

**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Petr Rašek

**Rezonance pro modelové potenciály v
kvantové mechanice**

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Karel Houfek, Ph.D.

Studijní program: Matematické modelování

Studijní obor: Matematické modelování

Praha 2024

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

Touto cestou bych velmi rád poděkoval vedoucímu doc. RNDr. Karlu Houfkovi, Ph.D. za cenné konzultace, pečlivý přístup a čas, který mi věnoval během přípravy bakalářské práce.

Název práce: Rezonance pro modelové potenciály v kvantové mechanice

Autor: Petr Rašek

Katedra: Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Karel Houfek, Ph.D., Ústav teoretické fyziky

Abstrakt: 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.

Klíčová slova: rezonance potenciál vlastní čísla FEM DVR ECS

Title: Resonances for model potentials in quantum mechanics

Author: Petr Rašek

Department: Department of Theoretical Physics

Supervisor: doc. RNDr. Karel Houfek, Ph.D., Department of Theoretical Physics

Abstract: Resonance phenomena appear in various areas of physics. A case of shape resonance is associated with the scattering of particles on a potential barrier, through which particles pass due to tunneling effect. The energy spectrum is the output of solving the eigenvalue problem with a modified Hamiltonian operator which enables calculation of the resonances. The eigenvalues corresponding to resonances are complex and are located in the fourth quadrant of the complex plane. Numerical methods such as Finite Element Method (FEM), Discrete Variable Representation (DVR), Exterior Complex Scaling (ECS), and the QR algorithm are used for their computation. The thesis focuses on numerical simulations of the method properties with an emphasis on the precision of resonances calculation and coverage of the complex plane for several one-dimensional model potentials. The utilization of potentials is also illustrated by resonance data for electron scattering on selected diatomic molecules. For these purposes, an open-source program in Python has been created.

Keywords: resonance potential eigenvalues FEM DVR ECS

Obsah

Úvod	2
1 Rezonance	4
1.1 Typy rezonancí	4
1.2 Popis rezonance	6
1.3 Metody detekce	7
2 Numerické metody	10
2.1 Metoda FEM	10
2.2 Metoda DVR	11
2.3 Metoda ECS	13
2.4 Problém vlastních čísel	15
3 Implementace programu	17
3.1 Ovládání programu	17
3.2 Detekce vázaných stavů a rezonancí	19
3.3 Výstupy programu	21
4 Numerické simulace	24
4.1 Vlastnosti numerických metod	24
4.1.1 Referenční nastavení	24
4.1.2 Stupeň kvadratury	24
4.1.3 Počet elementů sítě	26
4.1.4 Externí komplexní škálování	27
4.2 Pokrytí komplexní roviny rezonancemi	33
4.2.1 Metodika simulací	33
4.2.2 Gaussovský potenciál	33
4.2.3 Exponenciální potenciál	36
4.2.4 Morseův potenciál	38
4.2.5 Parabolický gaussovský potenciál	41
4.2.6 Rezonance pro molekulu CO	46
Závěr	48
Seznam použité literatury	50
Seznam obrázků	51
Seznam tabulek	53
Seznam výpisů	54

Úvod

Rezonanční jevy se vyskytují v celé řadě oblastí fyziky, ať už klasické či kvantové. Případ tvarové rezonance (z angl. shape resonance) je v kvantové mechanice spojený s rozptylem částic, které prochází potenciálovou bariérou díky tunelovému jevu dle [1]. Aby nastala rezonance, musí mít rozptylovaná částice určitou specifickou energii, která odpovídá stavu systému, při němž dochází k dočasnému zachycení částice díky tvaru potenciálu. V kvantové teorii rozptylu se ukazuje, že rezonance úzce souvisí s póly tzv. S -matice, které se nacházejí v komplexní rovině energie dle [2].

Určení energetického spektra a vlastních stavů určitého systému je výstupem řešení stacionární Schrödingerovy rovnice neboli vlastního problému s Hamiltonovým operátorem. Ve standardní formulaci kvantové mechaniky jsou operátory měřitelných veličin hermitovské a jako takové mají čistě reálné spektrum. Vázané stavy mají energie určené reálnými vlastními čísly a vlastní stavy jsou kvadraticky integrovatelné. Tuto vlastnost nesplňují stavy příslušné rezonancím s komplexními energiemi, které se vyskytují ve čtvrtém kvadrantu komplexní roviny, tedy reálná část je kladná a imaginární část je záporná. Reálná složka představuje rezonanční energii a imaginární složka odpovídá šířce rezonance spojené s její dobou života. Přestože rezonance nejsou vlastní stavy systému, lze je jako vlastní stavy určovat, pokud se provede vhodná modifikace odpovídajícího hamiltoniánu pomocí tzv. komplexního škálování dle [3].

Schrödingerovu rovnici lze i v jednorozměrném případě analyticky řešit pouze pro několik vybraných typů potenciálů, např. pro parabolický potenciál harmonického oscilátoru nebo pro pravoúhlou jámu. Obecně je nutné problém řešit numericky. Pro numerické řešení obyčejných a parciálních diferenciálních rovnic se často využívá metoda konečných prvků (FEM z angl. Finite Element Method). Ta rozděluje oblast, kde problém řešíme, na elementy, na kterých je přibližné řešení aproximováno rozvojem do báze polynomů. Celkové přibližné řešení je poté dáno superpozicí přes elementy. Varianta metody s reprezentací pomocí diskrétní proměnné (DVR z angl. Discrete Variable Representation) vyjadřuje řešení na každém elementu pomocí interpolačních polynomů zkonstruovaných pomocí uzlových bodů Gaussovy-Lobattovy kvadratury. Výhodou je, že operátor potenciálu je v takové bázi efektivně diagonální, avšak pro operátor kinetické energie toto neplatí. Výsledná matice Hamiltonova operátoru je téměř blokově diagonální a má vhodný tvar pro výpočet spektra. Aby spektrum tohoto operátoru bylo komplexní a objevily se v něm rezonance, používá se transformace, která reálnou prostorovou proměnnou převede na komplexní pomocí rotace, což je obsahem metody exteriálního komplexního škálování (ECS z angl. Exterior Complex Scaling). Vlastní čísla výsledné Hamiltonovy matice se dají určit pomocí QR algoritmu a obecně závisí na použitých parametrech numerické metody až na energie vázaných stavů a rezonancí, které jsou s dobrou přesností na těchto parametrech naopak nezávislé. Tato vlastnost je umožňuje detekovat. Stačí použít metodu pro dvě různá nastavení a najít shodná vlastní čísla v rámci zvolené tolerance.

Práce se věnuje numerickým simulacím výše uvedených metod s ohledem na přesnost výpočtu rezonancí pro jednorozměrné modelové potenciály. Dále se zaměřuje na pokrytí komplexní roviny rezonancemi, což je užitečné pro konstrukci

jednoduchých modelů v atomové a molekulové fyzice. Práce je členěná do čtyř kapitol. V 1. kapitole je obecně popsána rezonance v kontextu kvantové mechaniky s důrazem na tvarovou rezonanci. Jsou uvedeny vlastnosti energetického spektra a přehledově několik metod výpočtu. 2. kapitola se věnuje popisu numerických metod, které jsou v práci použity. Konkrétně metodě konečných prvků (FEM), reprezentaci pomocí diskrétní proměnné (DVR), externímu komplexnímu škálování (ECS) a výpočtu vlastních čísel pomocí QR algoritmu. Ve 3. kapitole je popsána implementace programu na výpočet vlastních stavů spolu s příklady použití. Program je k dispozici jako open-source ve standardním repozitáři knihoven pro jazyk Python, kde je také dostupná uživatelská dokumentace. Jádrem práce je 4. kapitola. V části 4.1 jsou prezentovány výsledky numerických simulací vlastností použitých metod s ohledem na přesnost výpočtu rezonancí. V části 4.2 jsou prezentovány výsledky pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro modelové potenciály nazývané *gaussovský*, *exponenciální*, *Morseův* a *parabolický gaussovský*. Všechny tyto potenciály obsahují parametry, které ovlivňují polohu rezonancí v komplexní rovině a změnou parametrů lze určit oblasti, které jsou pro jednotlivé potenciály dosažitelné. Využití potenciálů je také ilustrováno na datech rezonancí z rozptylu elektronu na vybraných dvouatomových molekulách N_2 , O_2 , NO a CO . V případě molekul N_2 a NO je k dispozici model, který popisuje interakci elektronu s molekulou pomocí gaussovského potenciálu dle [4].

V celé práci se používají atomové jednotky, kde pokládáme Planckovu konstantu $\hbar = 1$ a hmotnost elektronu $m_e = 1$, takže níže uvedené vzorce již tyto konstanty neobsahují. Redukovaná hmotnost systému je vztažena k hmotnosti elektronu a jednotkou energie je Hartreeho energie $E_h = \hbar^2/(m_e a_0^2) \approx 27.211$ eV, kde $a_0 = 0,529 \times 10^{-11}$ m je Bohrov poloměr atomu, který je jednotkou délky. Všechny vstupní hodnoty a výstupy vytvořeného programu jsou v atomových jednotkách a pokud nejsou uvedeny jednotky v textu či grafech, jsou hodnoty vždy v těchto atomových jednotkách.

1. Rezonance

1.1 Typy rezonancí

Rezonance se vyskytují v řadě fyzikálních jevů. S ohledem na účely práce si uvedeme dva typy rezonancí, tvarovou (z angl. shape resonance) a Feshbachovu. Příklady jevů z oblasti atomové fyziky bez bližšího popisu jsou v tab. 1.1 převzaté z [5]. Tyto rezonance mají různou dobu života a z pohledu kvantové mechaniky odpovídají kvazistacionárním stavům (používá se i termín metastabilní). Samotná doba života závisí na konkrétním jevu a časová škála je široká od femtosekund po tisíce let.

Jev	Systém	Rezonance
Radioaktivní záření	Jádra	Tvarová
Starkův jev	Atomy a molekuly v nízkofrekvenčním poli	Tvarová
Fotoionizace	Atomy a molekuly ve vysokofrekvenčním poli	Feshbachova
Augerův jev	Atomy a molekuly v excitovaných stavech	Feshbachova
Predisociace	Molekuly	Tvarová, Feshbachova
Predesorpce	Atomy a molekuly adsorbované na povrchu	Feshbachova
Generování vyšší harmonické	Atomy a molekuly v silném laserovém poli	Tvarová, Feshbachova
Odcházející módy ve vlnovodu	Světlo šířící se optickým vlnovodem	Feshbachova

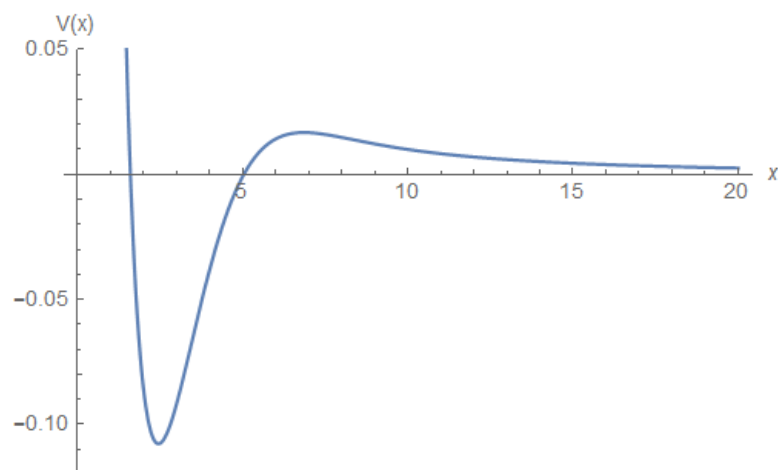
Tabulka 1.1: Příklady fyzikálních jevů s rezonancí

Tvarová rezonance je spojena s rozptylem částice na potenciálové bariéře, skrze kterou částice prochází díky tunelovému jevu. Příklad potenciálu s bariérou, který vznikne kombinací přitažlivého členu s krátkým dosahem ae^{-br^2} pro $a < 0, b > 0$ a odpudivého centrifugálního členu s dlouhým dosahem $\frac{l(l+1)}{2mr^2}$, je na obr. 1.1, viz [1], kde jsme položili hmotnost částice $m = 1$ a orbitální moment hybnosti $l = 1$. Částice s kladnou energií nižší než výška bariéry je zachycena v oblasti s přitažlivým potenciálem a tento stav je kvazistacionární. Z oblasti se dostane tunelováním přes bariéru. Hlavní náplní práce je detekce tvarových rezonancí pro jednorozměrné potenciály, ovšem tento typ rezonance se vyskytuje také ve vícerozměrných problémech. Tvar potenciálu ovlivňuje dobu života rezonance definovanou vztahem

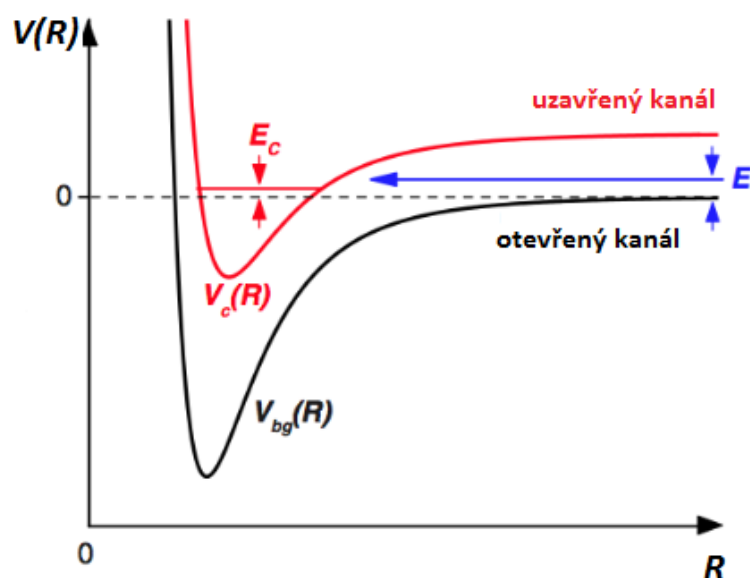
$$\tau = \frac{1}{\Gamma}, \quad (1.1)$$

kde Γ je tzv. šířka rezonance.

Dalším typem je Feshbachova rezonance pojmenovaná po Hermanu Feshbachovi, viz [6], [5], kterou si ilustrujeme na příkladu dvoukanálového modelu. Uva-



Obrázek 1.1: Příklad potenciálu pro tvarovou rezonanci



Obrázek 1.2: Příklad potenciálu pro Feshbachovu rezonanci

žujeme dva molekulové potenciály, potenciál pozadí $V_{bg}(R)$, který reprezentuje otevřený kanál (také se nazývá vstupní) a potenciál $V_c(R)$, který reprezentuje uzavřený kanál na obr. 1.2 převzatého z [6], mezi kterými existuje vazba. Rezonance nastává v případě, kdy se energie vázaného stavu (pokud neuvažujeme vazbu) molekuly E_c v uzavřeném kanálu blíží energii srážky dvou atomů E v otevřeném kanálu a systém se díky vazbě může dočasně dostat do tohoto stavu. Práce se Feshbachově rezonanci blíže nevěnuje a nerozebírá její matematický popis.

Tvarová rezonance má čistě kvantovou povahu díky tunelovému jevu. Feshbachova rezonance má i klasickou analogii, k excitaci může dojít např. ve vysokofrekvenčním elektrickém poli.

1.2 Popis rezonance

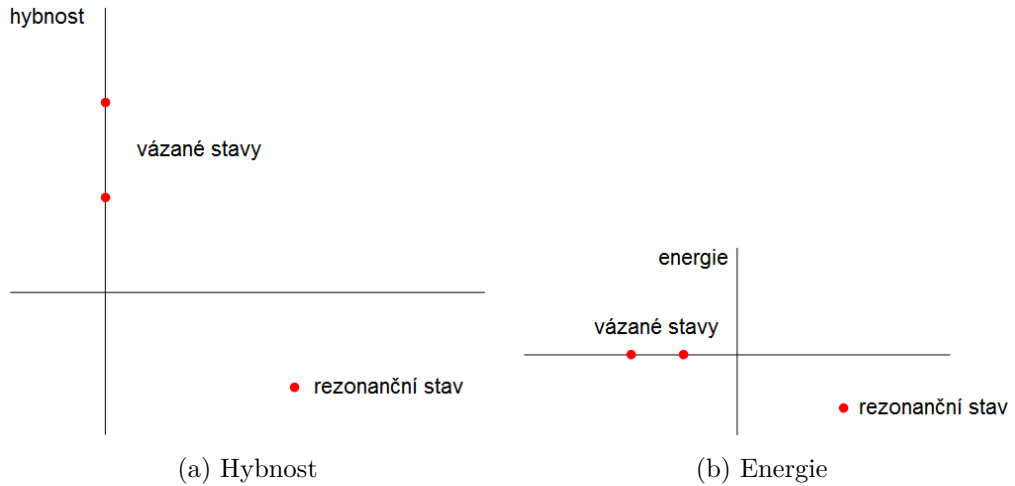
V této části si uvedeme některé vlastnosti rezonancí, viz [2]. V teorii rozptylu se používá pojem rozptylová matice (S -matice), která umožňuje určit pravděpodobnost přechodu mezi vstupním a výstupním stavem

$$w(\psi_i \rightarrow \psi_o) = |\langle \psi_o | S | \psi_i \rangle|^2. \quad (1.2)$$

Z pohledu rezonancí jsou důležité póly S -matice v komplexní rovině hybnosti p , kde hodnota diverguje. Póly, které se nachází na kladné imaginární poloose, odpovídají vázaným stavům. Póly ve čtvrtém kvadrantu komplexní roviny odpovídají rezonancím. V případě, že se pracuje s energií $E = \frac{p^2}{2m}$ místo hybnosti, nachází se příslušné póly jinde. Na záporné reálné poloose jsou póly pro vázané stavy. Póly pro rezonance obvykle zůstávají ve čtvrtém kvadrantu, ale můžou se výjimečně nacházet i ve třetím kvadrantu. Příslušná rezonanční energie má tvar

$$E = E_R - i\frac{\Gamma}{2}, \quad (1.3)$$

kde E_R je rezonanční energie a Γ její šířka. Ilustrace pólů S -matice je na obr. 1.3.



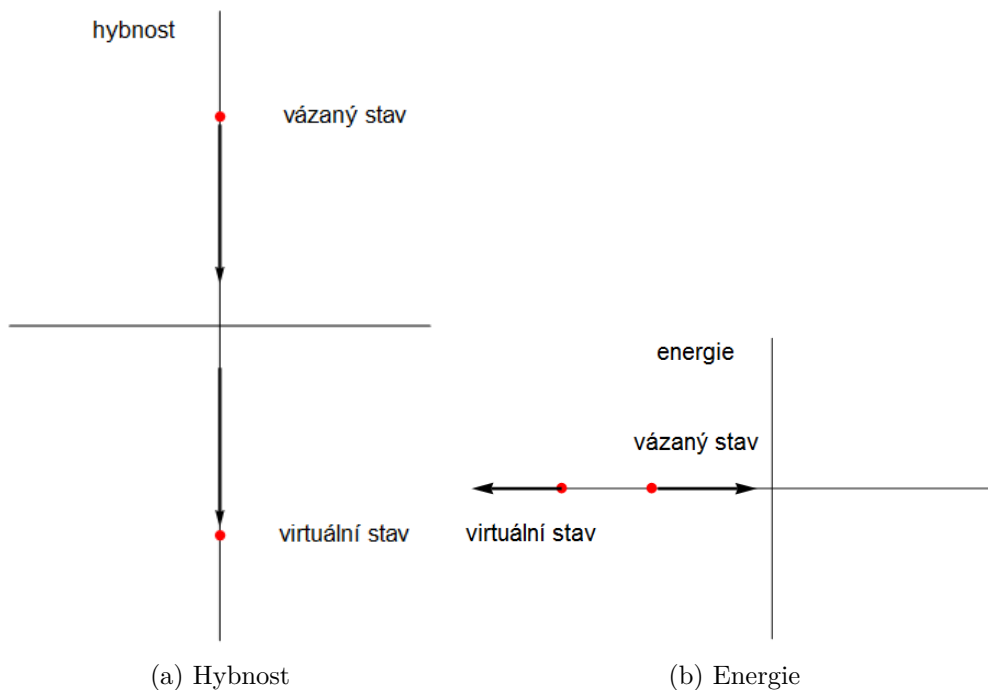
Obrázek 1.3: Poloha vázaných stavů a rezonancí v komplexní rovině hybnosti a energie

Protože vázané stavy i rezonance odpovídají pólům S -matice, existuje mezi nimi vztah. Do Hamiltonova operátoru se zavádí vazební parametr λ , který ovlivňuje velikost potenciálu

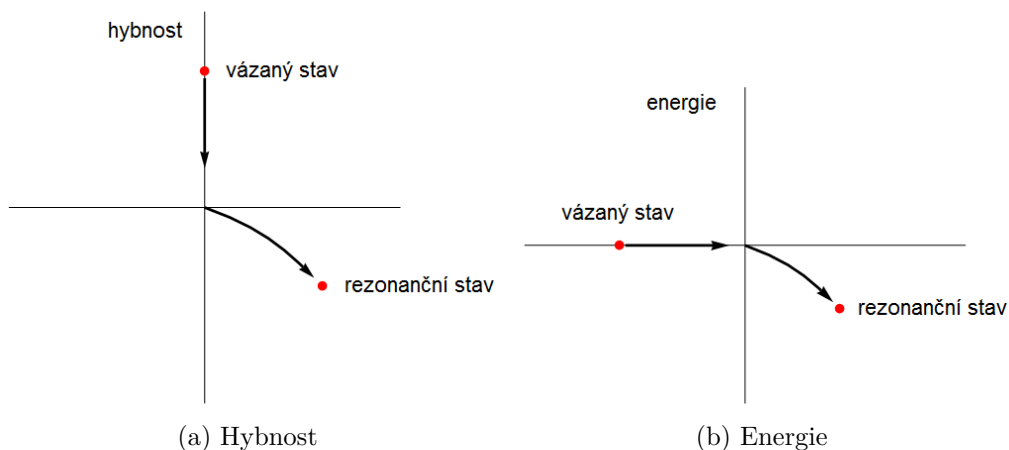
$$H = H^0 + \lambda V, \quad (1.4)$$

kde H^0 je kinetický člen. Předpokládejme, že existuje hodnota λ_0 , pro kterou je pól lokalizovaný v počátku, tzv. rezonance s nulovou energií. Parametr určuje polohy pólů, které se při změně jeho hodnoty pohybují v komplexní rovině, jak v hybnosti, tak v energii. Rozlišíme dvě situace pro hodnoty orbitálního momentu hybnosti l , a to $l = 0$, resp. $l > 0$. Pokud platí $l = 0$ a $\lambda > \lambda_0$, máme v případě hybnosti pól na kladné imaginární poloose a jemu odpovídající vázaný stav. Snižováním hodnoty parametru na $\lambda < \lambda_0$ se pól posune na zápornou imaginární poloosu. Příslušný stav se nazývá virtuální. V případě energie se poloha

pólu pohybuje na záporné reálné poloose. Virtuální stav se také vyskytuje na záporné reálné poloose. Ilustrace je na obr. 1.4. V situaci $l > 0$ se pól odpovídající vázanému stavu při změně parametru posune do čtvrtého kvadrantu a stává se rezonančním. Ilustrace je na obr. 1.5.



Obrázek 1.4: Pohyb stavů pro $l = 0$



Obrázek 1.5: Pohyb stavů pro $l > 0$

1.3 Metody detekce

Metody detekce rezonancí lze zhruba rozdělit do několika tříd dle [1]. Je uveden jejich stručný princip, podrobněji se práce věnuje metodám popsaným v kapitole 2.

Metody rozptylu jsou založeny na výpočtu rozptýlené vlnové funkce v oblasti, kde se očekává výskyt rezonance a výrazně se mění fázový posun. Poloha rezonance a její šířka se hledají např. pomocí prokládání průběhu účinného průřezu Breitovou-Wignerovou formulí

$$\sigma_l(E) = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{\Gamma^2/4}{(E - E_R)^2 + \Gamma^2/4}, \quad (1.5)$$

kde E_R je rezonanční energie a Γ její šířka. Metoda není příliš přesná a má spíše historický význam.

Spektrální metody jsou založeny na výpočtu spektra modifikovaného Hamiltonova operátoru. Hamiltonův operátor je tradičně v kvantové mechanice hermitovský a má reálné spektrum. Protože energie odpovídající rezonancím jsou komplexní, spektrální metody transformují operátor tak, že již není hermitovský a má komplexní spektrum. Tyto metody poskytují dostatečně přesný výpočet rezonančních energií a odpovídajících šířek a jsou velmi používané. Jednou z těchto metod je komplexní škálování, jejíž varianta externí komplexní škálování (ECS z angl. Exterior Complex Scaling) je použita v této práci a je popsána v části 2.3. Zde si stručně představíme jiné 3 metody z této třídy (také se nazývají metody kontinua), viz [7]. Metody využívají parametrizaci Hamiltonova operátoru $H \rightarrow H(\lambda)$ a výpočet se skládá ze tří kroků:

- *krok 1*: Výpočet n energií $E_j(\lambda_i)$ pro m hodnot λ , které se nazývají λ -trajektorie pro energie.
- *krok 2*: Identifikace trajektorií spojených s rezonancemi.
- *krok 3*: Analýza vybraných trajektorií a nalezení rezonančních energií.

Metody se nejvíce liší způsobem parametrizace v kroku 1. Metody mají i své dílčí varianty podle způsobu analýzy v kroku 3.

Metoda komplexního absorbujícího potenciálu (CAP z angl. Complex Absorbing Potential) do Hamiltonova operátoru přidává ryze imaginární člen

$$H(\eta) = H - i\eta W, \quad (1.6)$$

kde η se nazývá síla CAP. Funkce $W(r)$ je nezáporná a od jisté hodnoty r_0 roste do nekonečna, příklad je

$$W(r) = \begin{cases} 0 & r < r_0 \\ (r - r_0)^2 & r \geq r_0. \end{cases} \quad (1.7)$$

Haziho-Taylorova stabilizační metoda (HTS z angl. Hazi-Taylor Stabilization) diskretizuje stavy kontinua Hamiltonova operátoru tím, že studovaný systém obklopí potenciálem, který realizuje dané okrajové podmínky v uzavřeném intervalu. Délka intervalu L vystupuje jako parametr v kroku 1. Výstupem výpočtu je stabilizační graf závislosti energie $E_n(L)$ na parametru $\alpha = \frac{1}{L^2}$. Zatímco stavy kontinua jsou přibližně úměrné hodnotě parametru, rezonance na ní nezávisí. Odhad rezonanční energie 1. řádu lze získat z inflexních bodů závislosti a její šířka z lokálního chování. Pokročilejší metody prokládají data ze závislosti $E_n(L_j)$ a vytváří model

energie $E(z)$, kde z je prodloužení parametru L do komplexního oboru. Rezonanční energie odpovídají stacionárním bodům, kdy

$$\left| \frac{dE(z)}{dz} \right| = 0. \quad (1.8)$$

Metoda regularizovaného analytického prodloužení (RAC z angl. Regularized Analytical Continuation) přidává do Hamiltonova operátoru přitažlivý potenciál U

$$H_\lambda = H + \lambda U, \quad (1.9)$$

kde λ je silový parametr. Příkladem potenciál je $U = -\frac{1}{r}$. Ve výpočtu se parametr λ zvyšuje, dokud se rezonance nezmění na vázaný stav. Přibližný počáteční odhad polohy rezonance je potřebný. λ -trajektorie odpovídající rezonanci má největší sklon. Pomocí inverzní Padého aproximace se konstruuje model

$$\lambda(\kappa) = \lambda_0 \frac{(\kappa^2 + 2\alpha^2\kappa + \alpha^4 + \beta^2)(1 + \delta^2\kappa)}{\alpha^4 + \beta^2 + \kappa(2\alpha^2 + \delta^2(\alpha^4 + \beta^2))}, \quad (1.10)$$

kde $\kappa^2 = -E$ a $\alpha, \beta, \delta, \lambda_0$ jsou kladné parametry, ze kterých lze určit rezonanční energii a její šířku

$$E_r = \beta^2 - \alpha^4, \Gamma = 4\alpha^2\beta. \quad (1.11)$$

2. Numerické metody

2.1 Metoda FEM

Metoda konečných prvků (FEM z angl. Finite Element Method), viz [8], je určena pro numerické řešení obyčejných a parciálních diferenciálních rovnic. Pro účely práce je metoda ilustrována na příkladu jednorozměrné Poissonovy rovnice elektrostatiky

$$-\frac{d^2U(x)}{dx^2} = 4\pi\rho(x), \quad (2.1)$$

kde U je potenciál a ρ je hustota náboje reprezentující zdroj pole. Rovnice se řeší na intervalu $x \in [a, b]$ s homogenní Dirichletovou okrajovou podmínkou $U(a) = U(b) = 0$. Rovnici vynásobíme tzv. testovací funkcí φ z vhodného prostoru a provedeme integraci přes daný interval

$$-\int_a^b \frac{d^2U(x)}{dx^2} \varphi(x) dx = \int_a^b 4\pi\rho(x) \varphi(x) dx. \quad (2.2)$$

Aplikací metody per partes vymizí hraniční člen a výsledná slabá formulace má tvar

$$\int_a^b \frac{dU(x)}{dx} \frac{d\varphi(x)}{dx} dx = \int_a^b 4\pi\rho(x) \varphi(x) dx. \quad (2.3)$$

Oblast řešení je rozdělena na N elementů pomocí uzlů x_0, \dots, x_N a předpokládáme, že řešení U lze aproximovat jako lineární kombinaci

$$U(x) \simeq \sum_{i=1}^{N-1} \alpha_i \varphi_i(x), \quad (2.4)$$

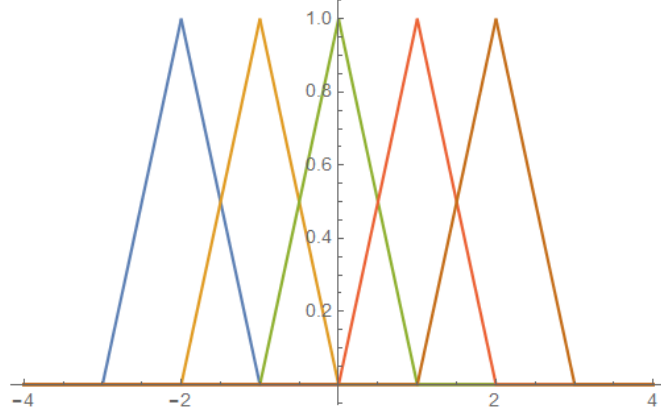
kde φ_i jsou báze funkce a α_i jsou neznámé koeficienty. Jako báze funkce lze volit např. trojúhelníkové pulsy s kompaktním nosičem definované

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} 0 & x < x_{i-1} \vee x > x_{i+1} \\ \frac{x-x_{i-1}}{h} & x_{i-1} \leq x \leq x_i \\ \frac{x_{i+1}-x}{h} & x_i \leq x \leq x_{i+1}, \end{cases} \quad (2.5)$$

kteří nabývají nenulové hodnoty pouze v jednom uzlu $\varphi_i(x_j) = \delta_{ij}$ a spojitě se napojují na sousední uzly, kde již mají nulovou hodnotu. Pro zjednodušení uvažujeme rovnoměrné dělení uzlů $h = x_{i+1} - x_i$. Příklad báze je na obr. 2.1. Požaduje se, aby aproximace v uzlech odpovídala funkčním hodnotám řešení, pak pro koeficienty lineární kombinace platí $\alpha_i = U(x_i)$ a dostáváme

$$U(x) \simeq \sum_{i=1}^{N-1} U(x_i) \varphi_i(x). \quad (2.6)$$

Za testovací funkce $\varphi(x)$ postupně dosadíme všechny báze funkce $\varphi_i(x)$ do slabé formulace (2.3). Dostaneme soustavu lineárních rovnic $A\alpha = \mathbf{b}$ s prvky matice $A_{ij} = \int_a^b \frac{d\varphi_i(x)}{dx} \frac{d\varphi_j(x)}{dx} dx$ a koeficienty pravé strany $b_i = \int_a^b 4\pi\rho(x) \varphi_i(x) dx$.



Obrázek 2.1: Příklad báze pro metodu FEM, $N = 5, h = 1$

Při rovnoměrném dělení uzlů a volbě trojúhelníkových bázových funkcí, které mají po částech konstantní derivace, má matice soustavy jednoduchý tridiagonální tvar

$$\frac{1}{h} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \\ \alpha_{N-2} \\ \alpha_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{N-2} \\ b_{N-1} \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

2.2 Metoda DVR

Metoda reprezentace diskrétní proměnnou (DVR z angl. Discrete Variable Representation) používá bázi funkcí, ve které je operátor potenciálu V vystupující ve stacionární Schrödingerově rovnici

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.8)$$

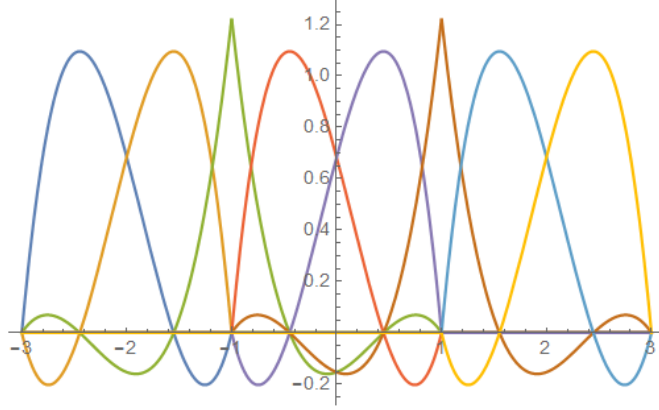
reprezentován diagonální maticí. Metodu lze kombinovat spolu s FEM, kde se v každém elementu používá báze z DVR, tzv. metoda FEM-DVR dle [3]. Metoda je založena na aproximaci integrálů pomocí numerické kvadratury zvoleného řádu. Konkrétně se používá Gaussova-Lobattova kvadratura popsaná v [9].

Uvažujeme integraci v intervalu $x \in [-1, 1]$. Kvadratura je definovaná pomocí

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = w_1 f(-1) + w_n f(1) + \sum_{i=2}^{n-1} w_i f(x_i), \quad (2.9)$$

kde $x_i, i = 2, \dots, n-1$ jsou uzly a $w_i, i = 1, \dots, n$ jsou váhy. Krajní uzly odpovídají hranici intervalu a vnitřní uzly se volí jako kořeny derivace Legendreova polynomu $P'_{n-1}(x)$. Váhy jsou definovány

$$w_i = \begin{cases} \frac{2}{n(n-1)} & i = 1, n \\ \frac{2}{n(n-1)(P'_{n-1}(x_i))^2} & i = 2, \dots, n-1. \end{cases} \quad (2.10)$$



Obrázek 2.2: Příklad báze pro metodu FEM-DVR, $N = 3, n = 4$

Krajní uzly jsou fixní, tedy řád kvadratury (stupeň polynomu, který integruje přesně) je $2n - 1$. Optimální Gaussova kvadratura, kde uzly jsou kořeny Legendreova polynomu, má řád $2n + 1$. Interval $[-1, 1]$ není omezující, uzly a váhy lze přeskálovat na obecný interval $[a, b]$ pomocí lineární transformace

$$\begin{aligned} w_i &\rightarrow \frac{b-a}{2} w_i, \\ x_i &\rightarrow \frac{b-a}{2} x_i + \frac{b+a}{2}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Bázové funkce tvoří vážené Lagrangeovy interpolační polynomy

$$\varphi_i^{(k)}(x) = \frac{1}{\sqrt{w_i^{(k)}}} \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{x - x_j^{(k)}}{x_i^{(k)} - x_j^{(k)}}, \quad (2.12)$$

kde index $k = 1, \dots, N$ označuje element a váha $w_i^{(k)}$ zajišťuje normování. Definice bázové funkce platí na intervalu $[x_{k-1}, x_k]$, kde má interpolovat, a mimo něj je funkce nulová. Pro zajištění spojitého přechodu bázových funkcí mezi elementy (nikoliv spojitosti derivace) se funkce, které jsou nenulové na okraji elementu, spojí do jedné, tzv. přemostovací funkce (z angl. bridging function)

$$\varphi_1^{(k)}(x) = \frac{\sqrt{w_n^{(k)}} \varphi_n^{(k)}(x) + \sqrt{w_1^{(k+1)}} \varphi_1^{(k+1)}(x)}{\sqrt{w_n^{(k)} + w_1^{(k+1)}}}. \quad (2.13)$$

Díky homogenní Dirichletově okrajové podmínce na hranici intervalu se nepoužívají příslušné bázové funkce na okraji $\varphi_1^{(1)}, \varphi_n^{(N)}$, tedy báze má celkem $N(n-1) - 1$ funkcí. Ukázka báze je na obr. 2.2. Polynomy nabývají nenulové hodnoty pouze v jednom uzlu $\varphi_i^{(k)}(x_j^{(k)}) = \frac{\delta_{ij}}{\sqrt{w_i^{(k)}}}$ a díky této vlastnosti je posloupnost bázových funkcí ortogonální ve smyslu kvadratury

$$\int_{x_{k-1}}^{x_k} \varphi_i^{(k)}(x) \varphi_j^{(k)}(x) dx \simeq \sum_{l=1}^n w_l^{(k)} \varphi_i^{(k)}(x_l^{(k)}) \varphi_j^{(k)}(x_l^{(k)}) = \sum_{l=1}^n w_l^{(k)} \frac{\delta_{il}}{\sqrt{w_l^{(k)}}} \frac{\delta_{jl}}{\sqrt{w_l^{(k)}}} = \delta_{ij}. \quad (2.14)$$

Z posloupnosti lokálních bázových funkcí (definovaných v rámci jednoho elementu) zkonstruujeme posloupnost globálních bázových funkcí (na intervalu $[a, b]$)

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= \varphi_2^{(1)}(x), \\ \varphi_2(x) &= \varphi_3^{(1)}(x), \\ &\vdots \\ \varphi_{N(n-1)-1}(x) &= \varphi_{n-1}^{(N)}.\end{aligned}\tag{2.15}$$

Operátor potenciálu je v této globální bázi diagonální

$$V_{ij} = \int_a^b \varphi_i(x) V(x) \varphi_j(x) dx \simeq \sum_{l=1}^{N(n-1)-1} w_l \varphi_i(x_l) V(x_l) \varphi_j(x_l) = V(x_l) \delta_{ij}.\tag{2.16}$$

Operátor kinetické energie je v bázi reprezentován pomocí matice tuhosti (z angl. stiffness matrix)

$$T_{ij} = \frac{1}{2} \int_a^b \frac{d\varphi_i(x)}{dx} \frac{d\varphi_j(x)}{dx} dx \simeq \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^n w_l^{(k)} \frac{d\varphi_i(x_l^{(k)})}{dx} \frac{d\varphi_j(x_l^{(k)})}{dx}.\tag{2.17}$$

Bázové funkce tvoří vážené Lagrangeovy interpolační polynomy, derivace v uzlech pak mají tvar

$$\frac{d\varphi_i(x_k)}{dx} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{w_i}} \sum_{l=1, l \neq i}^n \frac{1}{x_i - x_l} & i = k \\ \frac{1}{\sqrt{w_i}} \frac{1}{x_i - x_k} \prod_{l=1, l \neq i, k}^n \frac{x_k - x_l}{x_i - x_j} & i \neq k, \end{cases}\tag{2.18}$$

kde se liší předpis pro diagonální prvky od předpisu pro prvky mimo diagonálu matice. Operátor kinetické energie již v bázi není diagonální jako operátor potenciálu, ale příslušná matice tuhosti je téměř blokově diagonální, kde máme N bloků (počet elementů) o velikosti $n \times n$ (počet uzlů v elementu) a sousední bloky se překrývají v jednom prvku (díky přemostovací funkci). Ukázka struktury matice je na obr. 2.3, vybarveny jsou obecně nenulové prvky. Stejnou strukturu má i matice Hamiltonova operátoru $H_{ij} = T_{ij} + V_{ij}$.

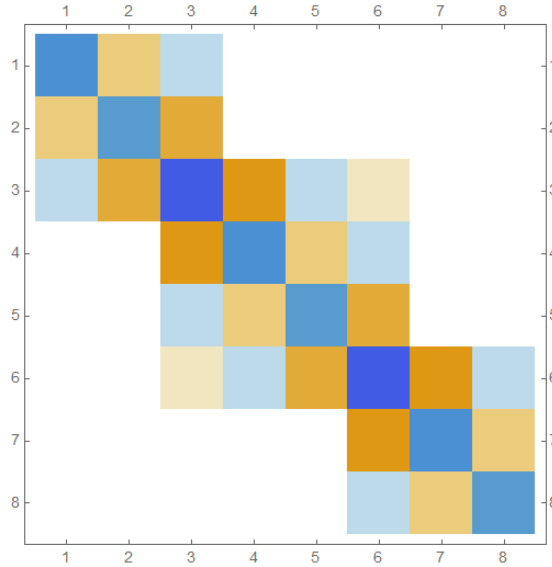
2.3 Metoda ECS

Vázané stavy lze určit ze spektra Hamiltonova operátoru, tj. z vlastních čísel a vektorů Hamiltonovy matice. Matice je hermitovská, tedy má pouze reálná vlastní čísla. Z takové matice ale nelze určit rezonance, kterým odpovídá vlnová funkce ve tvaru rovinné vlny

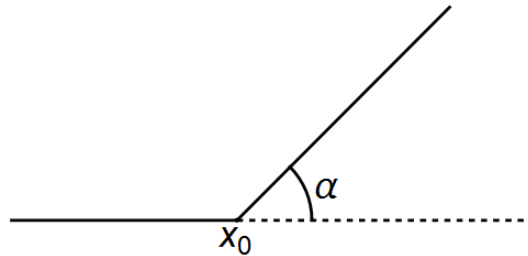
$$\psi(r) \sim Ae^{ikr},\tag{2.19}$$

kde A je amplituda a k komplexní vlnový vektor. Tato funkce není kvadraticky integrovatelná a neleží v Hilbertově prostoru L^2 . Metoda externího komplexního škálování (ECS z angl. Exterior Complex Scaling), viz [1], [5], [3], umožňuje detekci vázaných stavů i rezonancí. Je založena na transformaci souřadnic pomocí rotace v komplexní rovině

$$r = \begin{cases} r & r \in [0, r_0] \\ r_0 + (r - r_0)e^{i\alpha} & r \geq r_0, \end{cases}\tag{2.20}$$



Obrázek 2.3: Struktura matice tuhosti, $N = 3, n = 4$



Obrázek 2.4: Ilustrace metody ECS

kde r_0 je bod, od kterého se souřadnice transformuje, a α je úhel rotace. Oba parametry se volí v závislosti na problému. Pro účely práce je uveden jednorozměrný tvar, v případě trojrozměrných problémů s radiálně symetrickým potenciálem je takto transformována radiální souřadnice. Ilustrace transformace je na obr. 2.4.

Pro jednoduchost zvolme transformaci $r \rightarrow re^{i\alpha}$. Po dosazení do (2.19) dostáváme

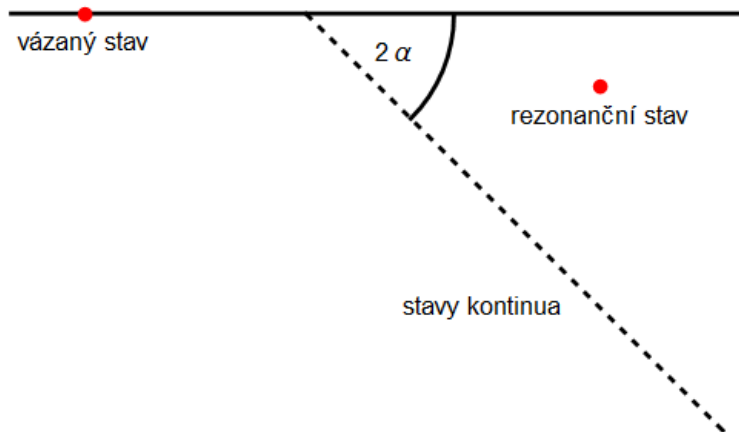
$$\psi(r) \sim Ae^{ikre^{i\alpha}} = Ae^{-kr \sin \alpha} e^{ikr \cos \alpha} \quad (2.21)$$

a díky exponenciálnímu poklesu pro $\alpha < \pi/2$ je již vlnová funkce kvadraticky integrovatelná. Transformace souřadnic se projeví na tvaru Hamiltonovy matice rotací v komplexní rovině u kinetického i potenciálového členu

$$H(\alpha) = e^{-i2\alpha}T + V(\alpha). \quad (2.22)$$

Transformovaná matice již není hermitovská a v důsledku nemá čistě reálné spektrum.

Vliv transformace na polohu vlastních čísel v komplexní rovině je ilustrován na obr. 2.5 dle [1]. Vázané stavy se nachází na záporné reálné poloose. Stavy kontinua jsou na polopřímce otočené o úhel 2α do čtvrtého kvadrantu. Rezonance se nachází ve stejném kvadrantu nad touto polopřímkou, je-li zvolen dostatečně velký úhel α , a jejich poloha nezávisí na zvoleném úhlu. Tato vlastnost umožňuje jejich detekci. Pokud se spektrum vypočte pro dvě různé hodnoty úhlů, vlastní čísla odpovídající vázaným stavům a rezonancím budou v obou případech stejná.



Obrázek 2.5: Vlastní čísla po aplikaci metody ECS

Změní se stavy kontinua, které na použitém úhlu závisí. Parametry metody škálování r_0 a α lze volit. Parametr r_0 by měl být nezáporný v problémech, kde r představuje radiální souřadnici. V závislosti na volbě parametrů lze rozlišit několik variant, viz [5]:

- *CS*: Komplexní škálování (z angl. Complex Scaling) pro volbu $r_0 = 0$. Transformují se všechny souřadnice.
- *ECS*: Externí komplexní škálování (z angl. Exterior Complex Scaling) pro obecnou volbu. Transformují se souřadnice až od bodu $r > r_0$.
- *SES*: Hladké externí škálování (z angl. Smooth Exterior Scaling), které odstraňuje ostrý zlom v bodě r_0 .

2.4 Problém vlastních čísel

Problém vlastních čísel je popsán např. v [10] a definován ve tvaru

$$Ax = \lambda x, \quad (2.23)$$

kde $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ je čtvercová matice, $x \in \mathbb{C}^n$ je nenulový vlastní vektor a $\lambda \in \mathbb{C}$ je vlastní číslo. Množina vlastních čísel tvoří spektrum matice a jsou to kořeny charakteristického polynomu

$$p_A(\lambda) = \det(A - \lambda I). \quad (2.24)$$

Z numerického hlediska není vhodné počítat vlastní čísla jako kořeny polynomu, protože úloha je špatně podmíněná a podle Galoisovy věty neexistuje vzorec pro kořeny polynomů pátého stupně a vyššího. Pro každou čtvercovou matici existuje Schurův rozklad

$$A = QRQ^*, \quad (2.25)$$

kde matice Q je unitární a matice R je horní trojúhelníková s vlastními čísly na hlavní diagonále. Protože vlastní čísla nelze určit přesně, nelze také přesně určit

Schurův rozklad. Používá se iterační metoda, která převádí původní matici na horní trojúhelníkovou pomocí podobnostních transformací

$$Q_j^* \cdots Q_2^* Q_1^* A Q_1 Q_2 \cdots Q_j, \quad (2.26)$$

kde matice Q_j jsou unitární a jejich součin rovněž. V limitním procesu $j \rightarrow \infty$ metoda konverguje k horní trojúhelníkové matici. Unitární matice jsou numericky výhodné, protože nemění číslo podmíněnosti. Metoda pro výpočet Schurova rozkladu se skládá ze dvou fází. V první fázi se původní matice transformuje na matici v horním Hessenbergově tvaru, která má všechny prvky pod první poddiagonálou nulové. Transformace se provádí pomocí Householderových reflexí, jejichž matice jsou unitární a v každém kroku nulují ve vybraném sloupci prvky pod první poddiagonálou. Ve druhé fázi se používá QR algoritmus, který počítá iteračně Schurův rozklad matice H v horním Hessenbergově tvaru, který je jednodušší než u původní obecné matice. Označíme počáteční aproximaci $H^{(0)} = H$. V každé iteraci se počítá QR rozklad matice

$$H^{(k)} = Q^{(k)} R^{(k)}, \quad (2.27)$$

kde $Q^{(k)}$ je unitární matice a $R^{(k)}$ je horní trojúhelníková matice. Matice $H^{(k)}$ je v horním Hessenbergově tvaru a výpočet QR rozkladu probíhá pomocí Givensových rotací, které nulují prvky pod hlavní diagonálou. Aproximace v další iteraci má tvar

$$H^{(k+1)} = R^{(k)} Q^{(k)}. \quad (2.28)$$

Další podrobnosti a zefektivnění QR algoritmu lze najít v [10].

3. Implementace programu

Program pro detekci vázaných stavů a rezonancí je napsán v jazyce Python 3 [11] a využívá matematické knihovny NumPy [12], SciPy [13], SymPy [14] a Matplotlib [15]. Následuje popis implementace spolu s příkladem použití. Text obsahuje odkazy na moduly se zdrojovým kódem v repozitáři na *GitHub*, kde je také k dispozici uživatelská dokumentace. Program lze nainstalovat ze standardního repozitáře knihoven pro Python pomocí příkazu *pip install resoncalc*.

3.1 Ovládání programu

Program se ovládá pomocí skriptu *resoncalc* z příkazové řádky. Typický příklad volání programu je *resoncalc input/settings.json -o output*. Povinným vstupním parametrem je cesta k souboru s nastavením výpočtu. Volitelnými parametry jsou cesta k výstupnímu adresáři *output*, přepínače *verbose* a *silent* pro ladící a tichý režim. Bez zadání volitelných parametrů se výstupy uloží do aktuálního adresáře a v průběhu zpracování se vypisují pouze základní zprávy. Ladící režim vypisuje podrobnější zprávy a tichý režim nevypisuje žádné. Program má rozhraní 3.1 a zbývající neuvedené parametry jsou popsány dále.

```
usage: resoncalc [-h] [-o OUTPUT] [-v] [-s] [-g]
                [-t TITLE] input
```

```
Calculate bound states and resonances for potential
```

```
positional arguments:
```

```
input                input file with computation settings
```

```
options:
```

```
-h, --help            show this help message and exit
```

```
-o OUTPUT, --output OUTPUT
```

```
output directory
```

```
-v, --verbose         verbose mode
```

```
-s, --silent          silent mode
```

```
-g, --generate        generate graphs from data
```

```
-t TITLE, --title TITLE
```

```
output title, used for generate
```

Výpis 3.1: Rozhraní programu

Vstupní rozhraní je implementováno v modulu *input*. Konfigurační soubor obsahuje nastavení numerického výpočtu ve strukturovaném formátu JSON [16]. Následují příklady s povinnými 3.2 a nepovinnými 3.3 parametry. V seznamu jsou nejdříve uvedeny povinné parametry následované volitelnými parametry spolu s výchozími hodnotami.

```

{
  "potential" : "gaussian",
  "params" : [
    {"start": -0.62, "end": -0.56, "cnt": 13},
    {"start": 0.1, "end": 0.2, "cnt": 5}
  ],
  "intervals" : [
    {"start": 0.0, "end": 9.0, "elems": 15,
     "type": "equidistant"},
    {"start": 9.0, "end": 100.0, "elems": 15,
     "type": "progressive", "len": 0.6},
    {"start": 100.0, "end": 10000.0, "elems": 15,
     "type": "progressive", "len": 6.0}
  ]
}

```

Výpis 3.2: Příklad nastavení s povinnými parametry

```

{
  "title" : "run1",
  "potential" : "parabolic_gaussian",
  "nquad" : 15,
  "r0" : 0.0,
  "phases" : [40.0, 30.0],
  "prec" : 1e-8,
  "emax" : 1.0,
  "mu" : 1.0,
  "l" : 1,
  "params" : [
    {"list": [0.028]},
    {"start": 0.028, "end": 0.029, "cnt": 10}
  ],
  "params2" : [1.0],
  "intervals" : [
    {"start": 0.0, "end": 10.0, "elems": 20,
     "type": "equidistant"},
    {"start": 10.0, "end": 150.0, "elems": 15,
     "type": "progressive", "len": 0.5}
  ],
  "outstates" : ["bound", "resonance"],
  "outfiles" : ["states", "eigenvalues", "potential_grid",
               "spectrum", "log", "settings"]
}

```

Výpis 3.3: Příklad nastavení s volitelnými parametry

- *title*: název výstupního adresáře, výchozí podle potenciálu
- *potential*: název potenciálu ze seznamu

- *nquad*: stupeň polynomů použitých v kvadratuře pro DVR, výchozí 15
- *r0*: bod pro ECS, výchozí 0
- *phases*: 2 úhly pro ECS, výchozí 40, 30
- *prec*: přesnost pro detekci vázaných stavů a rezonancí, výchozí 1e-8
- *emax*: maximální detekovaná energie vázaných stavů a rezonancí v atomových jednotkách, výchozí 1
- *mu*: redukovaná hmotnost v atomových jednotkách, výchozí 1
- *l*: orbitální moment hybnosti, výchozí 1
- *intervals*: definice intervalů [start,end] pro FEM s daným počtem elementů a dělením
- *params*: definice parametrů potenciálu s intervalem hodnot [start,end] a dělením, první, resp. druhý záznam odpovídá parametru a, resp. b v definici potenciálu, viz 3.2. Alternativně lze nastavit seznam konkrétních hodnot viz 3.3.
- *params2*: další parametry potenciálu s konstantní hodnotou v pořadí daném definicí potenciálu
- *outstates*: typy vypsaných stavů, výchozí všechny
- *outfiles*: typy generovaných výstupních souborů, výchozí všechny

Soubor může obsahovat více nastavení ve formě seznamu, které se provádí sekvencně nezávisle na sobě. Program vytvoří všechny definované dvojice hodnot parametrů, v příkladu 3.2 jich je $5 \times 13 = 65$.

3.2 Detekce vázaných stavů a rezonancí

Algoritmy metod FEM, DVR, ECS jsou implementovány v modulu *femdvr*. Matematické detaily metody jsou popsány v kapitole 2. Parametry sítě pro FEM se definují pomocí parametru *intervals*. Volí se počet elementů v intervalu a typ dělení. Příklad nastavení a odpovídající uzly v intervalu jsou v 3.4.

- *equidistant*: rovnoměrné dělení intervalu, každý element má velikost $d = \frac{end-start}{elems}$
- *progressive*: postupné dělení intervalu, první element má velikost *len* a velikost se zvětšuje koeficientem $\frac{2(end-start-elems \times len)}{elems(elems-1)}$

```
{"start": 0.0, "stop": 9.0, "elems": 15, "type": "equidistant"}
[0.0 0.6 1.2 1.8 2.4 3.0 3.6 4.2 4.8 5.4 6.0 6.6 7.2 7.8
 8.4 9.0]
```

```
{"start": 9.0, "stop": 100.0, "elems": 15,
 "type": "progressive", "len": 0.6}
[9.0 9.6 10.9 13.1 16.1 19.8 24.3 29.6 35.6 42.5 50.1 58.5 67.7
 77.7 88.4 100.0]
```

```
{"start": 100.0, "stop": 10000.0, "elems": 15,
 "type": "progressive", "len": 6.0}
[100.0 106.0 205.4 398.3 684.6 1064.3 1537.4 2104.0 2764.0
 3517.4 4364.3 5304.6 6338.3 7465.4 8686.0 10000.0]
```

Výpis 3.4: Příklady intervalů

Na uzly v intervalu se aplikuje metoda ECS, výchozí nastavení metody je $r_0 = 0$, $\alpha = 40, 30$ a lze ho změnit pomocí parametrů $r\theta$, *phases*. Po aplikaci metody mají uzly komplexní hodnoty a pro jejich uložení jsou použity datové struktury z knihovny NumPy [12]. Všechny v práci uvažované potenciály lze holomorfně prodloužit do komplexního oboru. Na generované uzly se aplikuje metoda DVR. Gaussova-Lobattova kvadratura je implementována v knihovně SymPy [14], která počítá kořeny a váhy ortogonálních polynomů. Pro kompletní FEM-DVR síť se spočítá matice tuhosti a hodnoty potenciálu v jednotlivých uzlech, které jsou částí diagonály matice. V modulu *potential* jsou implementovány následující typy potenciálů se společným centrifugálním členem $\frac{l(l+1)}{2r^2}$.

- *gaussian*: ae^{-br^2}
- *exponential*: ae^{-br}
- *morse*: $a(1 - e^{-b(r-c)})^2 - a$
- *parabolic_gaussian*: $(ar^2 - c)e^{-br^2}$
- *parabolic_gaussian2*: $a(r^2 - c)e^{-br^2}$

Každý potenciál obsahuje několik parametrů, které ovlivňují polohu vázaných stavů a rezonancí v komplexní rovině. Nový potenciál lze vytvořit programátorským zásahem do modulu *potential*. Stačí vytvořit funkci s definicí potenciálu a nastavit mapování dle vzoru implementovaných potenciálů.

Výsledná Hamiltonova matice je dána součtem matic tuhosti kinetického členu a diagonální matice potenciálu. Vlastní čísla matice se počítají pomocí knihovny SciPy [13] pro dva nastavené úhly v metodě ECS. Knihovna využívá knihovnu LAPACK [17] implementující QR algoritmus. Vlastní čísla odpovídající vázaným stavům a rezonancím nezávisí na volbě úhlu. Program prohledává spektra spočtená pro obě hodnoty úhlu a pokud se vlastní čísla liší v absolutní hodnotě nejvýše o nastavenou přesnost, detekuje stav. Výchozí přesnost je nastavena na $1e-8$ a lze ji změnit pomocí parametru *prec*. Vlastní čísla odpovídající vázaným stavům mají zápornou reálnou část a jsou lokalizovány na záporné reálné poloose. Numericky

mají vlastní čísla i nenulovou imaginární část, která je menší než přesnost použitá pro detekci a pro vázané stavy není zajímavá. Vlastní čísla odpovídající rezonancím mají kladnou reálnou část a jsou lokalizovány ve čtvrtém kvadrantu komplexní roviny. Zde je imaginární část vlastního čísla zajímavá a určuje šířku rezonance. Ukázka je na obr. 3.1. Detekce je implementována v modulu *detection*.

3.3 Výstupy programu

Program generuje soubory v adresáři s názvem *title_yyyymmddhhmiss*, kde název je ve výchozím nastavení volen podle typu potenciálu, nebo lze nastavit pomocí parametru *title*. Adresář se vytváří na cestě zadané ve vstupním parametru *output* nebo v aktuálním adresáři. Generuje se několik typů souborů. Nejdůležitější je seznam nalezených stavů, který se generuje vždy, ostatní soubory jsou doplňkové. Pomocí parametru *outstates* lze nastavit typy vypisovaných stavů *bound*, *resonance*, pokud např. chceme vypisovat pouze rezonance. Pomocí parametru *outfiles* se nastavují typy generovaných souborů. Následuje jejich popis.

- stavy: souhrnný seznam vázaných stavů a rezonancí
- graf komplexního spektra: spektrum pro oba úhly se zvýrazněním vázaných stavů a rezonancí pro konkrétní hodnoty parametrů
- graf potenciálu: graf potenciálu se zvýrazněním vázaných stavů a rezonancí pro konkrétní hodnoty parametrů
- vlastní čísla: vlastní čísla Hamiltonovy matice pro konkrétní hodnoty parametrů a úhlu
- hodnoty potenciálu: hodnoty v uzlech sítě pro konkrétní hodnoty parametrů a úhlu
- nastavení výpočtu: kopie vstupního souboru, soubor *title.json*
- aplikační log: záznam běhu programu, soubor *log.log*

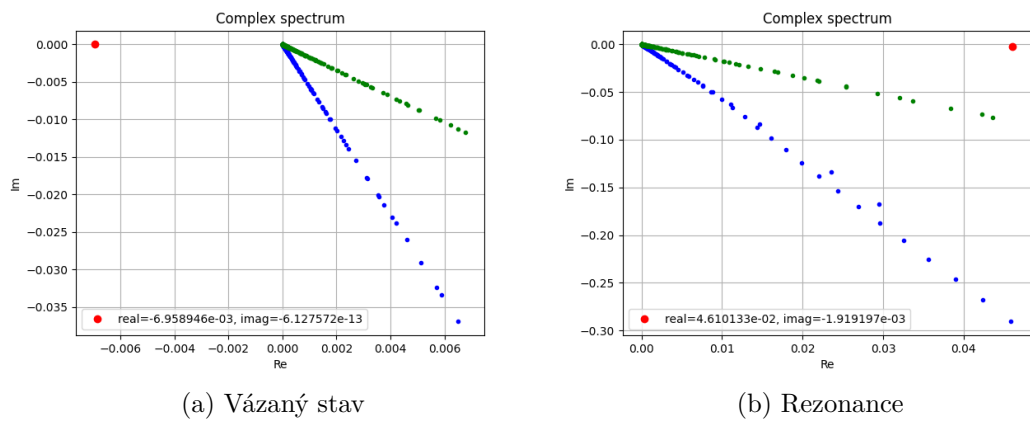
Soubor s vázanými stavy a rezonancemi má název *states.csv* a obsahuje stavy nalezené pro všechny uvažované hodnoty parametrů včetně typu stavu 3.5. Obrázek komplexního spektra má název *spectrum_par1_par2_l.png*. Obsahuje výsek vlastních čísel nalezených pro oba úhly. Vázané stavy a rezonance jsou zvýrazněné červeně 3.1. Obrázek potenciálu má název *potential_par1_par2_l.png* a obsahuje průběh potenciálu se zvýrazněním vázaných stavů a rezonancí 3.2. Soubor s vlastními čísly má název *eigenvalues_par1_par2_l_phase.csv* a obsahuje nalezená vlastní čísla pro konkrétní hodnoty parametrů a úhlu. Soubor s hodnotami potenciálu má název *potential_grid_par1_par2_l_phase.csv* a obsahuje hodnoty potenciálu ve všech uzlech sítě pro konkrétní hodnoty parametrů a úhlu. Metody pro generování výstupů jsou implementovány v modulech *output*, *graphics*. Obrázky se vytváří v případě, že byl detekován alespoň jeden stav, textové soubory se vytváří vždy (pokud nejsou zakázány v nastavení výpočtu).

```

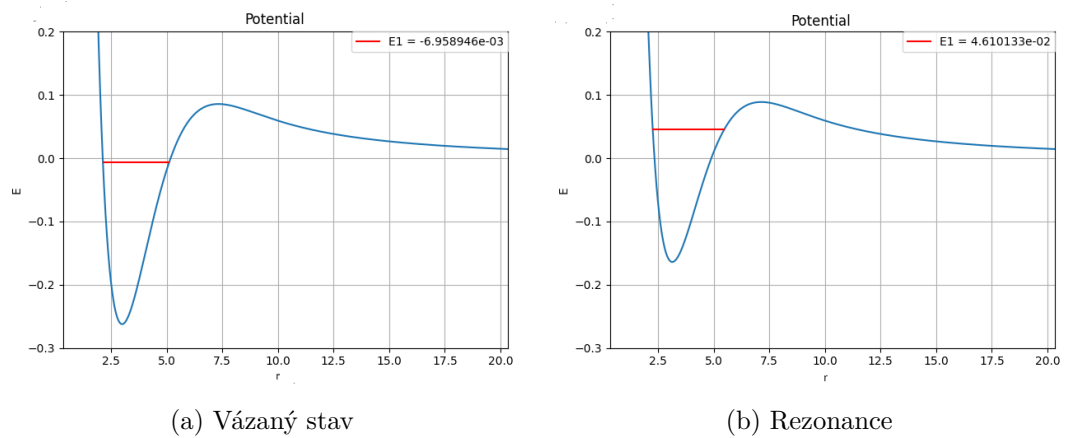
param1,param2,l,real,imag,type
-0.62,0.1,1,-2.602303e-03,4.363543e-14,bound
-0.615,0.1,1,-1.676799e-03,-1.761374e-13,bound
-0.61,0.1,1,-8.031058e-04,2.228361e-13,bound
-0.605,0.1,1,-4.963181e-06,2.356665e-13,bound
-0.6,0.1,1,7.018266e-04,-8.160362e-05,resonance
-0.595,0.1,1,1.400058e-03,-2.324209e-04,resonance
-0.59,0.1,1,2.089688e-03,-4.284718e-04,resonance
-0.585,0.1,1,2.770623e-03,-6.614002e-04,resonance
-0.58,0.1,1,3.442768e-03,-9.264317e-04,resonance
-0.575,0.1,1,4.106023e-03,-1.220379e-03,resonance
-0.57,0.1,1,4.760287e-03,-1.540928e-03,resonance
-0.565,0.1,1,5.405454e-03,-1.886305e-03,resonance
-0.56,0.1,1,6.041418e-03,-2.255098e-03,resonance

```

Výpis 3.5: Vázané stavy a rezonance



Obrázek 3.1: Graf komplexního spektra



Obrázek 3.2: Ukázka grafů potenciálu

Program podporuje doplňkovou možnost generování grafických výstupů ze souboru vázaných stavů a rezonancí ve formátu *csv* (stejný formát jako soubor

states.csv). Slouží k vizualizaci pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro daný potenciál, kdy hodnoty jsou agregované z více běhů. Typický příklad volání programu je *resoncalc input/data.csv -o output -g -t title*, kde parametr *t* doplní název do generovaných souborů. Ukázka je na obr. 4.7.

- pokrytí komplexní roviny: soubor *resonances_complex_title.png*
- rezonanční energie podle parametrů: soubor *resonances_energy_title.png*
- šířka rezonance podle parametrů: soubor *resonances_width_title.png*

4. Numerické simulace

4.1 Vlastnosti numerických metod

4.1.1 Referenční nastavení

Tato část se věnuje numerickým simulacím, které se zaměřují na vlastnosti numerických metod FEM, DVR a ECS z hlediska nalezení rezonancí. U metod se nastavují následující parametry.

- FEM - počet elementů sítě
- DVR - stupeň polynomů v kvadratuře
- ECS - úhel otočení a poloha bodu r_0

U každého parametru si ukážeme jeho vliv na výpočet rezonancí pro všechny uvažované modelové potenciály. Experimentálně bylo zvoleno referenční nastavení, u kterého jsou rezonance vypočteny s absolutní chybou řádu $10^{-11} - 10^{-10}$ s co nejmenším počtem elementů a stupněm kvadratury. Nastavení pro jednotlivé potenciály je uvedeno v tab. 4.1. Výpočty byly prováděny pro takové dva rozsahy parametrů potenciálů, abychom získali rezonance pro dva rozsahy energií: širší rozsah do 10^{-1} (atomových jednotek) a rozsah do 10^{-4} zaměřený na nízké energie. U každého rozsahu je uveden i počet nalezených rezonancí. Každý výpočet byl proveden pro 50 hodnot parametrů potenciálu, kdy se pro každou hodnotu detekuje rezonance nebo vázaný stav. Rozsahy rezonancí jsou uvedeny v tab. 4.2. Doplněk do 50 odpovídá počtu vázaných stavů, který již v tabulce uveden není. U komplexního škálování je nastaveno $r_0 = 0$, tedy přesně vzato jde o variantu CS nikoliv ECS. Nastavení parametrů metod FEM a DVR ovlivňují přesnost výpočtu stavů, u metody ECS mají parametry vliv nejen na přesnost ale i na počet nalezených stavů. Počet básových funkcí odpovídajících referenčnímu nastavení metod FEM a DVR je uveden v tab. 4.3. Počet je dán vzorcem $N(n-1) - 1$, kde N je počet elementů přes všechny 3 použité intervaly a n je stupeň kvadratury. U dílčích výsledků již není uváděn počet básových funkcí pouze parametry metod.

4.1.2 Stupeň kvadratury

Vliv stupně kvadratury byl studován z hlediska relativní chyby nalezené rezonance. Relativní chyba je určena jako podíl velikostí komplexních čísel: absolutní chyby stavu určeného pomocí dvou úhlů a velikosti stavu jako průměru obou hodnot. Ve výsledcích se uvažuje maximální relativní chyba ze všech stavů nalezených v uvažovaných rozsazích dle tab. 4.2. V simulacích se mění stupeň kvadratury a zbylá nastavení numerických metod odpovídají referenčním hodnotám dle tab. 4.1. Stupně kvadratury byly voleny v rozsahu [7,29] pro širší rozsah energií a v rozsahu [10,29] pro nízké energie. Výsledky jsou na obr. 4.1 a obr. 4.2.

Maximální relativní chyby u širšího rozsahu energií se dosahuje pro stavy s nejmenší rezonanční energií řádu $10^{-3} - 10^{-2}$ a při nastavení absolutní chyby řádu $10^{-11} - 10^{-10}$ se dostaneme v referenčním nastavení na maximální relativní

potenciál	absolutní chyba	FEM interval, elementy, dělení	DVR	ECS
gaussovský	10^{-11}	[0,9], 9, rovnoměrné [9,100], 15, progresivní [100,10 ⁴], 10, progresivní	n = 15	$r_0 = 0$ $\varphi = 40, 30$
exponenciální	10^{-11}	[0,5], 6, rovnoměrné [5,100], 15, progresivní [100,10 ⁴], 10, progresivní	n = 15	$r_0 = 0$ $\varphi = 40, 30$
Morseův	10^{-10}	[0,10], 20, rovnoměrné [10,150], 25, progresivní [150,10 ⁴], 6, progresivní	n = 15	$r_0 = 0$ $\varphi = 40, 30$
parabolický gaussovský	10^{-10}	[0,10], 3, rovnoměrné [10,150], 23, progresivní [150,10 ⁴], 10, progresivní	n = 15	$r_0 = 0$ $\varphi = 40, 30$
parabolický gaussovský 2	10^{-11}	[0,10], 10, rovnoměrné [10,150], 20, progresivní [150,10 ⁴], 8, progresivní	n = 15	$r_0 = 0$ $\varphi = 40, 30$

Tabulka 4.1: Referenční nastavení numerických metod

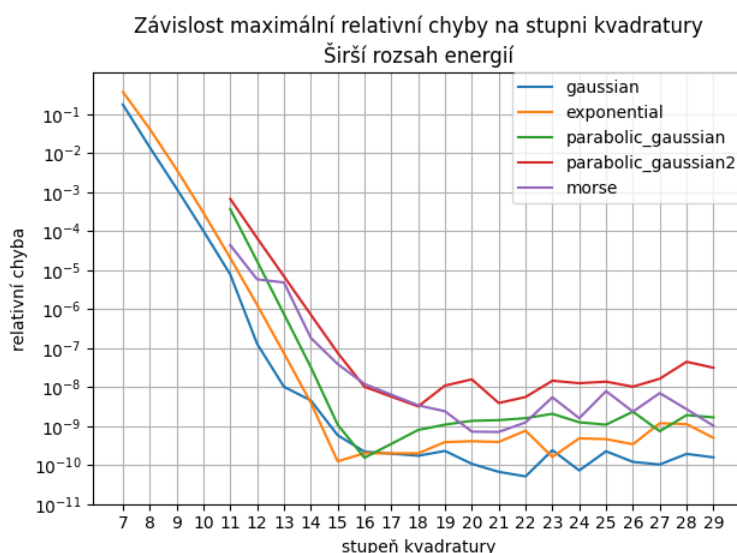
chybu řádu $10^{-10} - 10^{-7}$ v závislosti na potenciálu. Nižší chybu vykazují gaussovský a exponenciální potenciál, vyšší chybu vykazují Morseův a parabolický gaussovský potenciál. Pro nízký stupeň kvadratury je relativní chyba vysoká řádu 10^{-5} a více. Pro dosažení chyby řádu 10^{-6} a méně je nutné volit stupeň alespoň 12 pro gaussovský a exponenciální potenciál a stupeň alespoň 13-14 pro Morseův a parabolický gaussovský potenciál. Z výsledků je také patrné, že do určitého stupně chyba monotónně klesá a dále se již nesnižuje. Naopak pro některé stupně se chyba může i zvýšit až o 1 řád. Toto chování je nejspíše způsobeno kumulací zaokrouhlovacích chyb v aritmetice s konečnou přesností, kdy se zaokrouhlovací chyby šíří náhodně ve smyslu náhodné procházky. U rozsahu pro nízké rezonanční energie se maximální relativní chyby dosahuje pro stavy s energií řádu 10^{-6} , kdy dostaneme relativní chybu řádu $10^{-7} - 10^{-5}$. Pro dosažení chyby řádu 10^{-6} a méně

potenciál	rozsah energií	rozsah parametrů a, b	počet rezonancí
gaussovský	širší	[-6.5; -4.5], 1	37
	nízké	[-6.05; -6.048], 1	47
exponenciální	širší	[-29; -24], 2.85	46
	nízké	[-28.63; -28.62], 2.85	48
Morseův	širší	[3.35; 4.8], 3.55	43
	nízké	[4.5975; 4.6], 3.55	46
parabolický gaussovský	širší	[0.016; 0.034], 0.31	49
	nízké	[0.0156; 0.01562], 0.31	49
parabolický gaussovský 2	širší	[0.715; 0.93], 0.5	46
	nízké	[0.9307; 0.9309], 0.5	47

Tabulka 4.2: Rozsahy parametrů a počty stavů

potenciál	počet bazových funkcí
gaussovský	510
exponenciální	465
Morseův	765
parabolický gaussovský	540
parabolický gaussovský 2	570

Tabulka 4.3: Referenční počet bazových funkcí



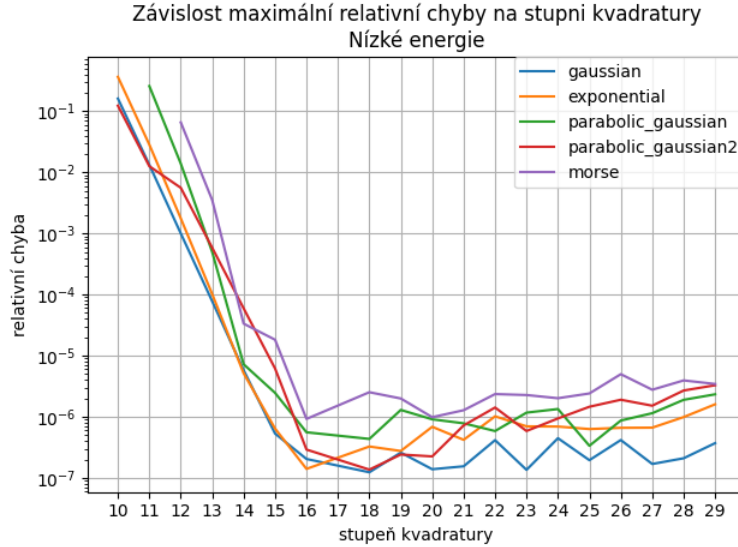
Obrázek 4.1: Závislost maximální relativní chyby stavu na stupni kvadratury pro širší rozsah rezonančních energií

je nutné volit stupeň alespoň 15-16 pro všechny potenciály. Pro vyšší stupně se již chyba nesnižuje.

4.1.3 Počet elementů sítě

Vliv počtu elementů sítě byl studován z hlediska relativní chyby (podíl velikostí komplexních čísel) nalezené rezonance. Ve výsledcích se uvažuje maximální relativní chyba ze všech stavů nalezených v uvažovaných rozsazích dle tab. 4.2. V simulacích se mění počet elementů sítě a zbylá nastavení numerických metod odpovídají referenčním hodnotám dle tab. 4.1. Výsledky pro širší rozsah energií jsou na obr. 4.3 a pro nízké energie na obr. 4.4.

Byly provedeny simulace pro počty elementů odpovídající referenční hodnotě, jejímu dvojnásobku a čtyřnásobku. Maximální relativní chyby u širšího rozsahu energií se dosahuje pro stavy s nejmenší rezonanční energií řádu $10^{-3} - 10^{-2}$ a při nastavení absolutní chyby řádu $10^{-11} - 10^{-10}$ se dostaneme v referenčním nastavení na maximální relativní chybu řádu $10^{-10} - 10^{-8}$ v závislosti na potenciálu. Nižší chybu vykazují gaussovský a exponenciální potenciál, vyšší chyby vykazují Morseův a parabolický gaussovský potenciál. Podle výsledků zvýšení počtu elementů nad referenční hodnoty nevede ke snížení relativní chyby. Naopak pro některé počty elementů se chyba může i zvýšit až o 1 řád. Toto chování je nejspíše



Obrázek 4.2: Závislost maximální relativní chyby stavu na stupni kvadratury pro nízké rezonanční energie

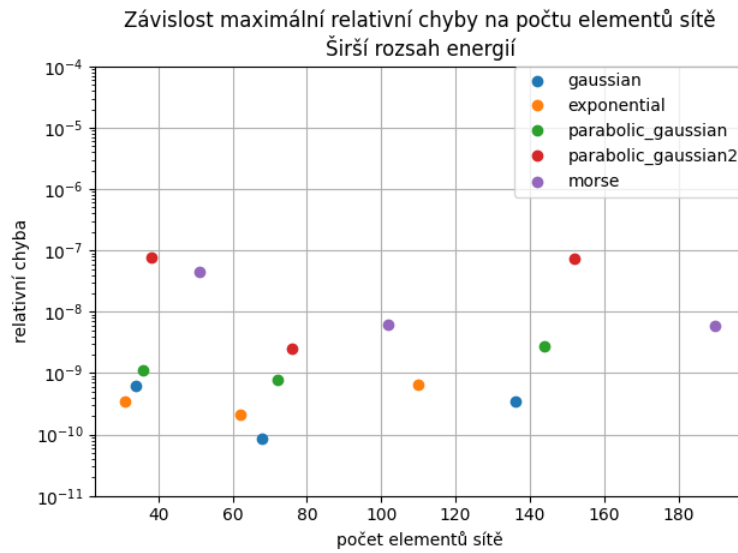
způsobeno kumulací zaokrouhlovacích chyb v aritmetice s konečnou přesností. Protože zvýšení počtu elementů chybu nesnižuje, je možné na druhou stranu snížit stupeň kvadratury při řádovém zachování referenční přesnosti tj. maximální relativní chyby řádu $10^{-10} - 10^{-8}$ podle zvoleného potenciálu. Při dvojnásobném, resp. čtyřnásobném počtu elementů je možné snížit stupeň kvadratury na 10–11, resp. 8. Byly také provedeny simulace pro poloviční počet elementů, kdy je naopak nutné zvýšit stupeň kvadratury na 20–24 pro zachování přesnosti. U rozsahu pro nízké rezonanční energie se maximální relativní chyby dosahuje pro stavy s energií řádu 10^{-6} , kdy dostaneme relativní chybu řádu $10^{-7} - 10^{-5}$. Výsledky jsou stejné jako pro širší rozsah energií. Referenční nastavení používá síť v intervalu $[0, 10^4]$, kdy gaussovský a exponenciální potenciál nabývají v bodě 10^4 hodnotu 10^{-8} , která je dominantně určena centrifugálním členem díky exponenciálnímu poklesu. Byly provedeny i simulace pro síť v intervalu $[0, 10^5]$, resp. $[0, 10^6]$, kdy potenciály v krajním bodě nabývají hodnoty 10^{-10} , resp. 10^{-12} . Prodloužení intervalu nevede ke snížení relativní chyby díky zaokrouhlovacím chybám. Výsledky pro tyto simulace nejsou příliš zajímavé a nejsou blíže prezentovány.

4.1.4 Externí komplexní škálování

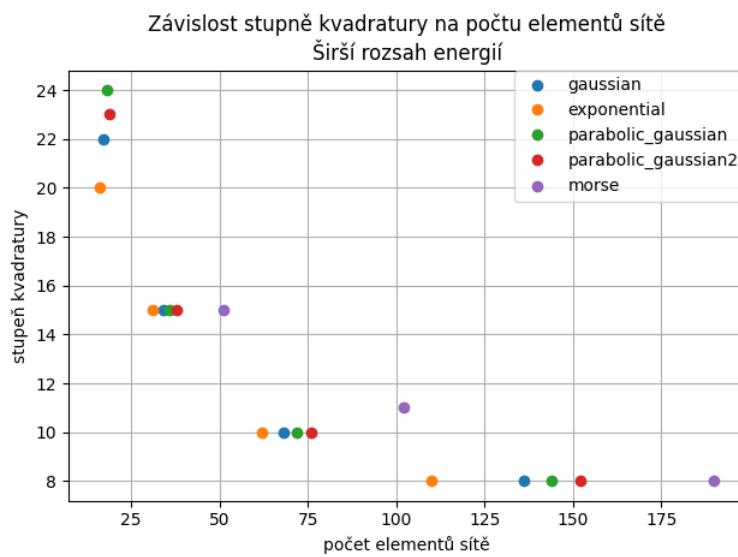
Vliv externího komplexního škálování byl studován z hlediska relativní chyby (podíl velikostí komplexních čísel) nalezené rezonance a také z hlediska počtu nalezených stavů. Ve výsledcích se uvažuje maximální relativní chyba ze všech stavů nalezených v širším rozsahu energií dle tab. 4.2. V simulacích se mění úhly nebo poloha bodu r_0 a zbylá nastavení numerických metod odpovídají referenčním hodnotám dle tab. 4.1. Úhly byly voleny s relativním rozdílem 10° a ve výsledcích je uveden vždy ten menší, např. pro úhly 40, 30 odpovídající referenci se uvádí hodnota 30. Úhly i poloha bodu r_0 byly voleny v takovém rozsahu, dokud se nalezla alespoň jedna nebo žádná rezonance. Výsledky pro vliv úhlů jsou na obr. 4.5 a pro bod r_0 na obr. 4.6.

Maximální relativní chyby u širšího rozsahu energií se dosahuje pro stavy s nejmenší rezonanční energií řádu $10^{-3} - 10^{-2}$ a při nastavení absolutní chyby řádu $10^{-11} - 10^{-10}$ se dostaneme v referenčním nastavení na maximální relativní chybu řádu $10^{-10} - 10^{-8}$ v závislosti na potenciálu. Nižší chybu vykazují gaussovský a exponenciální potenciál, vyšší chyby vykazují Morseův a parabolický gaussovský potenciál. Z výsledků pro úhly je patrné, že každý potenciál pro určité hodnoty vykazuje nejnižší relativní chybu a nalezne se stejný počet stavů jako v referenčním nastavení. Jde o úhly v intervalu $[25^\circ, 31^\circ]$. Pro jiné hodnoty úhlu mimo bod minima na obě strany chyba roste při zachování počtu nalezených stavů viz konstantní závislost na obr. 4.5 b), která vymezuje použitelný rozsah úhlů pro jednotlivé potenciály. Pro hodnoty mimo tyto rozsahy se již snižuje počet nalezených stavů. Pro snižující se úhly se nedetekují stavy s větší šířkou rezonance. Toto chování je očekávané. Podle obr. 2.5 se musí rezonance nacházet ve čtvrtém kvadrantu komplexní roviny nad polopřímkou stavů kontinua, aby ho metoda ECS našla. Natočení polopřímky se řídí volbou úhlu a pro nízké hodnoty se přestanou detekovat stavy s větší šířkou. Analogické chování nastává pro zvětšující se úhly, kdy se naopak přestanou detekovat stavy s nižší energií. Teoretický maximální použitelný úhel pro gaussovský, resp. exponenciální potenciál je 45° , resp. 90° a odpovídá výsledkům simulací (k hodnotám v grafu se přičte 10, protože limitující je nastavení vyššího úhlu). Dle výsledků pokrytí komplexní roviny rezonancemi v sekci 4.2 jsou trajektorie pro gaussovský, exponenciální, Morseův a parabolický gaussovský 2 potenciál monotónně klesající a platí pro ně zjištění, že se postupně přestávají detekovat stavy s větší šířkou. Pro parabolický gaussovský potenciál nejsou trajektorie monotónně klesající a naopak se přestávají detekovat stavy s nižší energií. Byly provedeny i simulace pro měnící se relativní rozdíl úhlů v intervalu $[1^\circ, 10^\circ]$. Rozdíl úhlů nevede ke snížení relativní chyby díky zaokrouhlovacím chybám. Výsledky pro tyto simulace nejsou příliš zajímavé a nejsou blíže prezentovány.

Z výsledků pro polohu bodu r_0 je patrné, že každý potenciál pro určité hodnoty vykazuje nejnižší relativní chybu a nalezne se stejný počet stavů jako v referenčním nastavení. Pro gaussovský, exponenciální a Morseův potenciál se ukazuje vhodné nastavení $r_0 = 0$ tedy CS varianta komplexního škálování. Pro parabolický gaussovský potenciál se ukazuje vhodné nastavení $r_0 = 10$ tedy externí komplexní škálování ECS. Pro zvyšující se hodnotu r_0 chyba roste při zachování počtu nalezených stavů viz konstantní závislost na obr. 4.6 b), která vymezuje použitelný rozsah hodnot pro jednotlivé potenciály. Pro vyšší hodnoty se již snižuje počet nalezených stavů, kdy se nedetekují stavy odpovídající větším šířkám rezonance. Stejně jako u závislosti na úhlu toto platí pro gaussovský, exponenciální, Morseův a parabolický gaussovský 2 potenciál díky monotónně klesajícím trajektoriím. U parabolického gaussovského potenciálu se přestávají detekovat stavy s nižší energií.



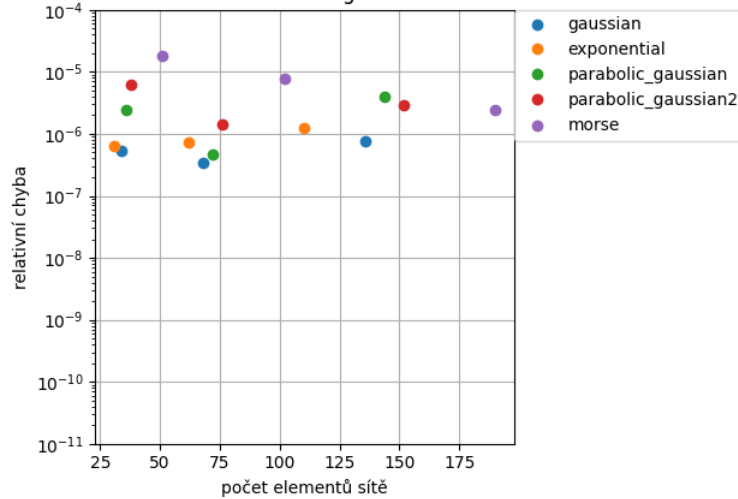
(a) Relativní chyba



(b) Stupeň kvadratury

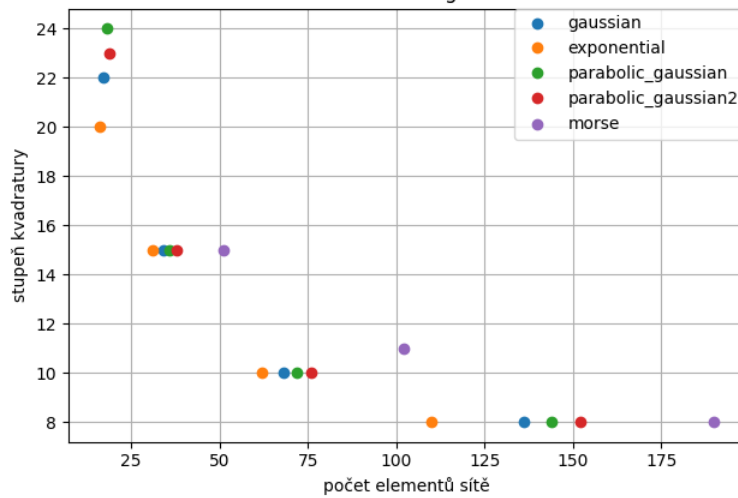
Obrázek 4.3: a) Závislost maximální relativní chyby stavu na počtu elementů sítě, b) Závislost stupně kvadratury na počtu elementů sítě při řádovém zachování referenční přesnosti pro širší rozsah rezonančních energií

Závislost maximální relativní chyby na počtu elementů sítě
Nízké energie



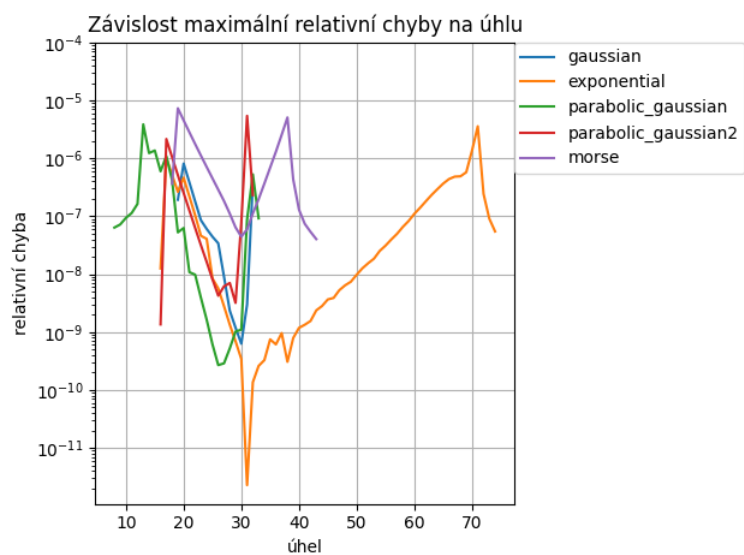
(a) Relativní chyba

Závislost stupně kvadratury na počtu elementů sítě
Nízké energie

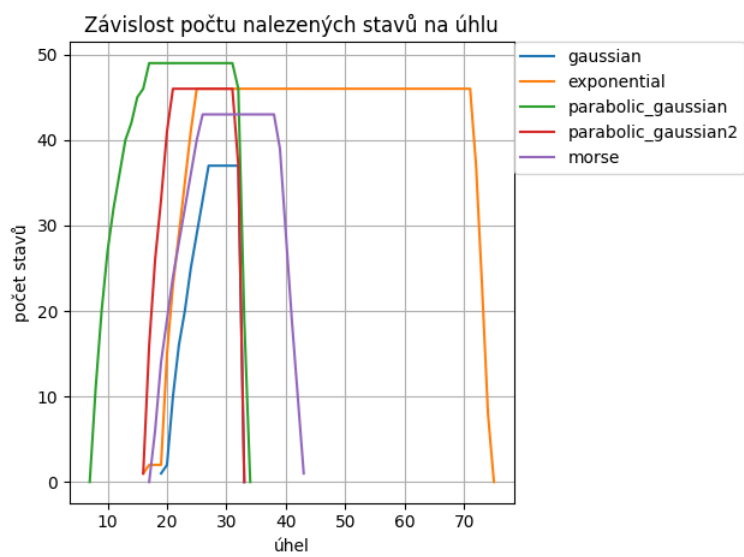


(b) Stupeň kvadratury

Obrázek 4.4: a) Závislost maximální relativní chyby stavu na počtu elementů sítě, b) Závislost stupně kvadratury na počtu elementů sítě při řádovém zachování referenční přesnosti pro širší rozsah rezonančních energií pro nízké rezonanční energie

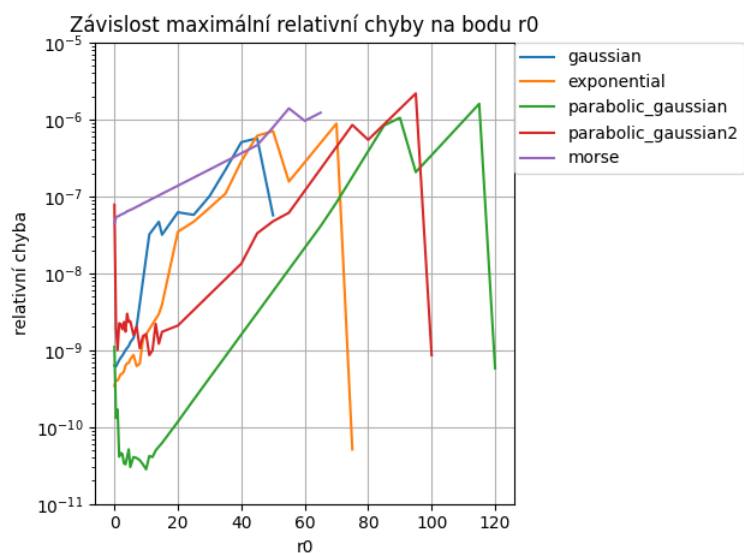


(a) Relativní chyba

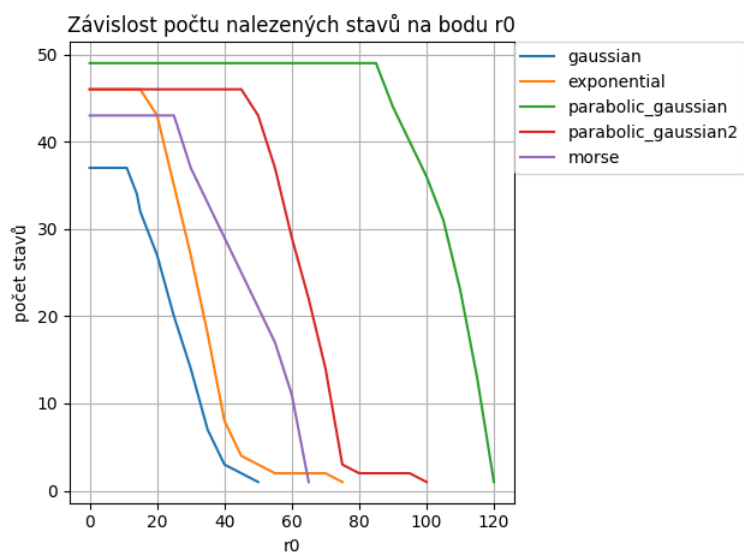


(b) Počet stavů

Obrázek 4.5: a) Závislost maximální relativní chyby stavu b) Závislost počtu nalezených stavů na úhlu



(a) Relativní chyba



(b) Počet stavů

Obrázek 4.6: a) Závislost maximální relativní chyby stavu b) Závislost počtu nalezených stavů na poloze bodu r_0

4.2 Pokrytí komplexní roviny rezonancemi

4.2.1 Metodika simulací

Hlavním cílem práce je výpočet rezonancí pro modelové jednorozměrné potenciály. Všechny uvažované potenciály obsahují parametry, které ovlivňují polohu rezonancí v komplexní rovině, konkrétně čtvrtého kvadrantu, kde jsou rezonance lokalizovány. Změnou dvou parametrů lze určit oblast tohoto kvadrantu, která je pro dané potenciály dosažitelná. Podobný výpočet pokrytí nebyl v dostupné odborné literatuře prováděn, alespoň pokud je autorovi známo.

V této části si uvedeme společný postup použitý u všech potenciálů. Samostatné sekce prezentují výsledky pro konkrétní potenciál. Bližší detaily výpočtu jsou popsány v části 3.2. Pokrytí je prezentováno pomocí trajektorií vlastních čísel, kdy vždy jeden parametr potenciálu se drží fixní (označení b) a druhý parametr se mění v daném intervalu (označení a). Označení parametrů odpovídá definicím potenciálů v 3.2, parametr b se vyskytuje v exponentu (ovlivňuje především šířku potenciálové jámy a nepřímo výšku a šířku bariéry) a parametr a před exponenciálou (ovlivňuje hloubku jámy a výšku bariéry). Hodnota orbitálního momentu hybnosti l , který se vyskytuje v centrifugálním členu společném pro všechny potenciály, se vždy volí fixní. Jeden takový výpočet určuje trajektorii rezonancí v komplexní rovině. Podrobněji bylo spočteno pokrytí pro hodnotu $l = 1$ a fyzikálně zajímavé rezonanční energie do $0.2 - 0.5$ atomových jednotek. Rovněž jsou uvedeny závislosti rezonanční energie a šířky na parametrech potenciálu. Hrubě bylo spočteno pokrytí pro hodnotu $l = 1$ a další hodnoty parametrů s cílem nalézt oblasti rezonancí dosažitelné pro daný potenciál. Dále bylo spočteno hrubé pokrytí i pro vyšší hodnoty momentu hybnosti $l = 2, 3$.

Výsledky jsou prezentovány pomocí grafů, vlastní numerická data ve formátu csv jsou přiložena k elektronické verzi práce, odkazy jsou v tabulkách výsledků. Tabulky mají ve všech případech stejnou strukturu. Pro konkrétní hodnotu orbitálního momentu hybnosti l je uveden rozsah energie v atomových jednotkách a rozsahy parametrů potenciálu a, b agregovaných ze všech výpočtů. Trajektorie rezonancí jsou na grafu pokrytí komplexní roviny znázorněny křivkou interpolující spočtená data. V grafech závislosti rezonanční energie a šířky na parametrech a, b jsou trajektorie znázorněny pomocí vodorovných barevných pruhů (vždy pro fixní b), kde barva udává hodnotu energie či šířky rezonance. Numerická data trajektorií jsou k dispozici v přiložených souborech včetně příkladů nastavení výpočtů. Výpočet širokých rezonancí (rezonance s větší imaginární částí) je ovlivněn zvolenými úhly v metodě. Byl použitý úhly $\varphi = 40,30$ a zobrazené oblasti rezonancí nemusí být kompletní pro velké šířky rezonancí.








4.2.2 Gaussovský potenciál

Gaussovský potenciál (označení *gaussian*) je definovaný jako

$$V(r) = ae^{-br^2}, \quad (4.1)$$

kde $a < 0$, resp. $b > 0$ ovlivňuje hloubku potenciálové jámy, resp. její šířku. Při výpočtech jsou všechny potenciály doplněny o společný centrifugální člen $\frac{l(l+1)}{2r^2}$.

Výsledky výpočtů jsou v tab. 4.4, kde jsou také odkazy na obrázky a data. Jemnější pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro moment hybnosti $l = 1$ je na

l	energie	rozsah a	rozsah b	pokrytí	obr	data	settings
1	[0; 0.5]	[-18; -0.04]	[0.01; 3]	jemnější	4.7		
1	[0; 16]	[-600; -0.04]	[0.01; 100]	hrubé	4.8		
2	[0; 0.3]	[-7.3; -1.05]	[0.1; 0.55]	hrubé	4.8		
3	[0; 0.35]	[-6.4; -1.8]	[0.1; 0.275]	hrubé	4.8		

Tabulka 4.4: Výsledky pro gaussovský potenciál

obr. 4.7 a). Rezonance jsou lokalizovány nad osou čtvrtého kvadrantu. Jednotlivé trajektorie pro fixní hodnotu parametru b mají klesající konkávní průběh, který je očekávaný dle obr. 1.5. Z výsledků je patrné, že není pokryta část kvadrantu odpovídající vlastním číslům s malou imaginární částí, která reprezentuje šířku. Podle obr. 4.7 c) je pro dosažení vyšších rezonančních energií nutné nastavit větší hloubku potenciálové jámy pomocí parametru a . Následně je možné nastavit větší rozsah výšky potenciálové bariéry pomocí parametru b . Hrubé pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro více hodnot momentu hybnosti je na obr. 4.8. Pro hodnotu $l = 1$ jsou zobrazeny trajektorie, kde se dosahuje vysokých rezonančních energií (fyzikálně nepříliš zajímavých). Charakter průběhu se neliší od nižších energií. Pro hodnoty $l = 2, 3$ jsou zobrazeny trajektorie pro rozsah fyzikálně zajímavých rezonancí a mají opět klesající konkávní průběh. Pro vyšší hodnoty momentu hybnosti se trajektorie posouvají do oblasti s menší imaginární částí. Lze očekávat, že tento trend by pokračoval dále i u hodnot, pro které již nebyly provedeny simulace. Pro vyšší hodnoty se zvětšuje šířka bariéry a v důsledku má rezonance se stejnou energií menší šířku.

Gaussovský potenciál lze použít při modelování rozptylu elektronu na molekulách. Na obr. 4.7 b) a obr. 4.8 c) je zobrazeno několik rezonancí pro rozptyl elektronu na vybraných dvouatomových molekulách N_2 , O_2 , NO a CO jako ukázka typických parametrů rezonancí v reálných systémech (spolu s trajektoriemi pro gaussovský potenciál pro zvýraznění lokalizace rezonancí). Data pro molekuly N_2 a NO byla převzata z [4]. Rozptyl elektronu na molekule v aproximaci pevných jader (pro každou fixní vzdálenost jader R) lze modelovat pomocí jednorozměrného interakčního potenciálu, konkrétně jde o gaussovský potenciál ve tvaru

$$V_{int}(r, R) = -\lambda(R)e^{-\alpha_C r^2}, \quad (4.2)$$

kde R je vzdálenost atomů molekuly a r je radiální souřadnice pro elektron. Faktor $\lambda(R)$ je definován vztahem

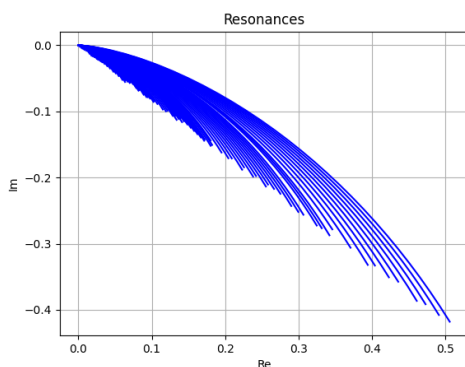
$$\lambda(R) = \lambda_\infty + (\lambda_C - \lambda_\infty) \frac{1 + e^{\lambda_1(R_C - R_\lambda)}}{1 + e^{\lambda_1(R - R_\lambda)}}. \quad (4.3)$$

Parametry modelu jsou převzaté z [4] a jsou uvedeny v tab. 4.5. Faktory $-\lambda(R)$, resp. α_C odpovídají parametrům a , resp. b v definici potenciálu 4.1. Parametr α_C byl zvolen fixní a data rezonancí by mělo být možné proložit jedinou trajektorií vlastních čísel stejným způsobem jako v simulacích pokrytí komplexní roviny rezonancemi. Z obrázků je patrné, že rezonance pro molekuly NO , N_2 , O_2 lze dobře modelovat gaussovským potenciálem (pro molekulu O_2 nebyl k dispozici model). Naopak rezonance pro molekulu CO jsou lokalizovány v oblasti pokryté gaussovským potenciálem, ale nelze je modelovat pomocí potenciálu s konstantním

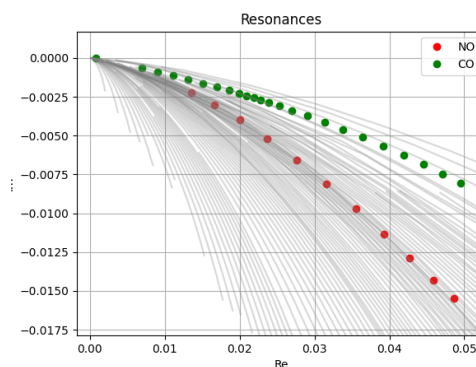
parametrem b v exponentu. Model by vyžadoval, aby i tento parametr byl funkcí vzdálenosti atomů R .

molekula	l	α_C	λ_∞	λ_C	λ_1	R_C	R_λ
N ₂	2	0.4	6.21066	5.38022	1.05708	2.405	-27.9833
NO	1	1.0	6.367	6.05	5.0	2.285	2.0843

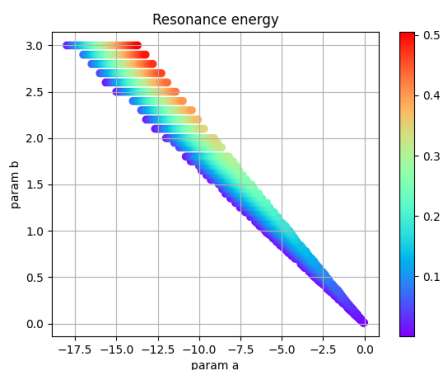
Tabulka 4.5: Parametry interakčního potenciálu modelu popsaného v [4]



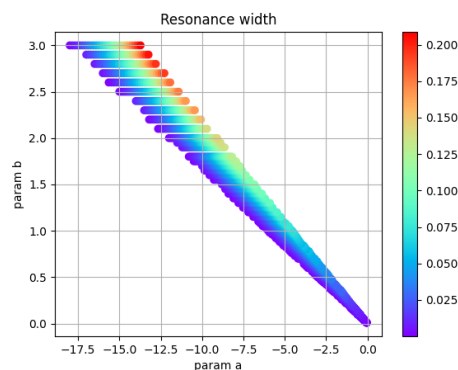
(a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi



(b) Rezonance pro molekuly NO, CO

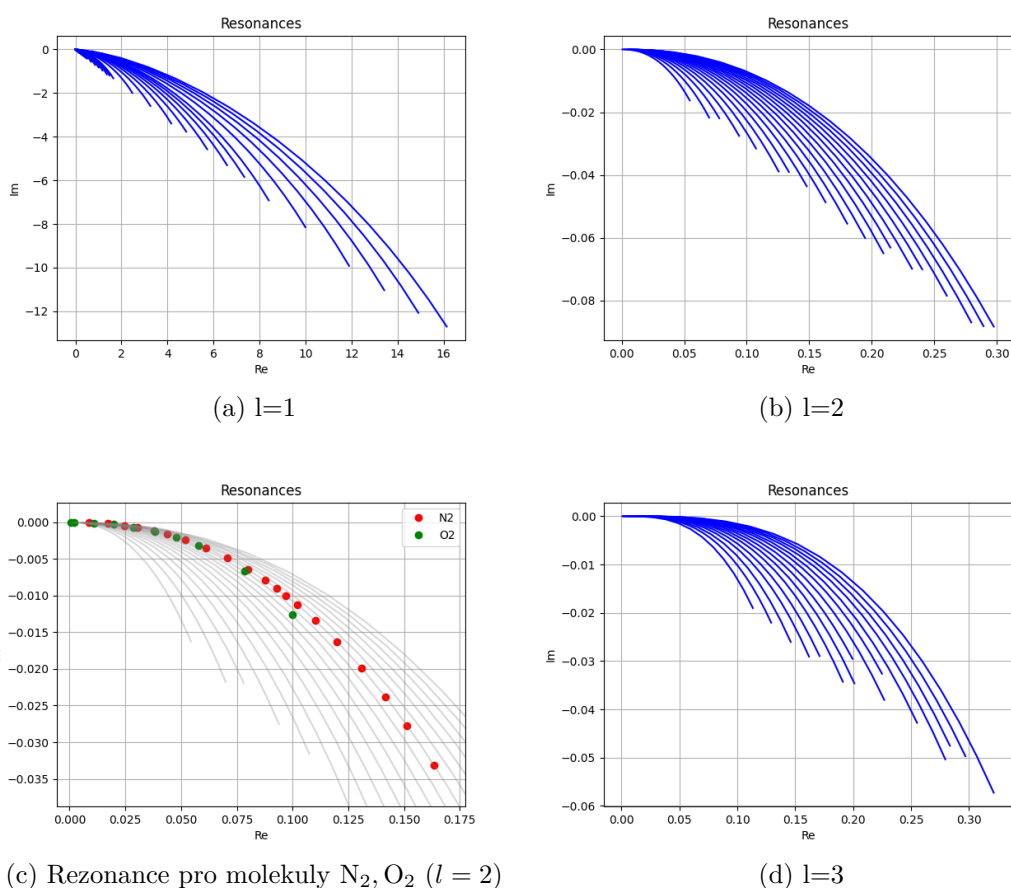


(c) Rezonanční energie



(d) Šířka rezonance

Obrázek 4.7: a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi, b) Rezonance pro molekulu NO, c) Závislost rezonanční energie, d) Závislost šířky rezonance na parametrech pro gaussovský potenciál a $l = 1$



Obrázek 4.8: Pokrytí komplexní roviny rezonancemi v závislosti na momentu hybnosti pro gaussovský potenciál

4.2.3 Exponenciální potenciál

Exponenciální potenciál (označení *exponential*) je definován jako

$$V(r) = ae^{-br}, \quad (4.4)$$

kde $a < 0$, resp. $b > 0$ ovlivňuje hloubku potenciálové jámy, resp. její šířku.

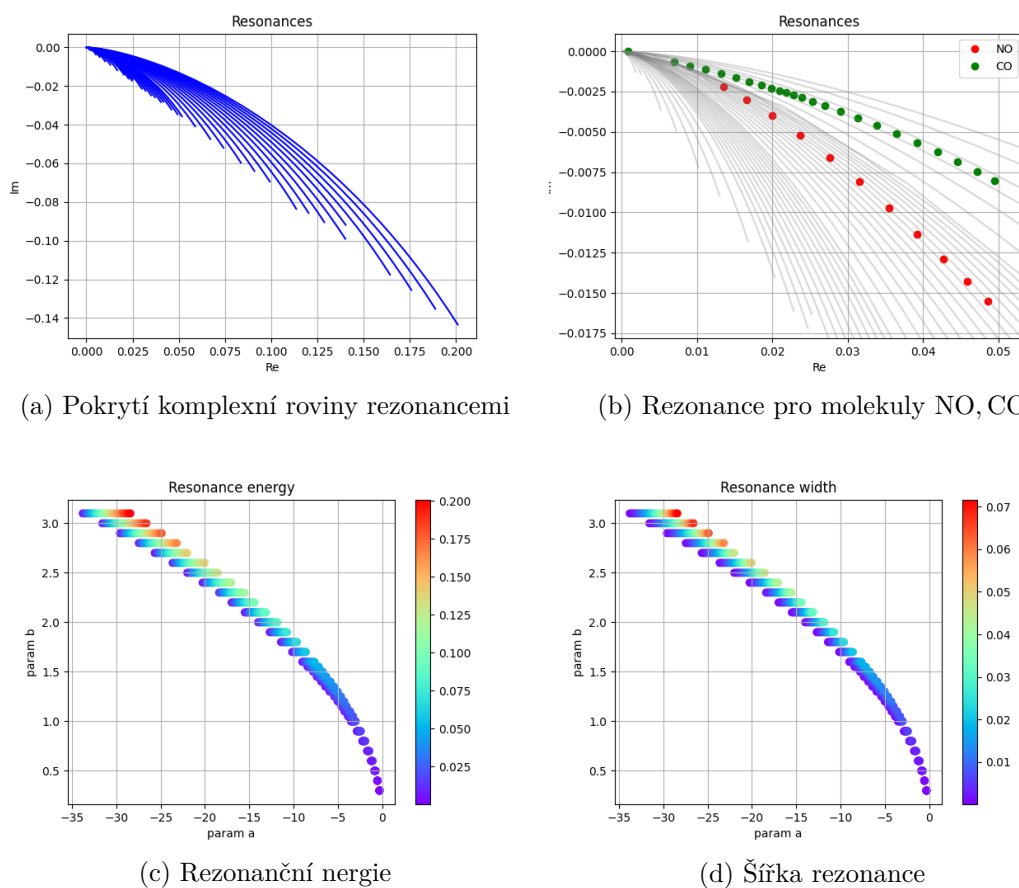
l	energie	rozsah a	rozsah b	pokrytí	obr	data	settings
1	[0; 0.2]	[-33.8; -0.26]	[0.3; 3.1]	jemnější	4.9		
1	[0; 17.6]	[-3116; -0.26]	[0.3; 30]	hrubé	4.10		
2	[0; 0.35]	[-37; -0.63]	[0.3; 2.13]	hrubé	4.10		
3	[0; 0.31]	[-61.5; -7.5]	[0.6; 1.63]	hrubé	4.10		

Tabulka 4.6: Výsledky pro exponenciální potenciál

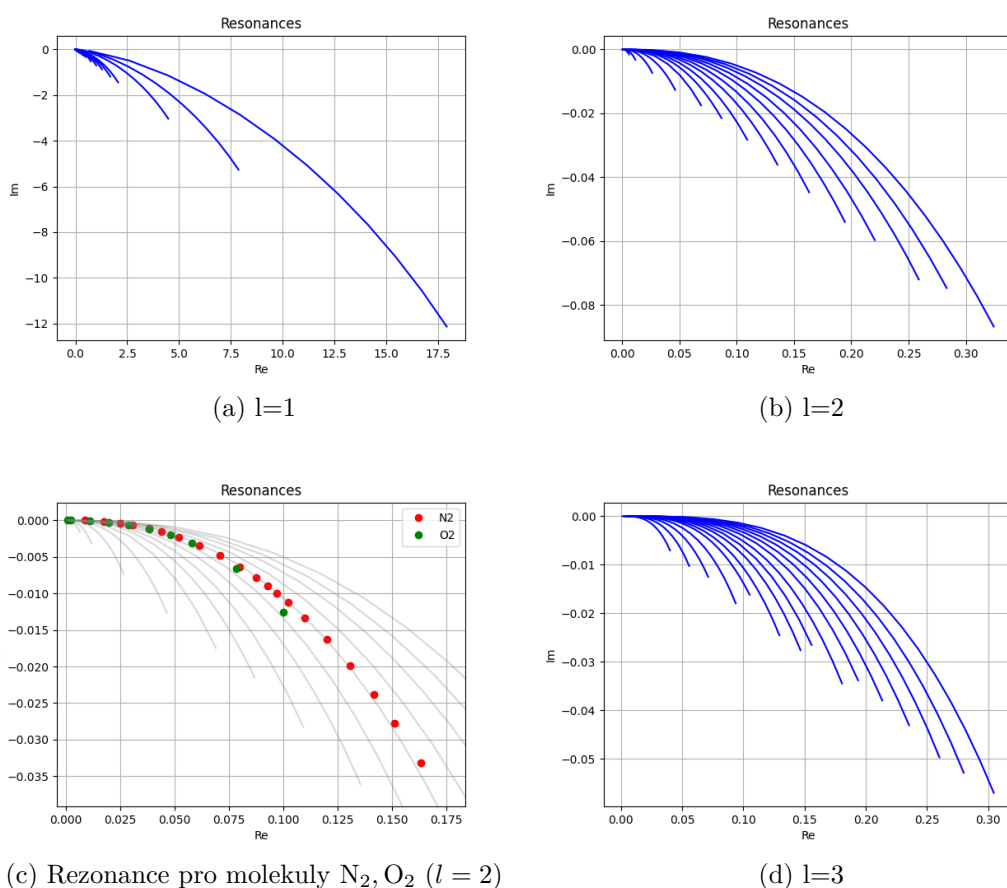
Výsledky výpočtů jsou v tab. 4.6, kde jsou také odkazy na obrázky a data. Výsledky mají podobný charakter jako u gaussovského potenciálu. Jemnější pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro moment hybnosti $l = 1$ je na obr. 4.9 a).

Hrubé pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro více hodnot momentu hybnosti je na obr. 4.10. V porovnání s gaussovským potenciálem se vyšších rezonančních energií dosahuje pro větší hloubku potenciálové jámy (ovlivňuje parametr a). U exponenciálního potenciálu má parametr a hodnoty do -34 dle obr. 4.9 c), zatímco u gaussovského má hodnoty do -18 dle obr. 4.7 c).

Na obr. 4.9 b) a 4.10 c) je zobrazeno několik rezonancí pro rozptyl elektronu na vybraných dvouatomových molekulách N_2 , O_2 , NO a CO (spolu s trajektoriemi pro exponenciální potenciál) převzatých z [4], kde interakce elektronu s molekulou je modelována pomocí gaussovského potenciálu. Podle obrázků by bylo možné v modelu pro molekuly N_2 , O_2 použít i exponenciální potenciál. Naopak rezonance pro molekuly NO , CO jsou lokalizovány v oblasti pokryté exponenciálním potenciálem, ale nelze je modelovat pomocí potenciálu s konstantním parametrem b v exponentu.



Obrázek 4.9: a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi, b) Závislost rezonanční energie, c) Závislost šířky rezonance na parametrech pro exponenciální potenciál a $l = 1$



Obrázek 4.10: Pokrytí komplexní roviny rezonancemi v závislosti na momentu hybnosti pro exponenciální potenciál

4.2.4 Morseův potenciál

Morseův potenciál (označení *morse*) je definovaný jako

$$V(r) = a(1 - e^{-b(r-c)})^2 - a, \quad (4.5)$$

kde $a > 0$, resp. $b > 0$ ovlivňuje hloubku potenciálové jámy, resp. její šířku a $c = 0.7416$ se drží fixní.

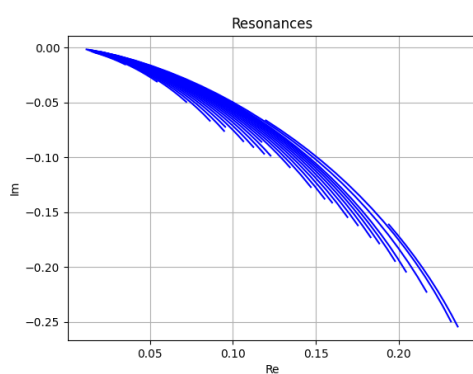
l	energie	rozsah a	rozsah b	pokrytí	obr	data	settings
1	[0; 0.23]	[2.2; 4.7]	[2.1; 4.5]	jemnější	4.11		
1	[0; 0.37]	[2.2; 19.8]	[2; 10]	hrubé	4.12		
2	[0; 0.3]	[0.67; 6.05]	[0.5; 2.3]	hrubé	4.12		
3	[0; 0.31]	[2.05; 6.8]	[0.7; 1.5]	hrubé	4.12		

Tabulka 4.7: Výsledky pro Morseův potenciál

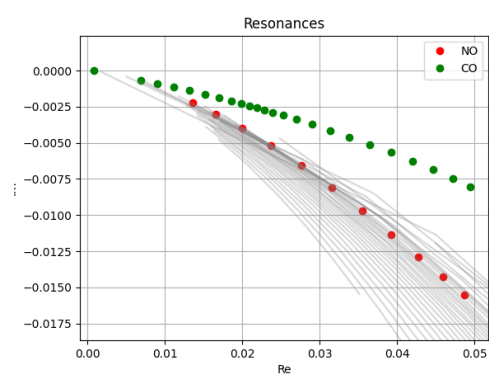
Výsledky výpočtů jsou v tab. 4.7, kde jsou také odkazy na obrázky a data. Výsledky mají podobný charakter jako u gaussovského potenciálu. Jemnější pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro moment hybnosti $l = 1$ je na obr. 4.11

a). Oproti gaussovskému potenciálu je pokrytá oblast užší. Stejně tak je užší rozsah hodnot parametru a pro dosažení daného pokrytí. Vizuálně odlišná závislost oproti gaussovskému potenciálu (opačné pořadí barev v pruzích pro konstantní hodnotu parametru b) je způsobena kladnými hodnotami parametru a , u gaussovského jsou hodnoty záporné. V obou případech se ale dosahuje vyšší rezonanční energie pro nižší hodnoty a v absolutní hodnotě. V porovnání s gaussovským potenciálem se vyšších rezonančních energií dosahuje pro menší hloubku potenciálové jámy (ovlivňuje parametr a). U Morseova potenciálu má parametr a hodnoty do 5.5 dle obr. 4.11 c), zatímco u gaussovského má hodnoty do -18 dle obr. 4.7 c). Hrubé pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro více hodnot momentu hybnosti je na obr. 4.12.

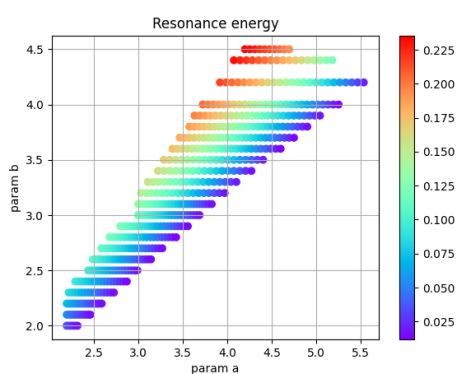
Na obr. 4.11 b) a 4.12 c) je zobrazeno několik rezonancí pro rozptyl elektronu na vybraných dvouatomových molekulách N_2 , O_2 , NO a CO (spolu s trajektoriemi pro Morseův potenciál) převzatých z [4], kde interakce elektronu s molekulou je modelována pomocí gaussovského potenciálu. Data rezonancí byla proložena trajektorií vlastních čísel. Podle obrázků by bylo možné v modelu pro molekuly N_2 , O_2 použít i Morseův potenciál. Naopak rezonance pro molekulu NO jsou lokalizovány v oblasti pokryté Morseovým potenciálem, ale nelze je modelovat pomocí potenciálu s konstantním parametrem b v exponentu. Rezonance pro molekulu CO se nachází mimo pokrytou oblast.



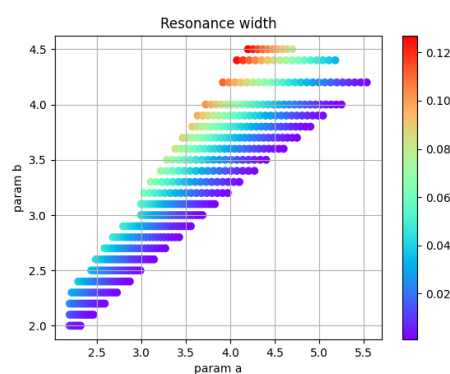
(a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi



(b) Rezonance pro molekuly NO, CO

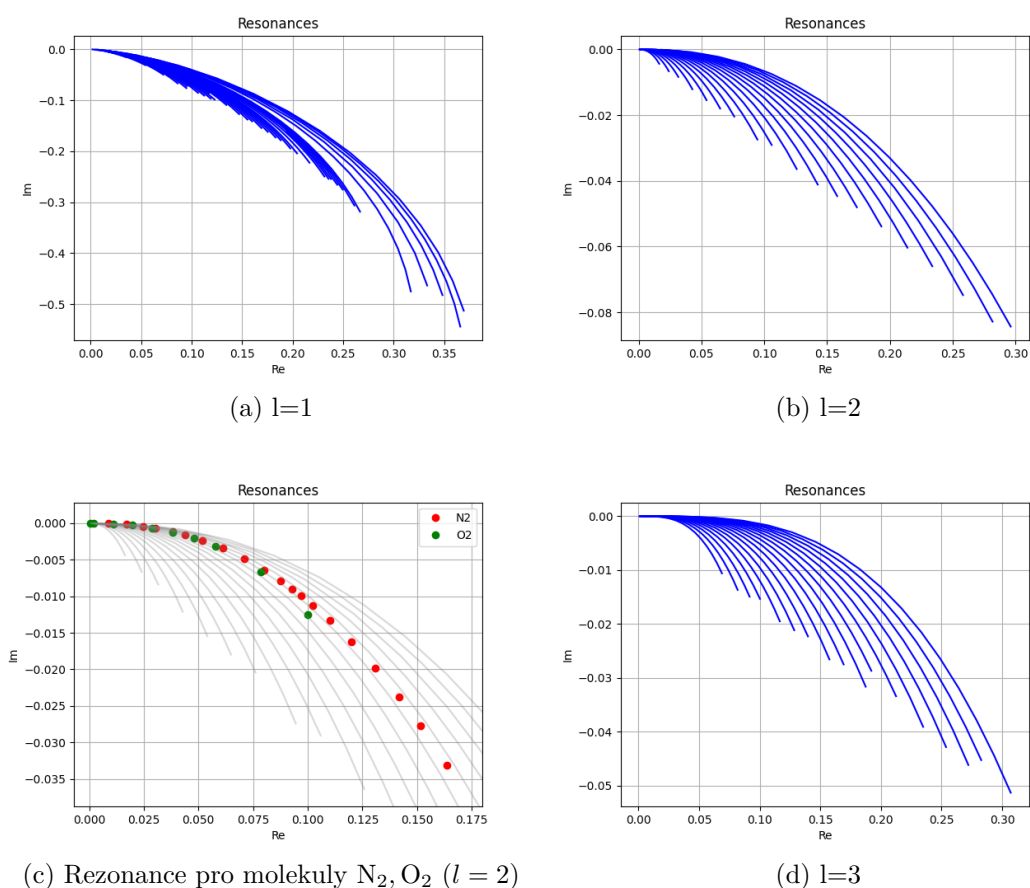


(c) Rezonanční energie



(d) Šířka rezonance

Obrázek 4.11: a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi, b) Závislost rezonanční energie, c) Závislost šířky rezonance na parametrech pro Morseův potenciál a $l = 1$



Obrázek 4.12: Pokrytí komplexní roviny rezonancemi v závislosti na momentu hybnosti pro Morseův potenciál

4.2.5 Parabolický gaussovský potenciál

Parabolický gaussovský potenciál je definovaný ve dvou variantách jako

$$V(r) = (ar^2 - c)e^{-br^2}, \quad (4.6)$$

kde $c = 1.0$ se drží fixní (označení *parabolic_gaussian*) a

$$V(r) = a(r^2 - c)e^{-br^2}, \quad (4.7)$$

kde $c = 5.0$ se drží fixní (označení *parabolic_gaussian2*).






l	energie	rozsah a	rozsah b	pokrytí	obr	data	settings
1	[0; 0.036]	[0.012; 0.036]	[0.03; 0.04]	jemnější	4.13		
1	[0; 0.48]	[2.2; 19.8]	[0.012; 0.06]	hrubé	4.14		
2	[0; 0.245]	[0.67; 6.05]	[0; 0.06]	hrubé	4.14		

Tabulka 4.8: Výsledky pro parabolický gaussovský potenciál

Výsledky výpočtů pro parabolický gaussovský potenciál jsou v tab. 4.8, kde jsou také odkazy na obrázky a data. Oproti gaussovskému potenciálu mají výsledky odlišný charakter. Jemnější pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro

moment hybnosti $l = 1$ je na obr. 4.13 a). Rezonance jsou lokalizovány nad osou čtvrtého kvadrantu. Jednotlivé trajektorie pro fixní hodnotu parametru b mají konkávní průběh jen pro velmi malé rezonance, poté se průběh mění na konvexní. Díky tomu je pokryta i část kvadrantu odpovídající vlastním číslům s malou imaginární částí, která reprezentuje šířku. Se zvětšující se hodnotou rezonanční energie se postupně zmenšuje její šířka, tento jev je dobře vidět na obr. 4.14 a) a nebyl pozorován u gaussovského potenciálu, kde trajektorie mají konkávní průběh. Oproti předchozím potenciálům jsou rozsahy parametrů a, b pro dosažení daného pokrytí výrazně užší. Stejně jako u Morseova potenciálu je pořadí barev v pruzích pro konstantní hodnotu parametru b dáno kladnými hodnotami parametru a . Hrubé pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro více hodnot momentu hybnosti je na obr. 4.14. Pro všechny hodnoty l jsou zobrazeny trajektorie pro rozsah fyzikálně zajímavých rezonancí.

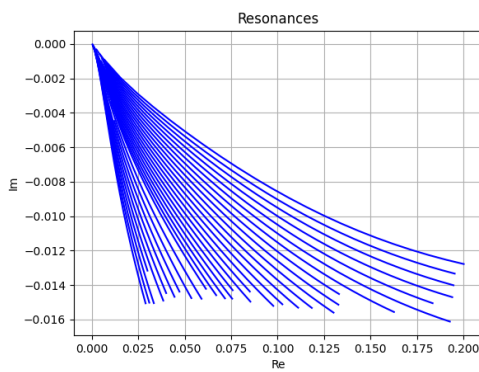
Na obr. 4.13 b) a 4.14 c) je zobrazeno několik rezonancí pro rozptyl elektronu na vybraných dvouatomových molekulách N_2 , O_2 , NO a CO (spolu s trajektoriemi pro parabolický gaussovský potenciál) převzatých z [4], kde interakce elektronu s molekulou je modelována pomocí gaussovského potenciálu. Rezonance pro molekuly NO , CO jsou lokalizovány v pokryté oblasti, ale nelze je modelovat pomocí potenciálu s konstantním parametrem b v exponentu. Rezonance pro molekuly N_2 , O_2 se nachází mimo pokrytou oblast.

l	energie	rozsah a	rozsah b	pokrytí	obr	data	settings
1	[0; 0.295]	[0.436; 1.12]	[0.25; 0.7]	jemnější	4.15		
1	[0; 0.469]	[0.1; 0.7]	[0.1; 0.7]	hrubé	4.16		
2	[0; 0.76]	[0.8; 2.36]	[0.2; 0.65]	hrubé	4.16		

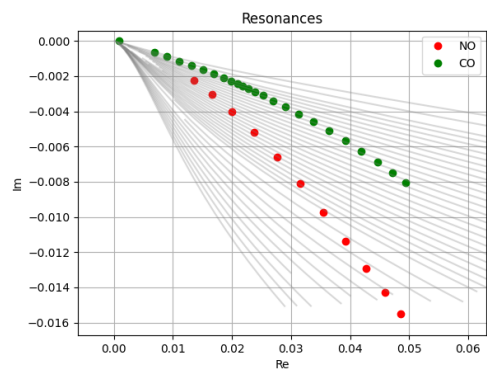
Tabulka 4.9: Výsledky pro parabolický gaussovský potenciál 2

Výsledky výpočtů pro parabolický gaussovský potenciál 2 jsou v tab. 4.9, kde jsou také odkazy na obrázky a data. Díky jiné definici oproti předchozímu potenciálu mají trajektorie vlastních čísel charakter podobný gaussovskému potenciálu. Jemnější pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro moment hybnosti $l = 1$ je na obr. 4.15 a). Rezonance jsou lokalizovány nad osou čtvrtého kvadrantu. Jednotlivé trajektorie pro fixní hodnotu parametru b mají očekávaný klesající konkávní průběh. Část kvadrantu odpovídající vlastním číslům s malou imaginární částí, která reprezentuje šířku, je u tohoto potenciálu pokryta narozdíl od gaussovského, je to dobře vidět na obr. 4.16 a). Rozsahy parametrů a, b pro dosažení pokrytí jsou úzké podobně jako u první varianty gaussovského parabolického potenciálu. Hrubé pokrytí komplexní roviny rezonancemi pro více hodnot momentu hybnosti je na obr. 4.16. Pro všechny hodnoty l jsou zobrazeny trajektorie pro rozsah fyzikálně zajímavých rezonancí a mají opět klesající konkávní průběh.

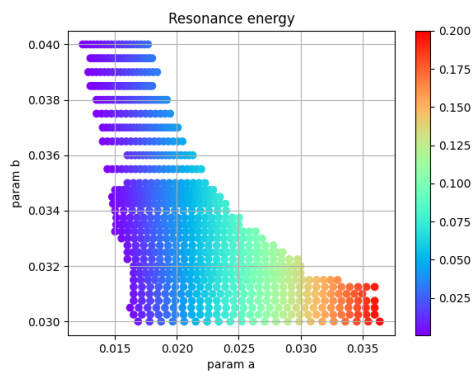
Na obr. 4.15 b) a 4.16 c) je zobrazeno několik rezonancí pro rozptyl elektronu na vybraných dvouatomových molekulách N_2 , O_2 , NO a CO (spolu s trajektoriemi pro parabolický gaussovský potenciál 2) převzatých z [4], kde interakce elektronu s molekulou je modelována pomocí gaussovského potenciálu. Rezonance pro molekuly NO , CO jsou lokalizovány v pokryté oblasti, ale nelze je modelovat pomocí potenciálu s konstantním členem b v exponentu. Rezonance pro molekuly N_2 , O_2 se nachází mimo pokrytou oblast.



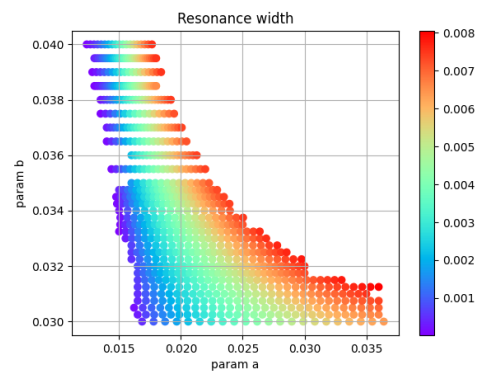
(a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi



(b) Rezonance pro molekuly NO, CO

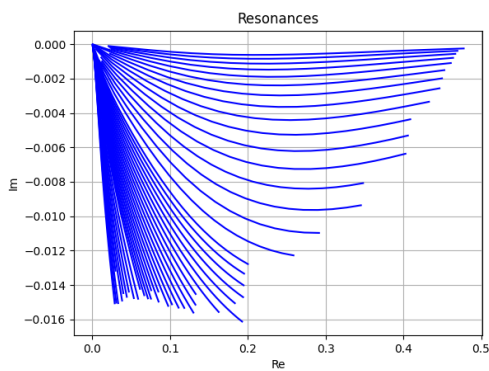


(c) Rezonanční energie

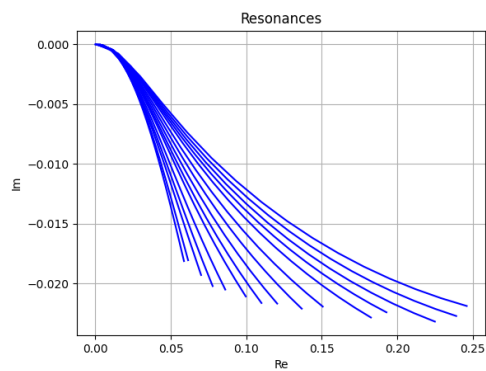


(d) Šířka rezonance

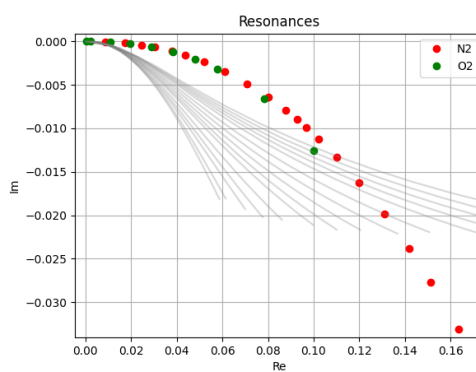
Obrázek 4.13: a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi, b) Závislost rezonanční energie, c) Závislost šířky rezonance na parametrech pro parabolický gaussovský potenciál a $l = 1$



(a) $l=1$

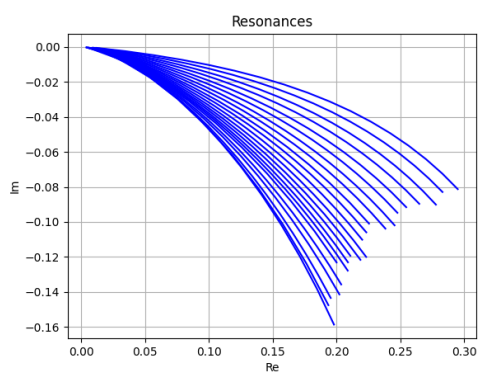


(b) $l=2$

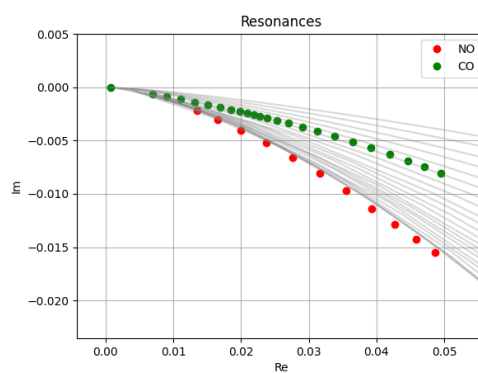


(c) Rezonance pro molekuly N_2, O_2 ($l = 2$)

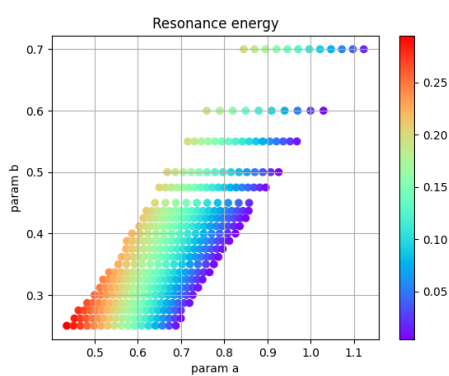
Obrázek 4.14: Pokrytí komplexní roviny rezonancemi v závislosti na momentu hybnosti pro parabolický gaussovský potenciál



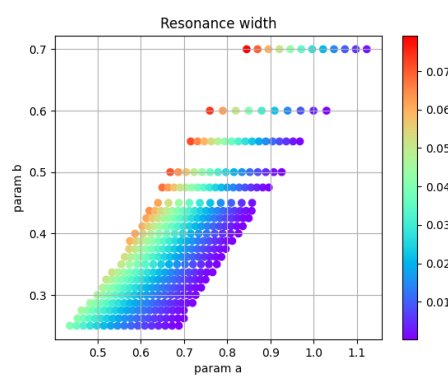
(a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi



(b) Rezonance pro molekuly NO, CO

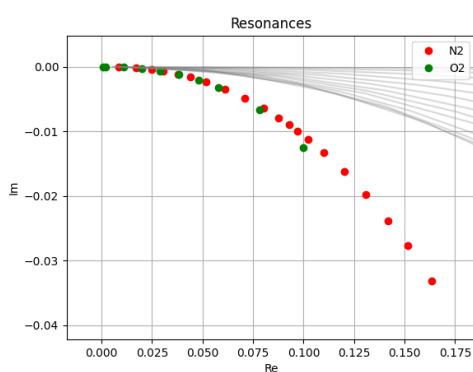
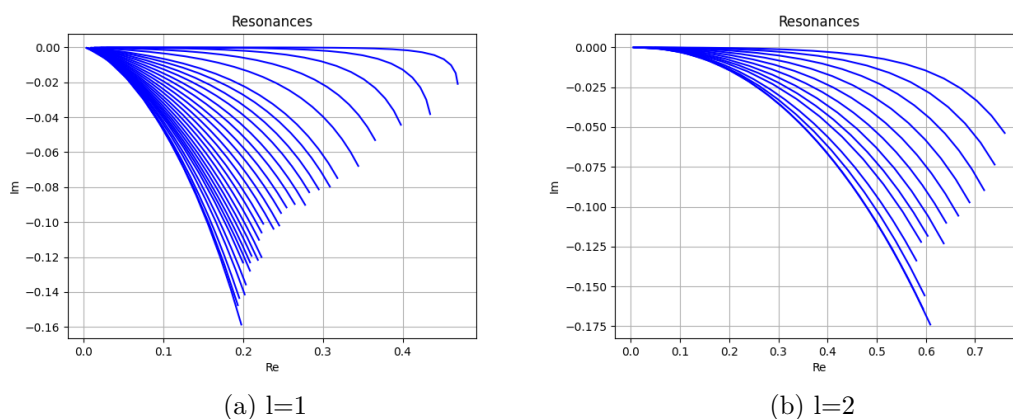


(c) Rezonanční energie



(d) Šířka rezonance

Obrázek 4.15: a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi b) Závislost rezonanční energie, c) Závislost šířky rezonance na parametrech pro parabolický gaussovský potenciál 2 a $l = 1$

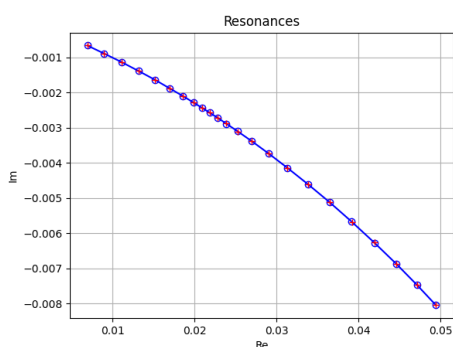


(c) Rezonance pro molekuly N_2, O_2 ($l = 2$)

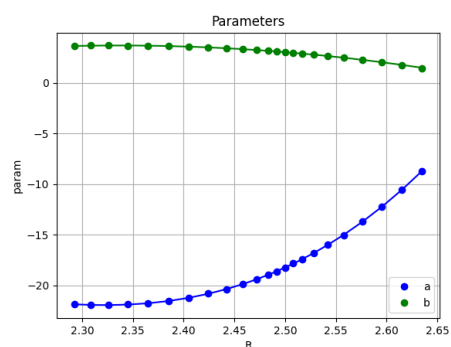
Obrázek 4.16: Pokrytí komplexní roviny rezonancemi v závislosti na momentu hybnosti pro parabolický gaussovský potenciál 2

4.2.6 Rezonance pro molekulu CO

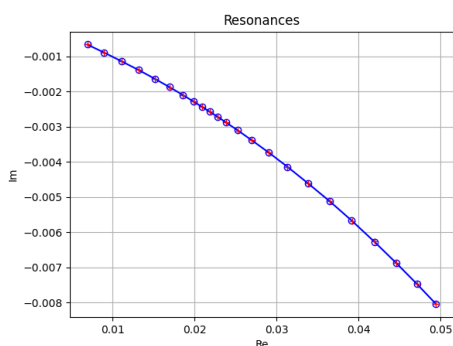
Ne všechny rezonance pro rozptyl elektronu na molekule lze modelovat pomocí potenciálu typu 4.2, kde parametr α_C je konstantní a parametr λ závisí na vzdálenosti atomů R . Příkladem je molekula CO. Rezonance jsou lokalizovány v oblastech pokrytých čtyřmi typy potenciálů viz obr. 4.7 b), 4.9 b), 4.13 b) a 4.15 b). V důsledku by bylo možné pomocí zmíněných potenciálů zkonstruovat model interakčního potenciálu. Oba parametry a, b v takovém případě musí být funkce vzdálenosti atomů R . Pro ověření této možnosti byly nalezeny hrubé hodnoty parametrů potenciálů, pro které se naleznou rezonance odpovídající datům. Hodnoty parametrů poté lze aproximovat polynomem v závislosti na hodnotě R . Výsledky jsou zobrazeny na obr. 4.17. Tyto polynomy ale nelze použít jako kvalitní model interakčního potenciálu. Numerické simulace ukázaly, že by bylo nutné určit parametry pro jednotlivé rezonance s vyšší přesností a teprve poté zkusit nalézt vhodnou aproximaci obecnějšího typu než polynomiální. Modelové potenciály obsahují exponenciální členy a malá perturbace hodnot parametrů způsobí výrazný rozdíl ve spočtené rezonanci. Kvůli jednodušší závislosti parametrů by bylo vhodné použít gaussovský a exponenciální potenciál pro konstrukce modelu pro molekulu CO. Samotná konstrukce již není součástí práce.



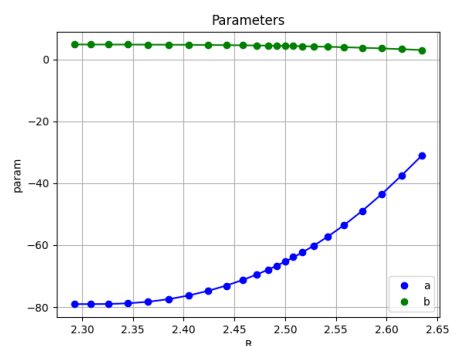
(a) Gaussovský - rezonance



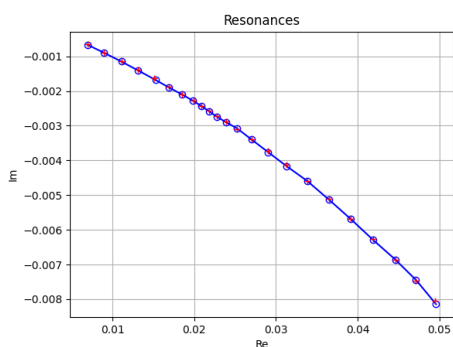
(b) Gaussovský - parametry



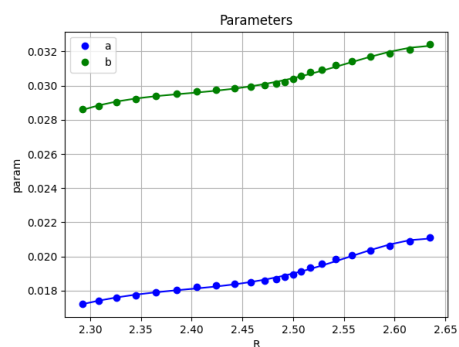
(c) Exponenciální - rezonance



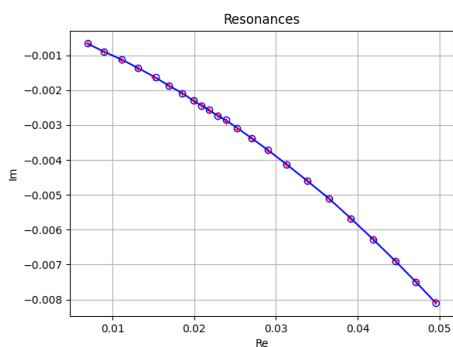
(d) Exponenciální - parametry



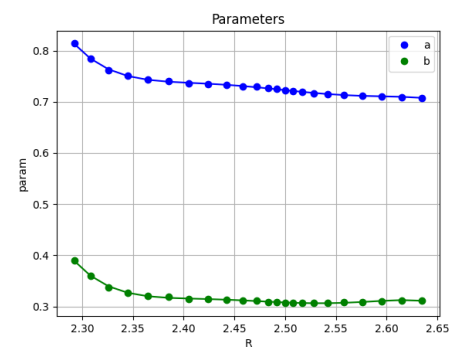
(e) Parabolický gaussovský - rezonance



(f) Parabolický gaussovský - parametry



(g) Parabolický gaussovský 2 - rezonance



(h) Parabolický gaussovský 2 - parametry

Obrázek 4.17: a), b) Rezonance a parametry pro gaussovský potenciál, c), d) pro exponenciální potenciál, e), f) pro parabolický gaussovský potenciál, g), h) pro parabolický gaussovský potenciál 2 pro molekulu CO

Závěr

Náplní práce je výpočet rezonancí pro vybrané jednorozměrné radiálně symetrické potenciály. Téma je motivováno využitím potenciálů při konstrukci modelů popisujících rozptyl elektronů na dvouatomových molekulách. Jako modelové potenciály byly zvoleny gaussovský, exponenciální, Morseův a parabolický gaussovský ve dvou variantách. Numerické simulace byly zaměřeny na dvě témata:

- Vlastnosti numerických metod FEM, DVR, a ECS z hlediska výpočtu rezonancí.
- Nalezení oblastí v komplexní rovině pokrytých rezonancemi pro několik modelových potenciálů.

Vlastnosti numerických metod jsou studovány z hlediska nastavení jejich parametrů: FEM - počet elementů sítě, DVR - stupeň polynomů v kvadratuře, ECS - úhel a poloha bodu otočení do komplexní roviny. Výsledky jsou k dispozici v části 4.1. U všech potenciálů byla nejprve nalezena referenční nastavení s co nejmenším počtem elementů a stupněm kvadratury, která vedou k výpočtu rezonancí s absolutní chybou řádu $10^{-11} - 10^{-10}$. Výsledky simulací pro stupeň kvadratury ukazují, že od jistého stupně se již nesnižuje chyba nalezených rezonancí. Naopak při snižování stupně chyba rychle roste. Vliv počtu elementů sítě na chybu je podobný jako u stupně kvadratury. Po dosažení určitého počtu elementů již nedochází ke snížení chyby. Požadovanou přesnost určení rezonancí lze dosáhnout kombinací vyššího stupně kvadratury a menšího počtu elementů nebo naopak. V případě parametrů ECS (úhel a bod) byly pro jednotlivé potenciály nalezeny hodnoty, při kterých se dosahuje nejmenší chyby. Hodnoty mají vliv nejen na chybu, ale také na samotnou detekci. Od určitých hodnot se již nedetekují rezonance s velkou šířkou. Pro potenciály byly stanoveny meze použitelnosti obou parametrů.

Všechny zmíněné potenciály obsahují parametry a, b , které ovlivňují polohu rezonancí a pomocí změny těchto parametrů byly určeny pokryté oblasti. Trajektorie vlastních čísel odpovídají situaci, kdy parametr a se mění, zatímco parametr b je konstantní. Pokrytí bylo spočteno pro hodnoty orbitálního momentu hybnosti $l = 1, 2, 3$. Pokrytí je jemnější v případě $l = 1$ pro fyzikálně zajímavé rezonanční energie do $0.2 - 0.5$ atomových jednotek a hrubé pro hodnoty $l = 2, 3$. Podrobné výsledky včetně numerických dat jsou k dispozici v části 4.2. Gaussovský, exponenciální, Morseův a parabolický gaussovský 2 potenciál se ukazují jako dobré příklady typického chování, kdy parametr potenciálu a popisuje sílu interakce. Trajektorie vlastních čísel mají klesající konkávní charakter. U Morseova a parabolického gaussovského 2 potenciálu se ukazují poměrně úzké rozsahy parametrů a, b , které vedou na dané pokrytí, v porovnání s gaussovským a exponenciálním potenciálem. Parabolický gaussovský potenciál je příkladem potenciálu, u kterého jsou trajektorie klesající konkávní pouze pro nízké rezonanční energie. U vyšších energií se charakter trajektorií mění na konvexní. Využití potenciálů je také ilustrováno na datech rezonancí z rozptylu elektronu na dvouatomových molekulách N_2 , O_2 , NO a CO . U molekul N_2 a NO je k dispozici model založený na gaussovském potenciálu, kde parametr v exponentu je konstantní a druhý parametr je funkcí vzdálenosti atomů. Data z rezonancí NO jsou lokalizována v oblastech

pokrytí pro všechny potenciály a bylo by možné vytvořit model nejen s využitím gaussovského potenciálu ale také ostatních. Rezonance molekuly N_2 a O_2 je možné kromě gaussovského modelovat i pomocí exponenciálního a Morseova potenciálu. Molekula CO je odlišná ve smyslu, že nelze modelovat pomocí potenciálu s konstantním parametrem v exponentu. Rezonance jsou lokalizovány v oblastech pokrytých gaussovským, exponenciálním a parabolickým gaussovským potenciálem. Je tedy možné zkonstruovat model, kde oba parametry jsou funkcí vzdálenosti atomů. Tato možnost byla v principu ověřena nalezením hodnot parametrů, které vedou na příslušné rezonance. Samotná konstrukce modelu pro jednotlivé potenciály již není součástí práce.

Kromě numerických simulací je výstupem práce také program vytvořený pro účely zmíněných výpočtů. Uživatel zadává parametry numerických metod a typ potenciálu spolu s rozsahy parametrů. Program následně vypočte rezonance a vázané stavy s volitelnou možností grafických výstupů. Sadu dostupných potenciálů lze rozšířit o další typy. Je šířen ve formě open-source a k dispozici ve standardním repozitáři knihoven pro jazyk Python.

Seznam použité literatury

- [1] V. I. Kukulin, V. M. Krasnopol'sky, and J. Horáček. *Theory of Resonances Principles and Applications*. Academia, 1989.
- [2] J. R. Taylor. *Scattering Theory: The quantum Theory on Nonrelativistic Collisions*. Wiley, New York, 1972.
- [3] T. N. Rescigno and C. W. McCurdy. Numerical grid methods for quantum-mechanical scattering problems. *Phys. Rev. A*, 62:032706, 2000.
- [4] Karel Houfek, T. N. Rescigno, and C. W. McCurdy. Probing the nonlocal approximation to resonant collisions of electrons with diatomic molecules. *Phys. Rev. A*, 77:012710, Jan 2008.
- [5] Nimrod Moiseyev. *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2011.
- [6] Cheng Chin, Rudolf Grimm, Paul Julienne, and Eite Tiesinga. Feshbach resonances in ultracold gases. *Reviews of Modern Physics*, 82, 2010.
- [7] Jeremy U. Davis and Thomas Sommerfeld. Computing resonance energies directly: method comparison for a model potential. *The European Physical Journal D*, 75, 2021.
- [8] Rubin H. Landau, Manuel J. Páez, and Cristian C. Bordeianu. *Computational Physics: Problem Solving with Python*. Wiley-VCH, 3rd edition, 2015.
- [9] Eric W Weisstein. Lobatto quadrature From MathWorld—A Wolfram Web Resource, 2023.
- [10] Lloyd N. Trefethen and David Bau. *Numerical Linear Algebra*. SIAM, 1997.
- [11] Guido Van Rossum and Fred L. Drake. Python 3 reference manual, 2009.
- [12] Charles R. Harris and K. Jarrod Millman. Array programming with NumPy, 2020.
- [13] Pauli Virtanen and Ralf Gommers. SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python, 2020.
- [14] Aaron Meurer and Christopher P. Smith. Sympy: symbolic computing in python, January 2017.
- [15] J. D. Hunter. Matplotlib: A 2d graphics environment, 2007.
- [16] Felipe Pezoa, Juan L Reutter, Fernando Suarez, Martín Ugarte, and Domagoj Vrgoč. Foundations of json schema, 2016.
- [17] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, and D. Sorensen. *Lapack users' guide*, 1999.

Seznam obrázků

1.1	Příklad potenciálu pro tvarovou rezonanci	5
1.2	Příklad potenciálu pro Feshbachovu rezonanci	5
1.3	Poloha vázaných stavů a rezonancí v komplexní rovině hybnosti a energie	6
1.4	Pohyb stavů pro $l = 0$	7
1.5	Pohyb stavů pro $l > 0$	7
2.1	Příklad báze pro metodu FEM, $N = 5, h = 1$	11
2.2	Příklad báze pro metodu FEM-DVR, $N = 3, n = 4$	12
2.3	Struktura matice tuhosti, $N = 3, n = 4$	14
2.4	Ilustrace metody ECS	14
2.5	Vlastní čísla po aplikaci metody ECS	15
3.1	Graf komplexního spektra	22
3.2	Ukázka grafů potenciálu	22
4.1	Závislost maximální relativní chyby stavu na stupni kvadratury pro širší rozsah rezonančních energií	26
4.2	Závislost maximální relativní chyby stavu na stupni kvadratury pro nízké rezonanční energie	27
4.3	a) Závislost maximální relativní chyby stavu na počtu elementů sítě, b) Závislost stupně kvadratury na počtu elementů sítě při řádovém zachování referenční přesnosti pro širší rozsah rezonančních energií	29
4.4	a) Závislost maximální relativní chyby stavu na počtu elementů sítě, b) Závislost stupně kvadratury na počtu elementů sítě při řádovém zachování referenční přesnosti pro širší rozsah rezonančních energií pro nízké rezonanční energie	30
4.5	a) Závislost maximální relativní chyby stavu b) Závislost počtu nalezených stavů na úhlu	31
4.6	a) Závislost maximální relativní chyby stavu b) Závislost počtu nalezených stavů na poloze bodu r_0	32
4.7	a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi, b) Rezonance pro molekulu NO, c) Závislost rezonanční energie, d) Závislost šířky rezonance na parametrech pro gaussovský potenciál a $l = 1$	35
4.8	Pokrytí komplexní roviny rezonancemi v závislosti na momentu hybnosti pro gaussovský potenciál	36
4.9	a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi, b) Závislost rezonanční energie, c) Závislost šířky rezonance na parametrech pro exponenciální potenciál a $l = 1$	37
4.10	Pokrytí komplexní roviny rezonancemi v závislosti na momentu hybnosti pro exponenciální potenciál	38
4.11	a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi, b) Závislost rezonanční energie, c) Závislost šířky rezonance na parametrech pro Morseův potenciál a $l = 1$	40

4.12	Pokrytí komplexní roviny rezonancemi v závislosti na momentu hybnosti pro Morseův potenciál	41
4.13	a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi, b) Závislost rezonanční energie, c) Závislost šířky rezonance na parametrech pro parabolický gaussovský potenciál a $l = 1$	43
4.14	Pokrytí komplexní roviny rezonancemi v závislosti na momentu hybnosti pro parabolický gaussovský potenciál	44
4.15	a) Pokrytí komplexní roviny rezonancemi b) Závislost rezonanční energie, c) Závislost šířky rezonance na parametrech pro parabolický gaussovský potenciál 2 a $l = 1$	45
4.16	Pokrytí komplexní roviny rezonancemi v závislosti na momentu hybnosti pro parabolický gaussovský potenciál 2	46
4.17	a), b) Rezonance a parametry pro gaussovský potenciál, c), d) pro exponenciální potenciál, e), f) pro parabolický gaussovský potenciál, g), h) pro parabolický gaussovský potenciál 2 pro molekulu CO	47

Seznam tabulek

1.1	Příklady fyzikálních jevů s rezonancí	4
4.1	Referenční nastavení numerických metod	25
4.2	Rozsahy parametrů a počty stavů	25
4.3	Referenční počet bazových funkcí	26
4.4	Výsledky pro gaussovský potenciál	34
4.5	Parametry interakčního potenciálu modelu popsaného v [4]	35
4.6	Výsledky pro exponenciální potenciál	36
4.7	Výsledky pro Morseův potenciál	38
4.8	Výsledky pro parabolický gaussovský potenciál	41
4.9	Výsledky pro parabolický gaussovský potenciál 2	42

Seznam výpisů

3.1	Rozhraní programu	17
3.2	Příklad nastavení s povinnými parametry	18
3.3	Příklad nastavení s volitelnými parametry	18
3.4	Příklady intervalů	20
3.5	Vázané stavy a rezonance	22