme v bodě, kde končíme s regulární, tj.  $\xi_{max} = \tilde{\xi}_{max}$ <sup>4</sup>.

## 4.1 Závislost na numerických parametrech

Pro kladnou část jsme ověřili konvergenci v následujících parametrech: Počet členů rozvoje (41) Greenovy funkce ( $L_{max}$ ), počet bodů gridu pro angulární část ( $A_p$ ), horní mez intervalu  $(1, \xi_{max})$ , na kterém se počítá  $R_{lm}(\xi)$  ( $\xi_{max}$ ), počet bodů gridu pro radiální část ( $R_p$ ),  $\xi$ , od kterého začne propagace iregulární části  $\tilde{R}_{lm}(\xi)$  ( $\tilde{\xi}_{max}$ ). Pro záporné energie se propaguje iregulární část ze stejné hodnoty, kde se skončí s propagací regulární, tedy jeden parametr odpadá.

Konvergenci testujeme na hodnotě maticového elementu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$ . Příklady konvergence pro různé energie  $E$  a vzdálenosti nukleonů  $R$  jsou na obr. 5, 6, 7, 8, 9 pro kladné energie, na obr. 1, 4, 2, 3 pro energie záporné. Vykreslovaný parametr  $\Delta$  je definován jako relativní chyba, přičemž považujeme poslení hodnotu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle_{max}$  za přesnou.

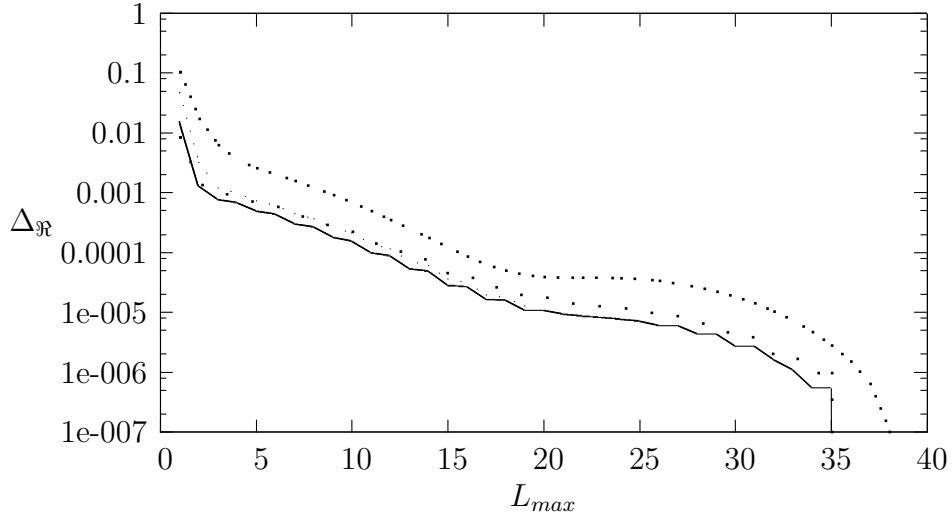
$$\begin{aligned} \Delta_{\Re} &= \frac{\Re(\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle) - \Re(\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle_{max})}{\Re(\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle_{max})} \\ \Delta_{\Im} &= \frac{\Im(\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle) - \Im(\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle_{max})}{\Im(\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle_{max})} \end{aligned} \tag{46}$$

Pro kladné energie stačí řádově stovky bodů gridu angulární části (obr. 7), tisíce pro radiální část (obr. 6), přičemž  $\xi_{max}$  by se mělo pohybovat v řádu desítek (obr. 9), pro malá  $R$ . Maticový element Greenovy funkce konverguje rychle s počtem členů v jejím rozvoji (41) a tedy počet členů kolem 25 by měl být dostačující<sup>5</sup> (obr. 5). Největší časovou zátěží je pak propagace iregulární radiální funkce z  $\tilde{\xi}_{max}$ , které by mělo být řádově deset tisíc (obr. 8). Konvergence se zhoršuje pro malé energie a velké vzdálenosti protonu a antiprotonu. Pro záporné energie by se mělo použít více bodů gridu angulární část (obr. 2) - řádově tisíce. Pokud jde o radiální část mělo by stačit několik tisíc bodů (obr. 4), ovšem pak se musí měnit  $\xi_{max}$  (obr. 3) tak, aby byl přibližně konstantní součin  $\xi_{max}R$  tedy, aby byl pokryt stejně skutečný prostor. Pro počet členů v rozvoji Greenovy funkce platí obdobné tvrzení jako výše (obr. 1). Třicet členů by mělo být dostačujících.

<sup>4</sup>Zde se nevyvíjí fáze (funkce je reálná) a není třeba začínat propagaci mimo oblast, kterou budeme používat dále.

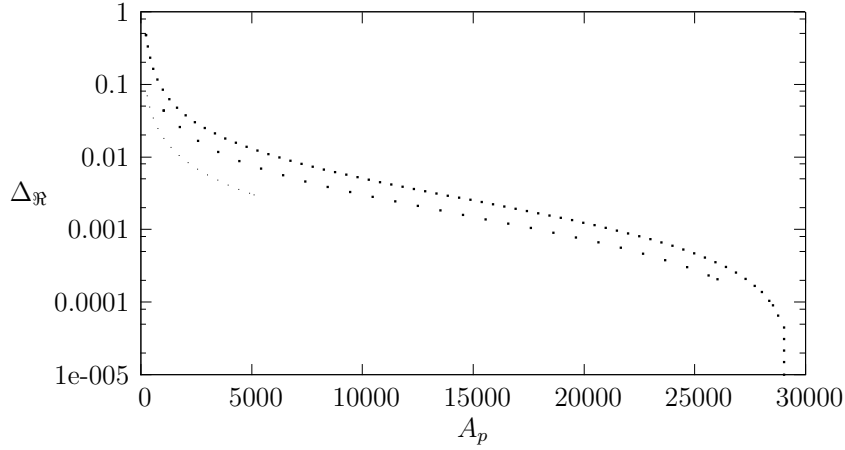
<sup>5</sup>Počet členů je relativně velký kvůli dlouhému dosahu dipólové interakce



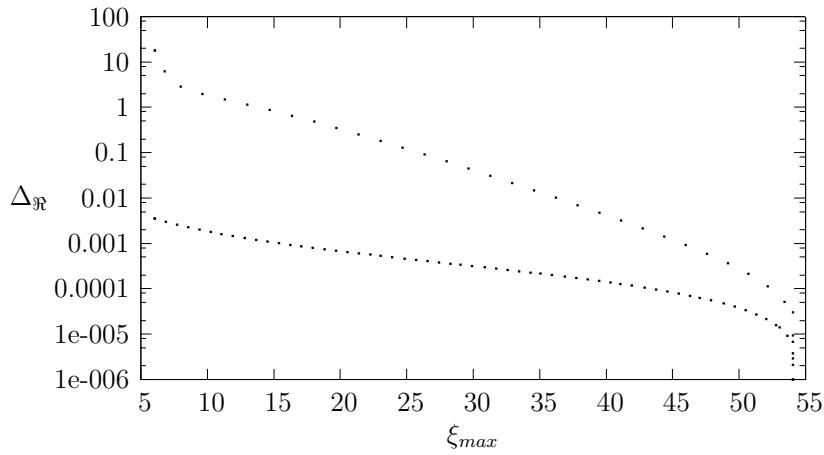


Obrázek 1: Závislost relativní chyby maticového elementu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$  na počtu členů rozvoje (41) při výpočtu Greenovy funkce  $L_{max}$  pro různé hodnoty energie  $E$  a vzdálenosti  $p - \bar{p}$   $R$ . Zbylé numerické parametry jsou  $\xi_{max} = 51$ ,  $A_p = 200$ ,  $R_p = 5000$ . Od shora dolů postupně (pro  $L_{max} = 1$ ):  $E = -0,5$   $R = 5$ ;  $E = -0,5$   $R = 1$ ;  $E = -0,5$   $R = 0,5$ ;  $E = -1$   $R = 0,3$ .

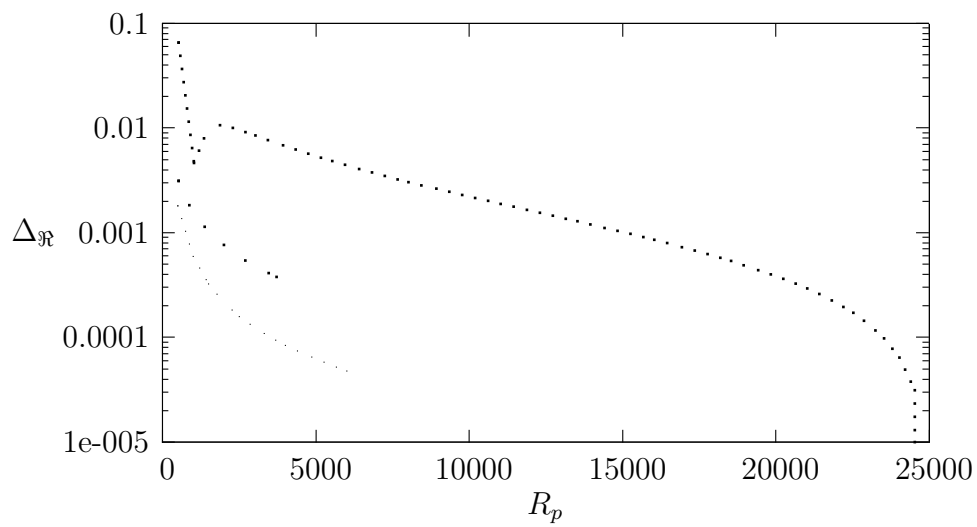
Pro hledání vlastních čísel a vlastních hodnot používáme matice tisíc krát tisíc. Vlastní čísla konvergují dosti rychle. Jejich hodnotu jsme ověřili s publikovanými články [5], [11]. Správnost vlastních vektorů jsme ověřovali dosazením řady (32) do rovnice (31).



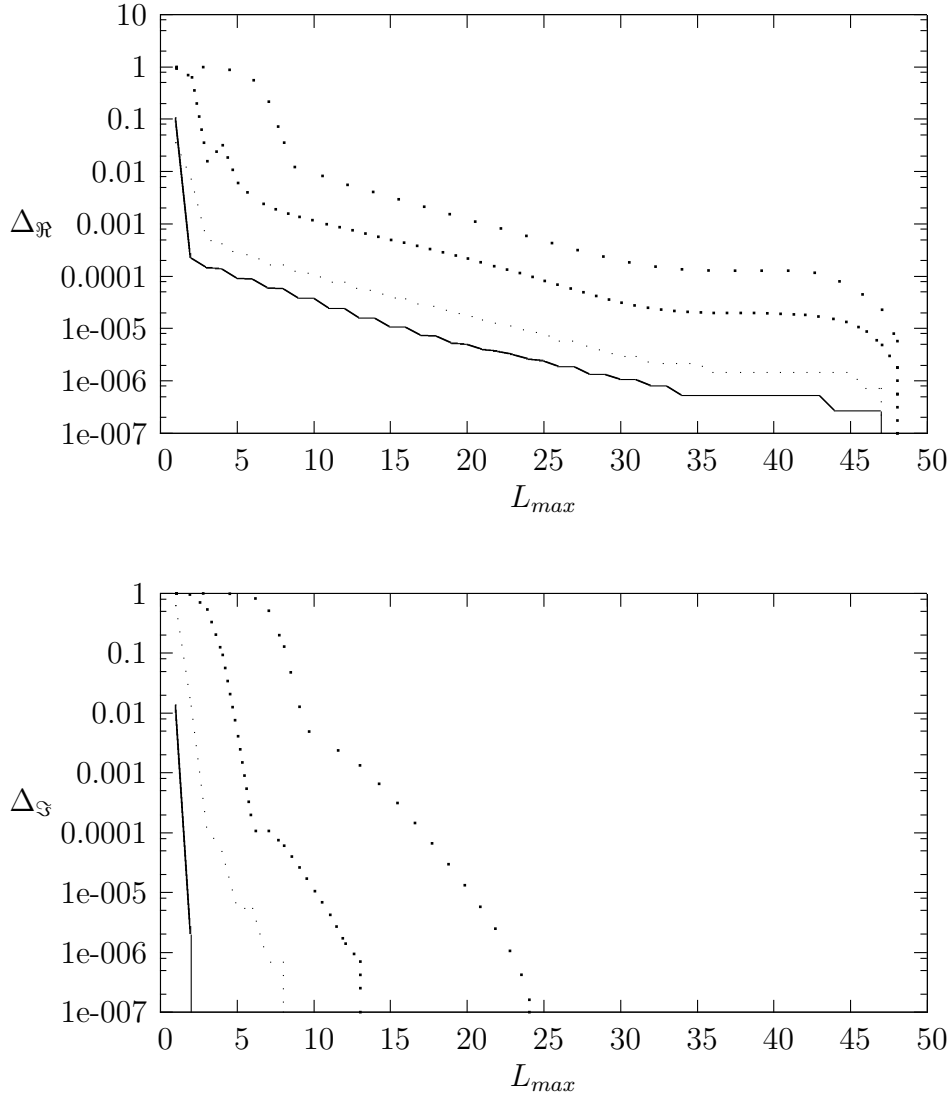
Obrázek 2: Závislost relativní chyby maticového elementu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$  na počtu bodů angulární funkce pro různé hodnoty energie  $E$  a vzdálenosti  $p - \bar{p} R$ . Zbylé numerické parametry jsou  $\xi_{max} = 51$ ,  $R_p = 5000$ ,  $L_{max} = 30$ . Od shora dolů postupně:  $E = -0,1$   $R = 15$ ;  $E = -0,4$   $R = 15$ ;  $E = -0,1$   $R = 5$ .



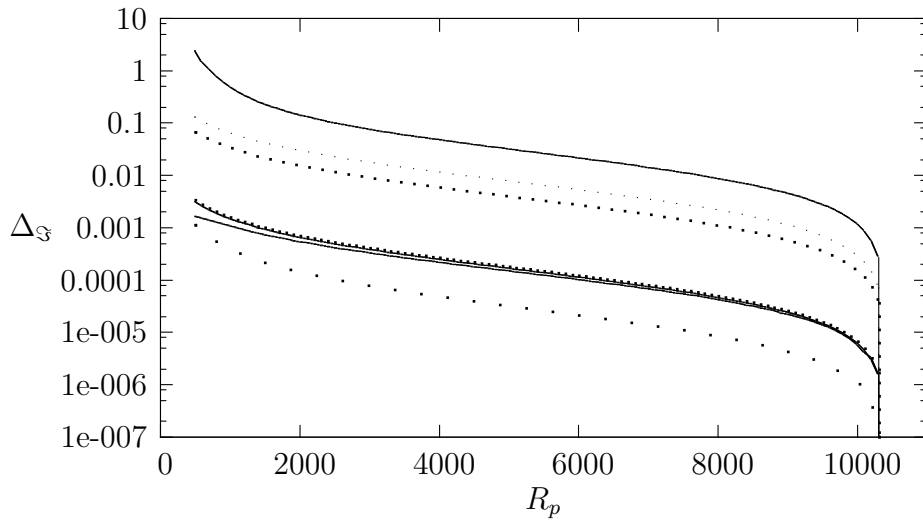
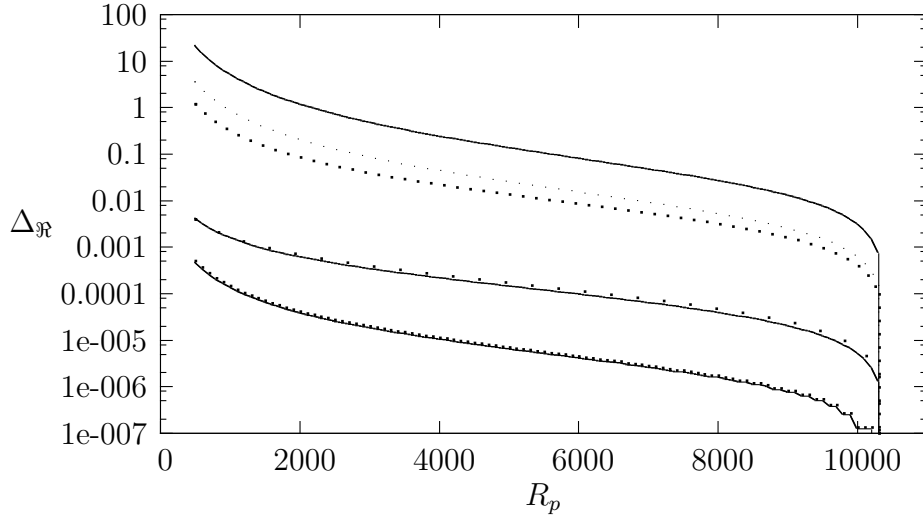
Obrázek 3: Závislost relativní chyby maticového elementu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$  na maximálním  $\xi$  pro různé hodnoty energie  $E$  a vzdálenosti  $p - \bar{p} R$ . Zbylé numerické parametry jsou  $L = 30$ ,  $A_p = 5000$ ,  $R_p = 100\xi_{max}$ . Od shora dolů postupně:  $E = -0,1$   $R = 0,5$ ;  $E = -0,4$   $R = 15$ ;  $E = -0,4$   $R = 5$ . Poslední dvě linie splývají v jednu.



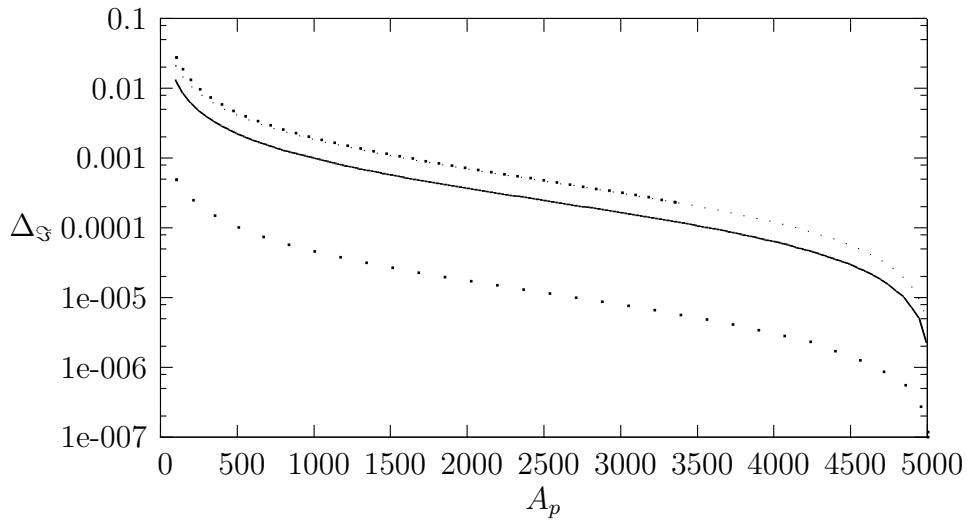
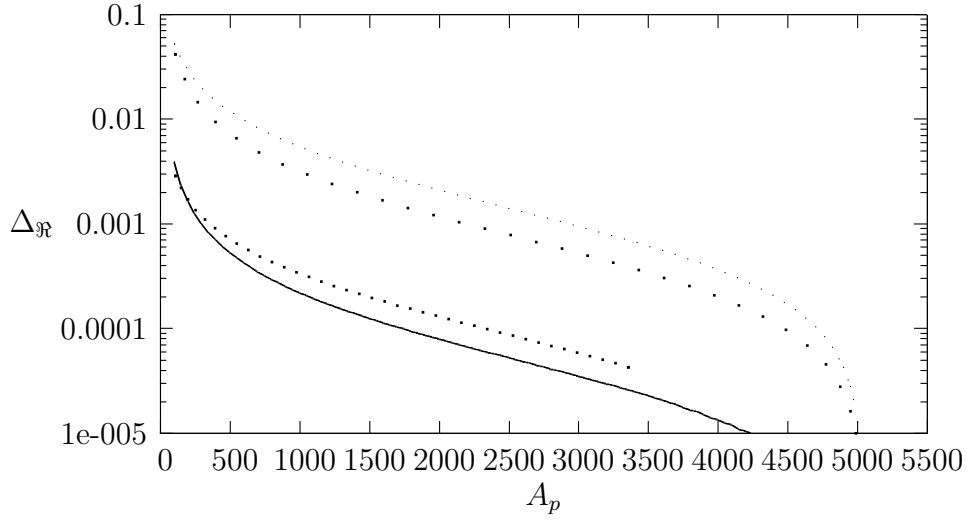
Obrázek 4: Závislost relativní chyby maticového elementu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$  na počtu bodů gridu radiální funkce pro různé hodnoty energie  $E$  a vzdálenosti  $p - \bar{p}$   $R$ . Zbylé numerické parametry jsou  $\xi_{max} = 51$ ,  $A_p = 200$ ,  $L_{max} = 30$ . Od shora dolů postupně:  $E = -0,1$   $R = 5$ ;  $E = -0,5$   $R = 0,5$ ;  $E = -0,5$   $R = 1$ .



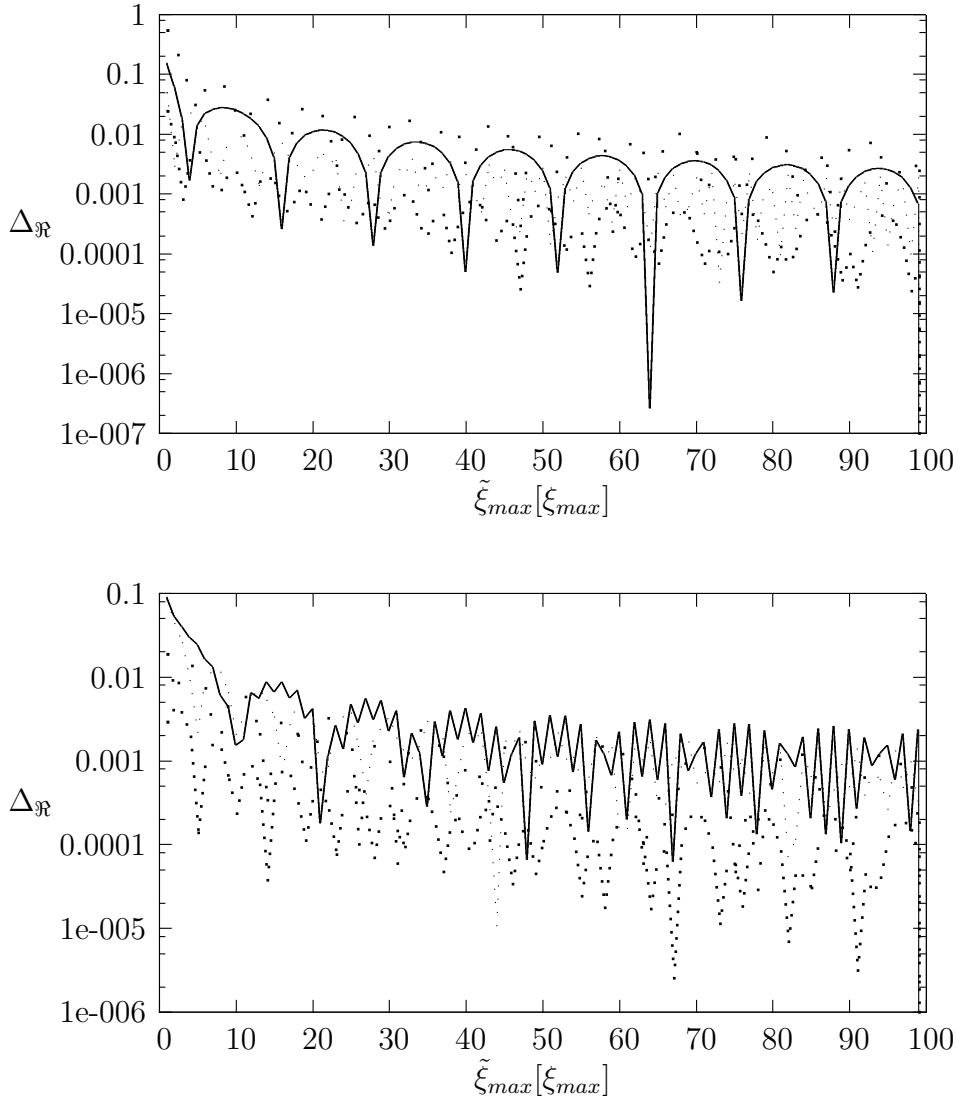
Obrázek 5: Závislost relativní chyby maticového elementu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$  na počtu členů rozvoje (41) při výpočtu Greenovy funkce  $L_{max}$  pro různé hodnoty energie  $E$  a vzdálenosti  $p - \bar{p} R$ . Zbylé numerické parametry jsou  $\xi_{max} = 101$ ,  $\tilde{\xi}_{max} = 100\xi_{max}$ ,  $A_p = 200$ ,  $R_p = 5000$ . Od shora dolů postupně pro reálnou část:  $E = 2$   $R = 10$ ;  $E = 1$   $R = 5$ ;  $E = 0,5$   $R = 1$ ;  $E = 0,5$   $R = 0,5$ . Pro imaginární pak používáme stejné značení jako pro reálnou.



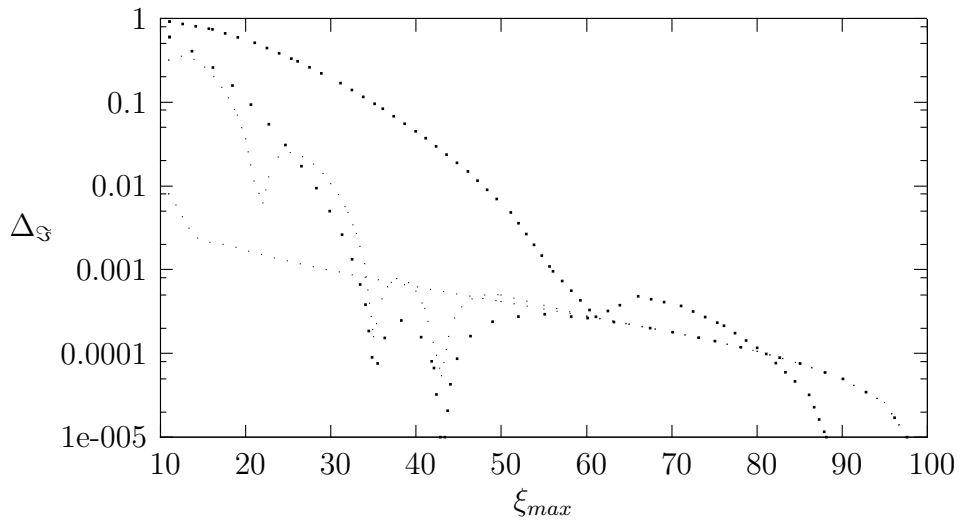
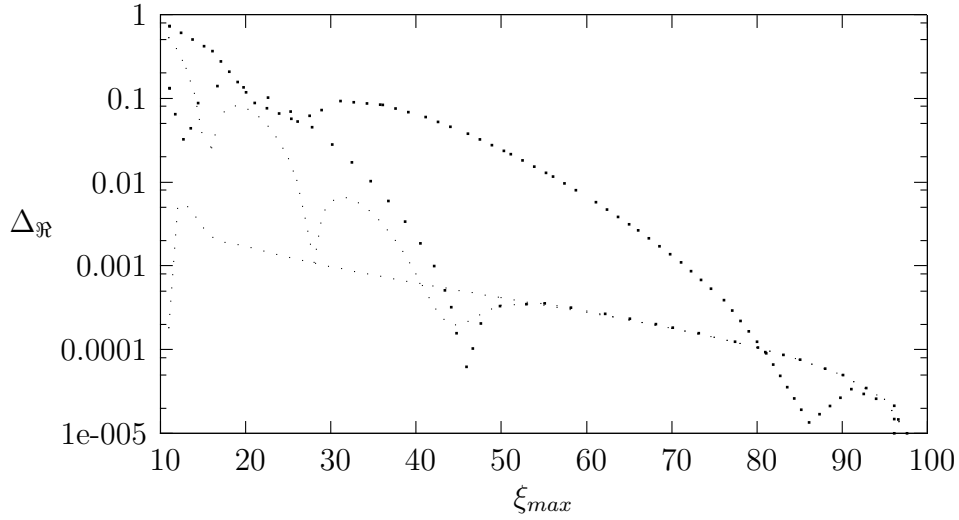
Obrázek 6: Závislost relativní chyby maticového elementu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$  na počtu bodů gridu radiální funkce pro různé hodnoty energie  $E$  a vzdálenosti  $p - \bar{p}$   $R$ . Zbylé numerické parametry jsou  $\xi_{max} = 101$ ,  $\tilde{\xi}_{max} = 100\xi_{max}$ ,  $A_p = 200$ ,  $L_{max} = 25$ . Od shora dolů postupně (reálná část, počátek):  $E = 2$   $R = 10$ ;  $E = 1$   $R = 5$ ;  $E = 0,1$   $R = 5$ ;  $E = 2$   $R = 0,5$ ;  $E = 1$   $R = 0,5$ ;  $E = 0,1$   $R = 0,5$ . Pro imaginární pak používáme stejné značení jako pro reálnou.



Obrázek 7: Závislost relativní chyby maticového elementu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$  na počtu bodů gridu angulární funkce pro různé hodnoty energie  $E$  a vzdálenosti  $p - \bar{p}$   $R$ . Zbylé numerické parametry jsou  $\xi_{max} = 101$ ,  $\tilde{\xi}_{max} = 100\xi_{max}$ ,  $R_p = 5000$ ,  $L_{max} = 25$ . Od shora dolů postupně (reálná část, počátek):  $E = 0,5$   $R = 10$ ;  $E = 0,1$   $R = 0,5$ ;  $E = 0,5$   $R = 0,5$ ;  $E = 1$   $R = 0,5$ . Pro imaginární pak používáme stejné značení jako pro reálnou.



Obrázek 8: Závislost relativní chyby maticového elementu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$  na bodě počáteční podmínky pro iregulární radiální funkci, pro různé hodnoty energie  $E$  a vzdálenosti  $p - \bar{p} R$ . Zbylé numerické parametry jsou  $\xi_{max} = 101$ ,  $A_p = 200$ ,  $R_p = 5000$ ,  $L_{max} = 25$ . Od shora dolů postupně (reálná část, počátek):  $E = 0,05$   $R = 1$ ;  $E = 0,05$   $R = 0,5$ ;  $E = 0,05$   $R = 1,5$ ;  $E = 0,5$   $R = 1,5$ . Pro imaginární pak používáme stejné značení jako pro reálnou.

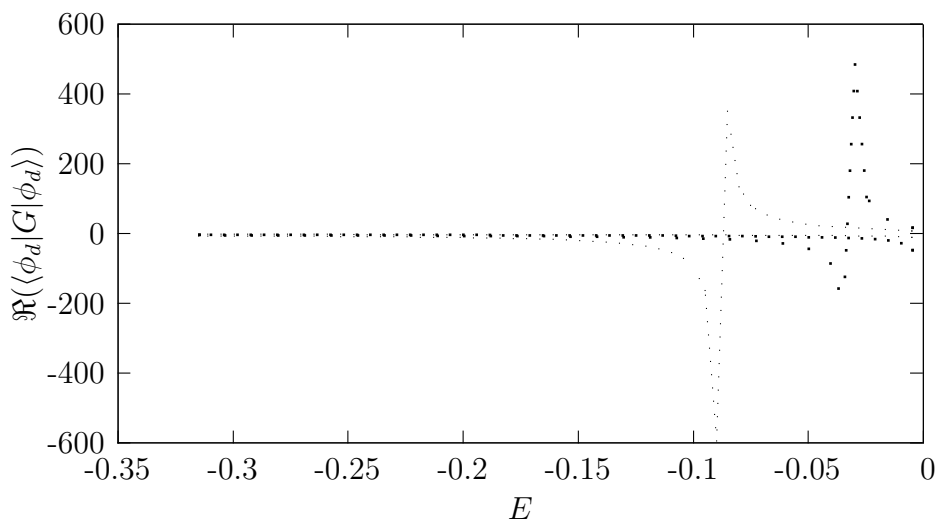


Obrázek 9: Závislost relativní chyby maticového elementu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$  na  $\xi_{max}$  pro různé hodnoty energie  $E$  a vzdálenosti  $p - \bar{p}$   $R$ . Zbylé numerické parametry jsou  $\tilde{\xi}_{max} = 10100$ ,  $A_p = 200$ ,  $R_p = 50\xi_{max}$ ,  $L_{max} = 25$ . Od shora dolů postupně (reálná část, počátek):  $E = 0,05$   $R = 0,3$ ;  $E = 0,5$   $R = 0,5$ ;  $E = 0,05$   $R = 0,5$ ;  $E = 0,5$   $R = 1,5$ . Pro imaginární pak používáme stejné značení jako pro reálnou.



## 4.2 Póly Greenovy funkce

Póly Greenovy funkce by se měly vyskytovat v místě vázaných stavů. Tato vlastnost je dobrou indikací správnosti našeho výpočtu. Pro maticový element  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$  budou vidět jen póly s  $m = 0$ , jelikož stav  $|\phi_d\rangle$  má  $m = 0$ . Ověření proběhlo pro několik hodnot  $R$  - viz obr. 10, jako referenci jsme použili bakalářskou práci J. Donovala [7].



Obrázek 10: Závislost reálné části maticového elementu  $\langle \phi_d | G | \phi_d \rangle$  na energii  $E$ . Singularity jsou dobře viditelné pro  $R = 2$ ;  $R = 1,5$ . Pro zbylé dvě na grafu se vyskytující hodnoty  $R = 1$ ;  $R = 0,5$  viditelné singularity nejsou, což je ve shodě s přímým výpočtem v práci [7].

## 5 Výpočet veličiny $F(E)$ (complex level shift)

Pro podkritický dipól se by dle [4] měla rozpadová šířka  $\Gamma$  chovat pro malé energie

$$\Gamma(E) = \text{const}E^\beta, \quad (47)$$

kde  $\beta$  závisí na velikosti dipólu. A pro nadkritický dipól

$$\Gamma(E) = \frac{\text{const}}{1 + e^{2\pi\mu} + 2e^{\pi\mu}\cos(\mu \ln(E) + \gamma)}, \quad (48)$$

kde  $\mu$  závisí na velikosti dipólu a  $\gamma$  na velikosti dipólu a na krátkodosahové interakci. Tedy pro nadkritický dipól se  $\Gamma$  pro  $E \rightarrow 0$  blíží ke konstantě, jelikož oscilační část se projeví jen pro velmi malé energie a to na logaritmické škále.

Reálná část  $\Delta(E)$  by měla být pro podkritický dipól spojitá v  $E = 0$  a pro nadkritický bude mít (přibližně) nespojitost typu skoku.

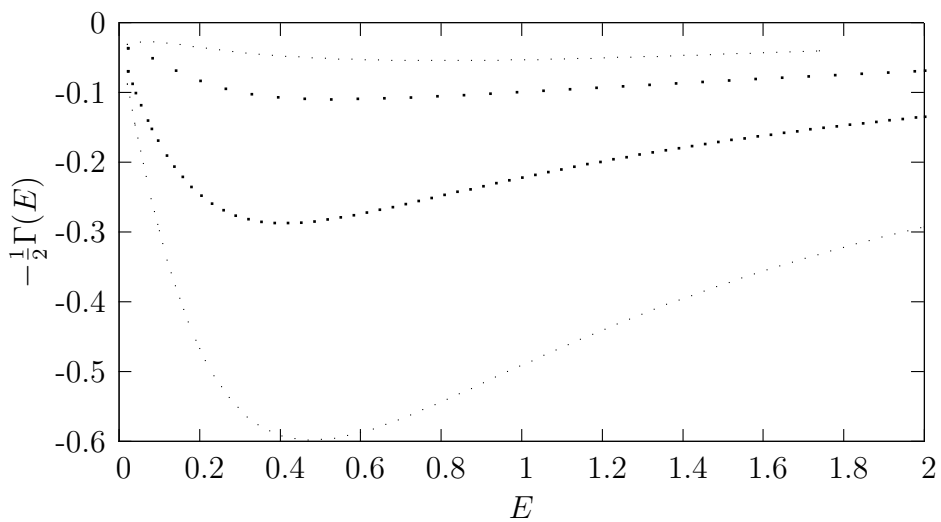
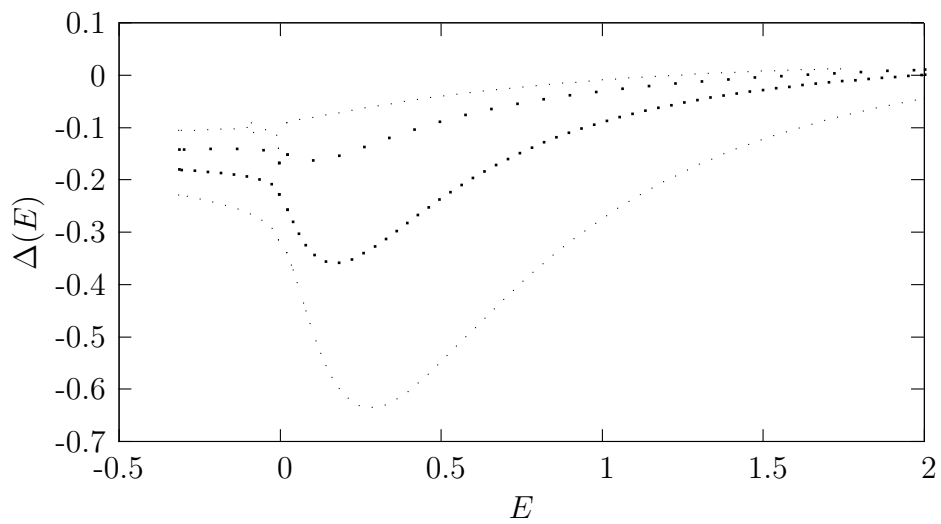
Jak je vidět na obr. 11 pro malá  $R$  jde  $\Gamma(E)$  do nuly a  $\Delta(E)$  je spojitá. A s rostoucím  $R$  roste skok v  $\Delta$  a  $\Gamma$  se místo k nule blíží ke konstantě. To odráží, že dipól je pro malé  $R$  podkritický a postupně s rostoucím  $R$  přechází v nadkritický, jak očekáváme.

Pro vázané stavy se v maticovém elementu Greenovy funkce objeví póly. Ten z nich, který odpovídá nejvíce našemu diskretnímu stavu, by se pak měl v  $F(E)$  odečíst v důsledku ortogonalizační procedury. To také vidíme na obr. 11. Singularita se v podstatě odečetli a zůstávají jen malé pozůstatky po numerických chybách.

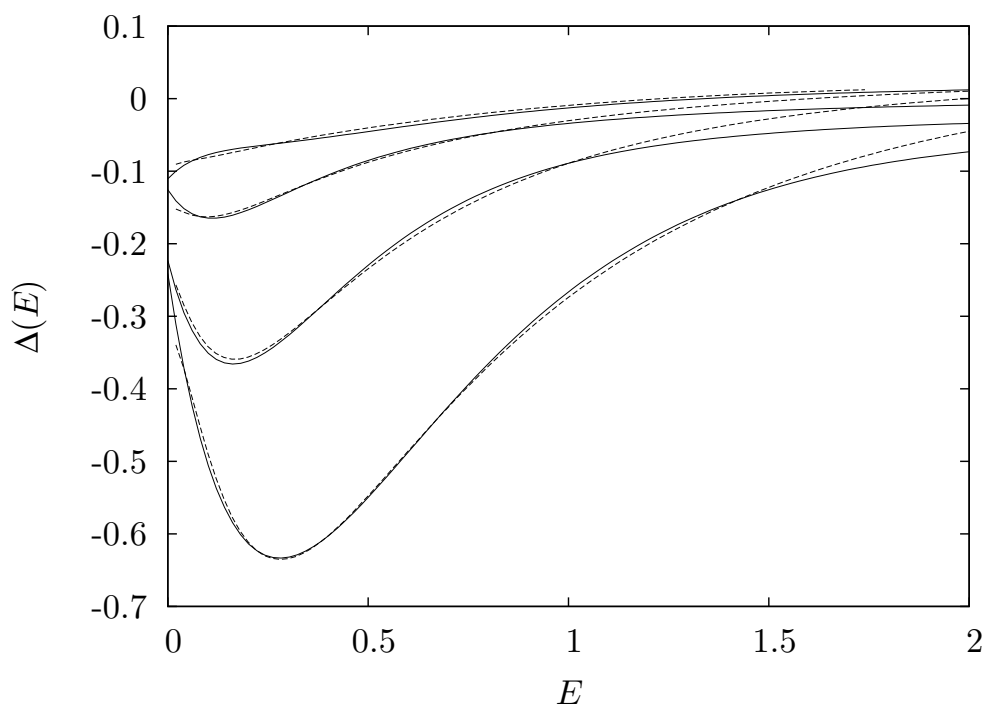
Pro výpočet dynamiky jader budeme potřebovat veličinu  $F(E, R)$  parametrizovat. Pokud by se podařilo separovat závislost na energii  $E$  a vzdálenosti nukleonů  $R$ , značně by se urychlil výpočet nukleonové dynamiky. Je ale jasné, že v našem případě tuto separaci provést nelze. Vidíme, že se pro kladné energie posouvají minima reálné i imaginární části funkcí  $F(E, R = \text{const.})$ , což je neslučitelné se separabilitou. Jelikož má reálná část v bodě  $E = 0$  nespojitost, budeme parametrizovat zvlášť oblast kladných a záporných energií. Jedním z nejobtížnějších úkolů je parametrizovat reálnou část kladných energií. Můžeme zkusit hledat řešení ve tvaru:

$$F(E, R) = \alpha e^{-X(R)E} - \beta e^{-Y(R)E} - Z(R)e^{-\gamma E} + \check{Z}(R) \quad (49)$$

kde  $\alpha - \gamma$  jsou konstanty a  $X - \check{Z}$  jsou funkce závislé na  $R$ .



Obrázek 11: Závislost  $F(E)$  na energii  $E$ . Nahoře reálná část  $\Delta(E)$  dole imaginární  $-\Gamma(E)/2$ . Vzestupně pro  $R$ : 0,5; 1; 1,5; 2



Obrázek 12: Závislost reálné části  $F(E)$  počítané pomocí (49) a (50) (plné čáry) na energii  $E$ . Data spočtená přímým výpočtem jsou vynesena čárkovaně. Vzestupně pro  $R$ : 0,5; 1; 1,5; 2.

Fit na spočítaná data může vypadat například takto:

$$\alpha = 2,70; \quad \beta = 2,68; \quad \gamma = 1,54;$$

$$X(x) = 2,87x + 2,51; \quad Y(x) = 3,98x + 0,47;$$

$$Z(x) = 0,215x^3 - 0,805x^2 + 0,836x + -0,029;$$

$$\check{Z}(x) = 0,0426x + -0,0664.$$

(50)

## 6 Závěr

Řešili jsme problém pohybu elektronu v poli protonu a antiprotonu. Napsali jsme procedury pro výpočet Greenových funkcí elektronu, a to jak pro energie kladné tak pro záporné. Otestovali jsme konvergenci v následujících numerických parametrech: Počty bodů v gridu radiální a angulární části, počty členů v rozvoji Greenovy funkce, bod, do kterého je třeba integrovat regulární radiální funkce a bod, ze kterého je třeba propagovat radiální iregulární funkci. Testovali jsme procedury pro kladné i záporné energie. Pomocí projektorového formalismu jsme provedli rozklad na diskrétní stav a kontinuum, kde jako diskrétní stav jsme zvolili základní stav atomu vodíku. Provedli jsme výpočet veličiny  $F(E)$  (complex level-shift) pro několik hodnot vzdálenosti mezi protonem a antiprotonem  $R$ . Tato veličina hraje důležitou roli ve výpočtu dynamiky jader, například při popisu srážkového procesu



Naznačili jsme jak budeme postupovat při parametrizaci veličiny  $F(E, R)$ .

## A Sferoidální souřadnice

Sferoidální souřadnice jsou popsány vztahy [19]

$$\begin{aligned} z &= a\xi\eta, \\ x &= a\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \cos \phi, \\ y &= a\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \sin \phi. \end{aligned} \tag{52}$$

Pro Laméovy koeficienty platí:

$$\begin{aligned} h_\xi &= a\sqrt{\frac{\xi^2 - \eta^2}{\xi^2 - 1}}, \\ h_\eta &= a\sqrt{\frac{\xi^2 - \eta^2}{1 - \eta^2}}, \\ h_\phi &= a\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}. \end{aligned} \tag{53}$$

Dále bude třeba znát vyjádření Laplaceova operátoru a Jakobianu v těchto souřadnicích:

$$\Delta = \frac{1}{a^2(\xi^2 - \eta^2)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left[ (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] \right\} + \frac{1}{a^2(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}, \tag{54}$$

$$J_{ac} = \xi^2 - \eta^2. \tag{55}$$

Vztah mezi sférickými a sferoidálními souřadnicemi  $(r, \theta, \phi)$  s počátkem v  $z = \pm a$  je

$$\begin{aligned} r &= a(\xi \mp \eta), \\ \cos \theta &= \frac{\xi\eta}{\xi \mp \eta}, \end{aligned} \tag{56}$$

$$\phi = \phi.$$

Pro  $\xi$  jdoucí k nekonečnu pak vidíme, že  $\eta$  přechází v  $\cos \theta$ , tedy souřadnice sferoidální přecházejí ve sférické. Užitečné budou také inverzní vztahy:

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{r_1 + r_2}{2a}, \\ \eta &= \frac{r_1 - r_2}{2a}, \end{aligned} \tag{57}$$

$$\phi = \arctan(x/y),$$

kde pro bod  $(x, y, z)$  platí  $r_1 = \sqrt{x^2 + y^2 + (z + a)^2}$ ,  $r_2 = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - a)^2}$ .

## Seznam literatury

- [1] J. S. Cohen, *Capture of negative exotic particles by atom, ions and molecules*, Rep. Prog. Phys. **67** (2004), 1769.
- [2] J. Formánek, *Úvod do kvantové teorie*, 2004.
- [3] W. Domcke, *Projectuin-operator approach to potencial scattering*, Phys. Rev. A **25** (1983), 2777.
- [4] G. A. Gallup, Y. Xu, and I. I. Fabrikant, *Nonlocal theory of dissociative electron attachment to H<sub>2</sub> and HF molecules*, Pys. Rev. A **57** (1998), 2596.
- [5] J. W. Liu, *Analytical solutions of generalized spheroidal wave equations and the Green's function of one-electron diatomic molecules*, J. Mat. Phys. **33** (1992), 4026.
- [6] P. E. Falloon, *Theory and Computation of Spheroidal Harmonics with General Arguments*, 2001.
- [7] J. Donoval, *Greenovy funkce Schrödingerovy rovnice pro elektron v poli dvou bodových nábojů*, 2006.
- [8] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery *Numerical Recipes in C*, 1992.
- [9] H. Feshbach *A Unified Theory of Nuclear Reactions. II*, Annal of Phys **19** (1962), 287-313.
- [10] M. Čížek, *Resonant Processes in atomic collisions - theoretical considerations and calculations*, 1999.
- [11] M. Hiyama, H. Nakamura, *Two-center Coulomb functions*, Comupt. Phys. Comm. **103** (1997), 209-216.
- [12] M. Galassi et al., *GNU Scientific Library Reference Manual (2nd Ed.)*, ISBN 0954161734.
- [13] S. Yu. Ovchinnikov and J. H. Macek, *Protonium formation in antiproton-hydrogen-atom collisions*, Pys. Rev. A **71** (2005), 052717.
- [14] K. Sakimoto, *Antiproton, kaon, and muon capture by atomic hydrogen*, Phys. Rev. A **66** (2002), 032506.
- [15] B. D. Esry, H. R. Sadeghpour, *Ultraslow  $\bar{p}$ -H collisions in hyperspherical coordinates: Hydrogen and protonium channels*, Phys. Rev. A **67** (2003), 012704.

- [16] J. S. Cohen, *Formation of protonium in collisions of antiprotons with H and H<sup>-</sup>*, Phys. Rev. A **36** (1987), 2024.
- [17] A. Yu. Voronin, J. Carbonell, *Antiproton-hydrogen annihilation at subkelvin temperatures*, Phys. Rev. A **57** (1998), 4335.
- [18] H. Knudsen, H. U. Mikkelsen, K. Paludan, K. Kirsebom, S. P. Møller, J. E. Uggerhøj, J. Slevin, M. Charlton, and E. Morenzoni, *Ionization of Atomic Hydrogen by 30 - 1000 keV Antiprotons* Phys. Rev. Let. **74** (1995), 4627.
- [19] *Wikipedia*, <http://wikipedia.org/>.