

Rezonanční jevy se vyskytují v řadě oblastí fyziky. Příklad tvarové rezonance je spojený s rozptylem částic na potenciálové bariéře, skrze kterou částice prochází díky tunelovému jevu. Energetické spektrum je výstupem řešení vlastního problému s modifikovaným Hamiltonovým operátorem, ze kterého již lze určit rezonance. Vlastní čísla odpovídající rezonancím jsou komplexní a nachází se ve čtvrtém kvadrantu komplexní roviny. Pro jejich výpočet jsou použity numerické metody konečných prvků (FEM), reprezentace pomocí diskrétní proměnné (DVR), externího komplexního škálování (ECS) a QR algoritmus. Práce se zaměřuje na numerické simulace vlastností metod s ohledem na přesnost výpočtu rezonancí a pokrytí komplexní roviny pro několik jednorozměrných modelových potenciálů. Využití potenciálů je také ilustrováno na datech rezonancí pro rozptyl elektronu na vybraných dvouatomových molekulách. Pro tyto účely byl vytvořen open-source program v Pythonu.