



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Filip Vozáb

**Interakce částice s atomy v optické
mřížce**

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2016

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

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

Název práce: Interakce částice s atomy v optické mřížce

Autor: Filip Vozáb

Ústav: Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D., Ústav teoretické fyziky

Abstrakt: Práce se zabývá popisem asociativního odtržení elektronu při interakci iontu s neutrálními atomy v optické mřížce. Ten je dán kombinací modelu pro interakci částice s optickou mřížkou, daném periodickým potenciálem, a modelem asociativního odtržení elektronu, popsáném imaginární složkou potenciálu. V práci je uvedena podoba Schrödingerovy rovnice pro periodický potenciál, s využitím Blochova teorému, a následném řešení takovéto rovnice v případě obecného komplexního a nehermitovského hamiltoniánu (kvůli imaginární složce potenciálu). Konkrétně počítám komplexní energetické hladiny jednorozměrného modelu pomocí numerických metod ze softwarového balíku EISPACK pro nehermitovský hamiltonián rozložený do konečné báze.

Klíčová slova: teorie rozptylu, optické mřížky, atomová fyzika

Title: Particle interaction with atoms in optical lattice

Author: Filip Vozáb

Institute: Institute of Theoretical Physics

Supervisor: doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D., Institute of Theoretical Physics

Abstract: The thesis discusses description of associative detachment of electron in the iont interaction with neutral atoms in optical lattice. This is given by combination of the model for interaction of particles in optical lattice, given by periodic potential, and of the model for associative detachment of electron, describe by imaginary component of the potential. In thesis is stated form of Schrödinger's equation for periodic potential, and subsequent solution of such equation in case of general complex and non hermitian Hamiltonian (because of imaginary component of potential). I specifically compute complex energetic levels one-dimensional model with numeric method from software package EISPACK for non hermitian Hamiltonian decomposed into finite base.

Keywords: scattering theory, optical lattices, atomic physics

Poděkování

Rád bych na tomto místě poděkoval svému vedoucímu bakalářské práce doc. RNDr. M. Čížkovi, Ph.D. za jeho věcné rady a připomínky během vypracovávání této práce.

Obsah

Úvod	2
1 Model pro atom v optické mřížce	4
1.1 Základní podoba Schrödingerovy rovnice a její parametrizace . . .	4
1.2 Blochův teorém	5
1.3 Spektrální rozložení Hamiltonova operátoru	6
1.4 Diagonalizace matice Hamiltoniánu	7
1.5 Energetické hladiny	8
1.5.1 Volná částice	8
1.5.2 Proměnné hodnoty A	10
2 Asociativní odtržení v optické mřížce	14
2.1 Parametrizace modelu	14
2.2 Diagonalizace obecně nehermitovské matice	15
2.3 Energetické hladiny	17
2.3.1 Nulový reálný potenciál	17
2.3.2 Řešení pro $A = 1,0$	22
Závěr	27
Seznam použité literatury	28
Seznam obrázků	29

Úvod

Tato práce se zabývá chováním částic (v našem případě iontů) při průchodu optickou mřížkou a jejich interakcí s neutrálními atomy, zachycenými v mřížce. Optická mřížka je popsána periodickým potenciálem a neutrální atomy jsou tímto potenciálem zachycené do mřížkové struktury (kde vzdálenost atomů je daná periodou potenciálu). Iont vpuštěný do takto nachystané mřížky pak reaguje na periodický potenciál (jeli stále přítomný) a zároveň může interagovat s neutrálním atomem posazeným v mřížce.

V praxi se periodický potenciál (pro vytvoření optické mřížky) generuje překrýváním dvou proti sobě postupujících laserových paprsků (viz Bloch, 2005). Interference těchto dvou paprsků vytváří stojatou elektromagnetickou vlnu. Takovéto periodické elektromagnetické pole indukuje v neutrálních atomech dipólový moment (úměrný intenzitě elektrického pole) a zároveň s tímto dipólovým momentem interaguje a vytváří zachycovací potenciál popsáný vztahem (Bloch, 2005)

$$V_{dip}(\mathbf{r}) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}) \propto \alpha(\omega_L) |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2. \quad (1)$$

Zde \mathbf{r} představuje polohový vektor, \mathbf{d} dipólový moment atomu, \mathbf{E} intenzitu elektrického pole a $\alpha(\omega_L)$ polarizovatelnost atomu. Můžeme vidět, že potenciál závisí na $I(\mathbf{r}) \propto |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2$, tedy intenzitě laserového paprsku. Odtud můžeme vidět, že hloubka zachycovacího potenciálu se dá snadno upravovat změnou intenzity užitého laserového paprsku. Užitím více dvojic můžeme vytvořit vícerozměrné mřížky. Při třech dvojicích laserových paprsků (tedy tři stojaté elektromagnetické vlny) můžeme vytvořit systém odpovídající krystalové mřížce, tvar této mřížky pak závisí na vzájemném úhlu, který dvojice laserových svazků svírají. Mřížková konstanta (tedy perioda zachycovacího potenciálu) je pak přímo úměrná vlnové délce užitého světla (jde přesně o periodu vzniklé stojaté vlny).

V první kapitole se budu zabývat chováním částice v takovémto periodickém potenciálu.

Druhá část řešeného problému je samotná interakce iontu s neutrálním atomem v předem nachystané optické mřížce. Předpokládanou interakcí bude asociativní odtržení elektronu při vzniku molekuly



V této reakci je iont A^- vpuštěný do optické mřížky a B je neutrální atom usazený v mřížce. Přesnější popis řešení této reakce je rozebrán např. v bakalářské práci J. Dvořáka (Dvořák, 2015, Kap. 2). Obecně je řešena Schrödingerova rovnice ve tvaru

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (3)$$

kde pro popsání tohoto neelastického procesu nahradíme reálný periodický potenciál lokálním komplexním potenciálem ve tvaru

$$V_C(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) - \frac{i}{2}\Gamma(\mathbf{r}), \quad (4)$$

kde Γ je tzv. rozpadová šířka. Přesným tvarem funkce Γ se budu zabývat ve druhé kapitole.

Základním cílem práce bude zkonstruovat jednoduchý jednorozměrný model tohoto asociativního odtržení elektronu v optické mřížce, a tedy efektivně zkonstruovat popis kombinující obecný popis optické mřížky (tedy periodický potenciál) a samotný proces asociativního odtržení (popsáný imaginární složkou potenciálu Γ). Dalším cílem bude numerické řešení stacionární Schrödingerovy rovnice (sestavené podle daného modelu). Nakonec budu zkoumat nalezená řešení s ohledem na fyziky pohybu iontů mezi neutrálními atomy v optické mřížce. Těmito problémy se budu zabývat v druhé kapitole.

Pro numerická řešení daných problémů užívám programovacího jazyka FORTRAN a pro něj sestavených procedur z Numerických receptů (Press a kol., 2007) a ze softwarového balíku EISPACK¹. Použité grafy jsou vykresleny pomocí programu gnuplot.

¹Dostupný z: <http://www.netlib.org/eispack/>

1. Model pro atom v optické mřížce

V této kapitole se budu zabývat sestavením jednorozměrného modelu atomu v optické mřížce, kde optická mřížka je popsána reálným periodickým potenciálem. S ohledem na vlastnosti daného modelu (tedy převážně periodicitu potenciálu) budu upravovat Schrödingerovu rovnici a následně se zabývat numerickým hledáním stacionární stavů.

1.1 Základní podoba Schrödingerovy rovnice a její parametrizace

Základním problémem bude řešení jednorozměrné verze Schrödingerovy rovnice ve tvaru

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\tilde{x}^2} + \tilde{V}(\tilde{x}) \right] \psi(\tilde{x}) = \tilde{E}\psi(\tilde{x}). \quad (1.1)$$

Zde je \tilde{V} periodický potenciál s periodou a (a tedy platí $\tilde{V}(\tilde{x} + a) = \tilde{V}(\tilde{x})$). Budeme tedy uvažovat $\tilde{x} \in [0; a]$. Pro jednoduchost přejdeme k bezrozměrné délce $x \in [0; 2\pi]$:

$$\tilde{x} = \frac{a}{2\pi}x.$$

Rozsah x mezi 0 a 2π se nám bude hodit pro jednoduché sestavení periodického potenciálu.

Po této upravě nám rovnice (1.1) přejde do tvaru

$$\left[-\frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \frac{d^2}{dx^2} + \tilde{V}(x) \right] \psi(x) = \tilde{E}\psi(x).$$

Rovnici dále zjednodušíme zavedením bezrozměrných veličin potenciálu a energie:

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= E_0 E \\ \tilde{V}(x) &= E_0 V(x) \end{aligned}, \quad E_0 = \frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2} \quad (1.2)$$

V dalším textu již budeme vyjadřovat potenciál a energii v jednotkách E_0 . Výsledná podoba Schrödingerovy rovnice tedy bude

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x). \quad (1.3)$$

Druhá důležitá otázka je užitý tvar potenciálu. Ten budeme volit jako

$$V(x) = A [\cos(x) + 1]. \quad (1.4)$$

Tato podoba splňuje požadovanou periodičnost (platí $V(x + 2\pi) = V(x)$). Navíc, jak uvidíme níže, volba funkce kosinus povede na reálnou matici hamiltoniánu¹ a řešený problém nám dále zjednoduší. Přičtení hodnoty +1 pak posouvá

¹Volba funkce sinus by naopak vedla na komplexní matici hamiltoniánu.

minimum potenciálu na hodnotu 0 (a potenciál je tedy vždy nezáporný).

Celý potenciál je pak popsán bezrozměrným parametrem A . Ze vztahu (1) víme, že pro neutrální atom potenciál \tilde{V} přímo úměrně závisí na intenzitě laserového paprsku. Jestliže $\tilde{V} = E_0 A [\cos(x) + 1]$, pak parametr A taktéž přímo závisí na intenzitě užitého laserového paprsku. Jelikož je možné intenzitu laserového paprsku libovolně modulovat i parametr A je možné volně nastavit s ohledem na problém. Typicky budu nastavovat hodnotu parametru A v rozsahu $[0, 1; 10]$.

1.2 Blochův teorém

Blochův teorém je podrobněji popsán např. v učebnici kvantové mechaniky od J. J. Sakuraje (Sakurai, 1994, Kap. 4.3), odkud jsem převážně čerpal.

Hamiltonián $\hat{H} = [-d^2/dx^2 + V(x)]$ je — v případě periodického potenciálu — translačně symetrický (vzhledem k posunutí o periodu potenciálu). To platí neboť část daná potenciálem je invariantní vůči translaci o vlastní periodu přímo ze své definice a část kinetické energie $(-d^2/dx^2)$ je translačně symetrická obecně (nehledě na parametr translace). Díky tomu můžeme celý problém rozdělit na nekonečně mnoho nezávislých problémů (označené parametrem k), kde každý z těchto problémů jde popsat vlastním Hamiltoniánem $\hat{H}(k)$. Jednotlivých operátory $\hat{H}(k)$ pak mají diskrétní spektrum $E_l(k)$, pro $l = 1, 2, 3, \dots$

Celé spektrum energií plného Hamiltoniánu \hat{H} je pak dán sjednocením jednotlivých spekter Hamiltoniánů $\hat{H}(k)$, přes všechny hodnoty parametru k .

Pro určení konkrétní podoby jednotlivých $\hat{H}(k)$ využijeme právě Blochova teorému, který říká, že vlnovou funkci $\psi(x)$ můžeme popsat jako rovinou vlnu ve tvaru

$$\psi(x) = u(x)e^{ikx}, \quad (1.5)$$

kde $u(x)$ je periodická funkce (s periodou a) a $k \in [-\pi/a; \pi/a]$ je tzv. Blochův vlnový vektor (v našem případě $k \in [-1/2; 1/2]$), který hraje roli parametru jednotlivých problémů.

Derivace funkce ψ jsou

$$\begin{aligned} \psi'(x) &= [u'(x) + iku(x)]e^{ikx}, \\ \psi''(x) &= [u''(x) + 2iku'(x) - k^2u(x)]e^{ikx}. \end{aligned}$$

Nyní můžeme tento tvar funkce ψ dosadit do Schrödingerovi rovnice (vztah (1.3)), která dostane tvar²

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} - 2ik\frac{d}{dx} + k^2 + V(x) \right] u(x) = E_l u(x), \quad (1.6)$$

což představuje rovnici $\hat{H}(k)u(x) = E_l(k)u(x)$ ³.

²Rovnice je podělena e^{ikx} , neboť platí, že $e^{ikx} \neq 0, \forall x \in [0; 2\pi]$ a $\forall k \in [-1/2; 1/2]$.

³Úplně přesně bych měl psát $u_k(x)$, neboť funkce u vždy náleží danému problému parametrizovaným pomocí k . Pro jednoduchost (zvláště u dalších rozkladů) tento index uvádět nebudu.

1.3 Spektrální rozložení Hamiltonova operátoru

Rovnice (1.6) se řeší na prostoru kvadraticky integrabilních funkcí, které jsou periodické na intervalu $[0; 2\pi]$. Báze tohoto prostoru je $e_n = \exp -inx$, pro $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Naším cílem nyní bude rozložit vlnovou funkci u a operátor $\hat{H} = [-d^2/dx^2 - 2ikd/dx + k^2 + V(x)]$ do báze tohoto prostoru.

V této části využijeme bracketový formalismus. $|a\rangle$ představuje vektor a a $\langle a|b\rangle$ představuje skalární součin definovaný jako

$$\langle a|b\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} a(x) \overline{b(x)} dx.$$

V bracketovém formalismu je vlnová funkce $u(x)$, vektorem $|u\rangle$.

Podle teorie Fourierovy řady můžeme rozložit vektor (nebo také vlnovou funkci) $u(x)$ do báze vektorů e_n následovně:

$$\begin{aligned} |u\rangle = u(x) &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n |e_n\rangle = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{-inx}, \\ c_n &= \langle e_n | u(x) \rangle. \end{aligned}$$

Dále budeme rozšiřovat Schrödingerovu rovnici⁴:

$$\begin{aligned} \hat{H}|u(x)\rangle &= E_l|u(x)\rangle, \\ \langle e_n|\hat{H}|u(x)\rangle &= E_l\langle e_n|u(x)\rangle, \\ \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \langle e_n|\hat{H}|e_m\rangle \langle e_m|u\rangle &= E_l\langle e_n|u(x)\rangle. \end{aligned}$$

Operátor \hat{H} se tedy rozloží do báze $\{e_n\}$ podle vztahu:

$$H_{nm} = \langle e_n|\hat{H}|e_m\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-inx} \hat{H} e^{imx} dx, \quad (1.7)$$

a Schrödingerova rovnice přejde na tvar

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} H_{nm} c_m = E_l c_n. \quad (1.8)$$

Konkrétní matice Hamiltonova operátoru podle vztahu (1.7) bude

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-inx} \left[-\frac{d^2}{dx^2} - 2ik \frac{d}{dx} + k^2 + V(x) \right] e^{imx} dx \\ H_{nm} &= (m^2 + 2mk + k^2) \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-inx} e^{imx} dx + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-inx} V(x) e^{imx} dx \end{aligned}$$

⁴Využijeme platnosti relace úplnosti báze $\{e_n\}$: $\sum_n |e_n\rangle \langle e_n| = I$

Zde uplatníme to, že $\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-inx} e^{imx} dx = \delta_{nm}$ ⁵. Výsledná matice Hamiltonova operátoru je

$$\begin{aligned} H_{nm} &= (n^2 + 2nk + k^2)\delta_{nm} + V_{nm}, \\ V_{nm} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-inx} V(x) e^{imx} dx. \end{aligned} \quad (1.9)$$

1.4 Diagonalizace matice Hamiltoniánu

Nyní když máme sestavenou matici hamiltoniánu budeme hledat vlastní čísla této matice $H_{nm}(k)$. Rozměr matice hamiltoniánu je v obecném případě roven nekonečnu. Pro potřeby numerického výpočtu budeme provádět rozklad do báze e_n pouze do konečného stupně N . Rozklad vlnové funkce $u(x)$ a vztah (1.8) přejde na podobu

$$\begin{aligned} u(x) &= \sum_{n=-N}^N c_n e^{-inx}, \\ \sum_{m=-N}^N H_{nm} c_m &= E_l c_n, \end{aligned}$$

kde N je dostatečně vysoké (jaká bude užitá konkrétní hodnota budu diskutovat níže). Kvůli přechodu do konečného prostoru, kde $n = -N, \dots, N$, můžeme získat jen konečný počet vlastních čísel E_l a to pro $l = 1, 2, \dots, 2N + 1$. Můžeme navíc předpokládat, že nejpřesnější výsledky získáme pro nízké l a s rostoucím l se bude přesnost snižovat.

Celý problém se nám převedl na diagonalizaci čtvercové matice o hodnosti N . Pro řešení užívám Jacobiho metodu převzatou z Numerických receptů (Press a kol., 2007). Tato metoda je postavená pro diagonalizaci reálných symetrických matic a je vhodná pro středně veliké matice. Výsledná matice je vskutku reálná a symetrická a to díky vhodné volbě potenciálu $V(x) = A[\cos(x) + 1]$. Výsledná matice H_{nm} je dána reálným diagonálním členem $n^2 + 2nk + k^2$ a členem V_{nm} . Ten můžeme přímo spočítat z definice⁶

$$\begin{aligned} V_{nm} &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-inx} V(x) e^{imx} dx, \\ V_{nm} &= \frac{A}{4\pi} \left[\int_0^{2\pi} e^{-inx} e^{ix} e^{imx} dx + \int_0^{2\pi} e^{-inx} e^{-ix} e^{imx} dx + 2 \int_0^{2\pi} e^{-inx} e^{imx} dx \right], \\ V_{nm} &= \frac{A}{4\pi} \left[\int_0^{2\pi} e^{-inx} e^{i(m+1)x} dx + \int_0^{2\pi} e^{-inx} e^{i(m-1)x} dx + 2 \int_0^{2\pi} e^{-inx} e^{imx} dx \right], \\ V_{nm} &= \frac{A}{2} (\delta_{n(m+1)} + \delta_{n(m-1)} + 2\delta_{nm}). \end{aligned}$$

⁵Jde totiž o skalární součin ortogonální vektorů e_n .

⁶Využijte vztahu $\cos(x) = (e^{ix} + e^{-ix})/2$

Matice V_{nm} má tedy následující strukturu

$$V_{nm} = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & \frac{A}{2} & A & \frac{A}{2} & & & 0 \\ & & \frac{A}{2} & A & \frac{A}{2} & & \\ 0 & & & \frac{A}{2} & A & \frac{A}{2} & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix},$$

a je skutečně reálná a symetrická.

Nyní je dobré se zamyslet jak velké N je potřeba pro dostatečnou přesnost výsledků. Pro zjištění přesnosti numerického řešení aplikuji Jacobiho metodu na matice hamiltoniánu H_{nm} s proměnnou hodnotou N od 1 do 50 (tedy měním rozměr matice od 3 do 101^7). Dále počítám relativní odchylku

$$\frac{\Delta\lambda_N}{\lambda_{max}} = \frac{|\lambda_N - \lambda_{max}|}{\lambda_{max}}, \quad (1.10)$$

kde λ_N je l -té vlastní číslo (vlastní čísla jsou seřazená od nejmenšího po největší, $l = 1, 2, \dots$) při proměnné hodnotě N a λ_{max} je l -té vlastní číslo při maximální hodnotě $N = 50$.

Výsledky testu nepřesnosti jsou zaznamenány na obrázku 1.1. Pro tento test jsem pracoval s hodnotou konstantu $A = 1$. A pro hodnoty Blochova vektoru $k = \{-0,5; 0; 0,5\}$.

Z těchto dat můžeme vidět, že $N = 10$ je dostatečně vysoká hodnota. Vyšší hodnoty N nemají smysl, neboť se dostaneme na přesnost užitého datového typu⁸. Pro následující výpočty v této kapitole budu užívat tuto hodnotu N .

1.5 Energetické hladiny

Po provedení diagonalizační Jacobiho metody dostaneme vlastní čísla matice H_{nm} , která jsou (podle vztahu (1.8)) energetickými hladinami řešeného problému. Volitelnými parametry jsou parametr potenciálu $A \in [0, 1; 10]$ a Blochův vektor $k \in [-0,5; 0,5]$. Pro výpočet tedy budu volit hodnotu A jako konstantní a budu hledat závislost energie na Blochově vlnovém vektoru ($E_l = f(k)$). Následně budu porovnávat hodnoty $E(k)$ pro různě volený parametr A .

Veškeré výsledky jsou počítány s hodnotou $N = 10$.

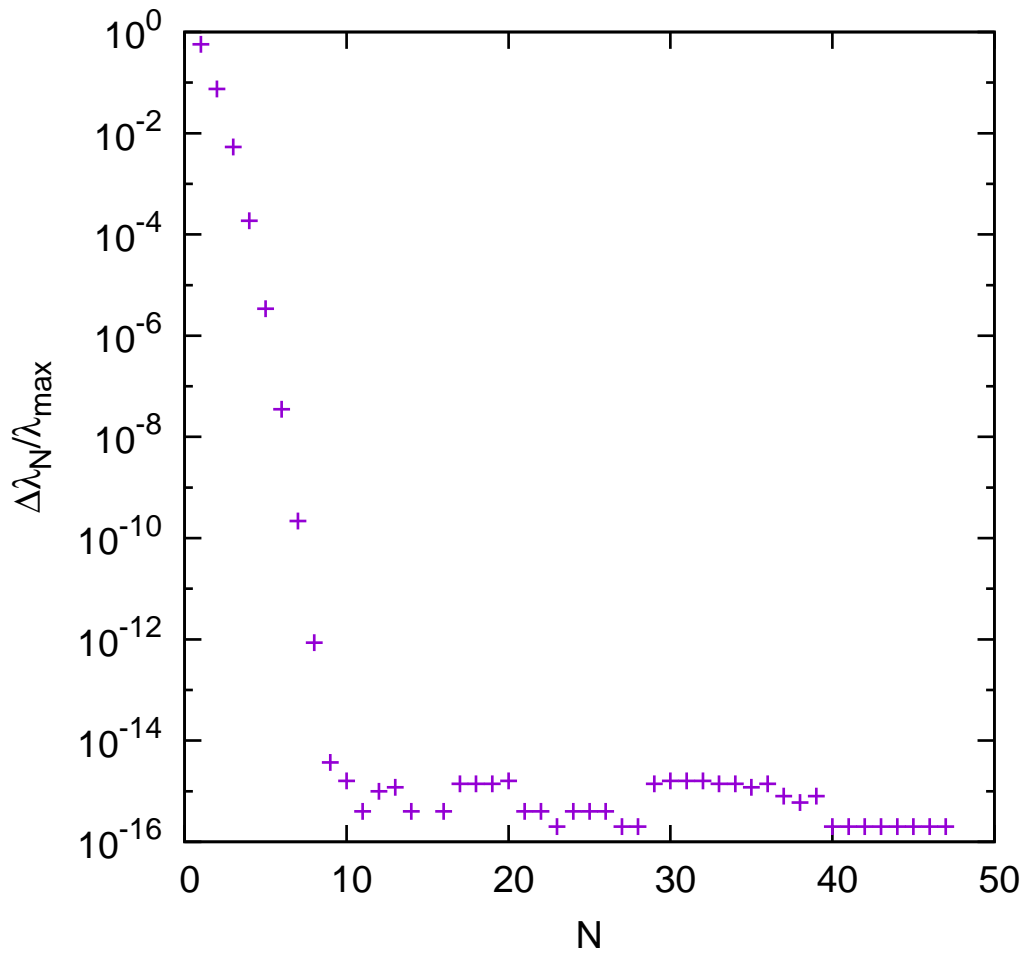
1.5.1 Volná částice

Základní test správnosti metody budu provádět řešením problému pro volnou částici. Tento problém nastavím volbou parametru $A = 0$ a tedy budu řešit systém bez vnějšího potenciálu pouze s vnější podmínkou periodičnosti chování částice.

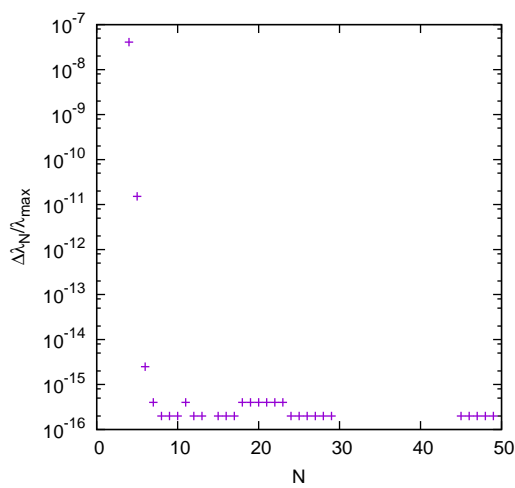
Na obrázku 1.2 jsou vykreslené spočítané hodnoty pro nulový potenciál (černými tečkami) a teoretické hodnoty energie pro volnou částice (plnou červenou čarou). Energie volné částice je dána jako $E = k^2$ (počítáme s bezrozměrnou energií viz vztah (1.2)), s předpokladem periodičnosti vlnové funkce.

⁷Matice je číslována od $-N$ do $+N$ a tedy celková velikost rozměru je $2N + 1$.

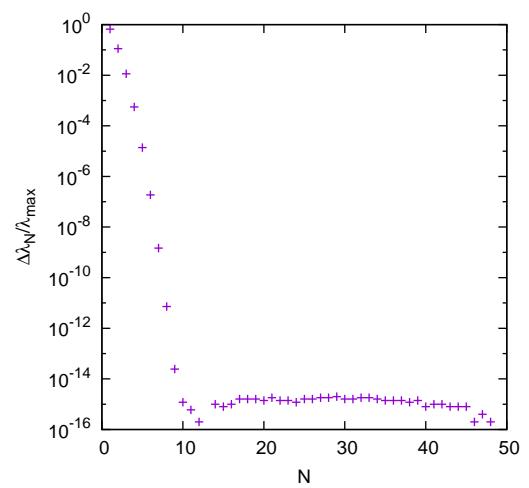
⁸Užívám datový formát s dvojitou přesností.



(a) $k = 0,0; l = 1$



(b) $k = 0,0; l = 4$



(c) $k = -0,5; l = 1$

Obrázek 1.1: Nepřesnost numerického řešení v závislosti na N , $N_{\max} = 50$

Konkretní analytické řešení volné částice dostaneme dosazením nulového potenciálu do vztahu (1.9). Tato matice je již diagonální a tedy vlastní čísla jsou přímo

$$E_n = n^2 + 2nk + k^2 = (k + n)^2,$$

nebo tyto hodnoty můžeme přímo rozepsat jako

$$E_n = \begin{cases} \dots, \\ (k - 2)^2, n = -2, \\ (k - 1)^2, n = -1, \\ k^2, n = 0, \\ (k + 1)^2, n = 1, \\ (k + 2)^2, n = 2, \\ \dots \end{cases}$$

pro n v hodnotách od $-\infty$ do ∞ . To přesně odpovídá funkci k^2 opakované přes nekonečně mnoho period. Při pozorování jediné periody dostáváme hodnoty znázorněné plnou čarou na obrázku 1.2.

1.5.2 Proměnné hodnoty A

Dále jsem určil energetické hladiny pro potenciál daný parametrem $A \neq 0$. Výsledky pro první dvě hladiny shrnuje obrázek 1.3. Na tomto grafu porovnávám energetické hladiny pro potenciály dané parametrem $A = 0,1; 0,5; 1,0$ a porovnávám s výsledky pro volnou částici ($A = 0$). Pro dobré znázornění přičítám k hladinám daným konkrétním parametrem A konstantu tak, aby pro první hladinu platilo: $E(0) = 0$. Jednotlivé hodnoty energie tedy posouvám následujícím způsobem:

$$E_t = E - E_1(0) = E - 0,095; \quad A = 0,1$$

$$E_t = E - E_1(0) = E - 0,386; \quad A = 0,5$$

$$E_t = E - E_1(0) = E - 0,621; \quad A = 1,0.$$

Odtud vidíme, že základním efektem potenciálu je zvyšování prahové hodnoty energetického spektra.

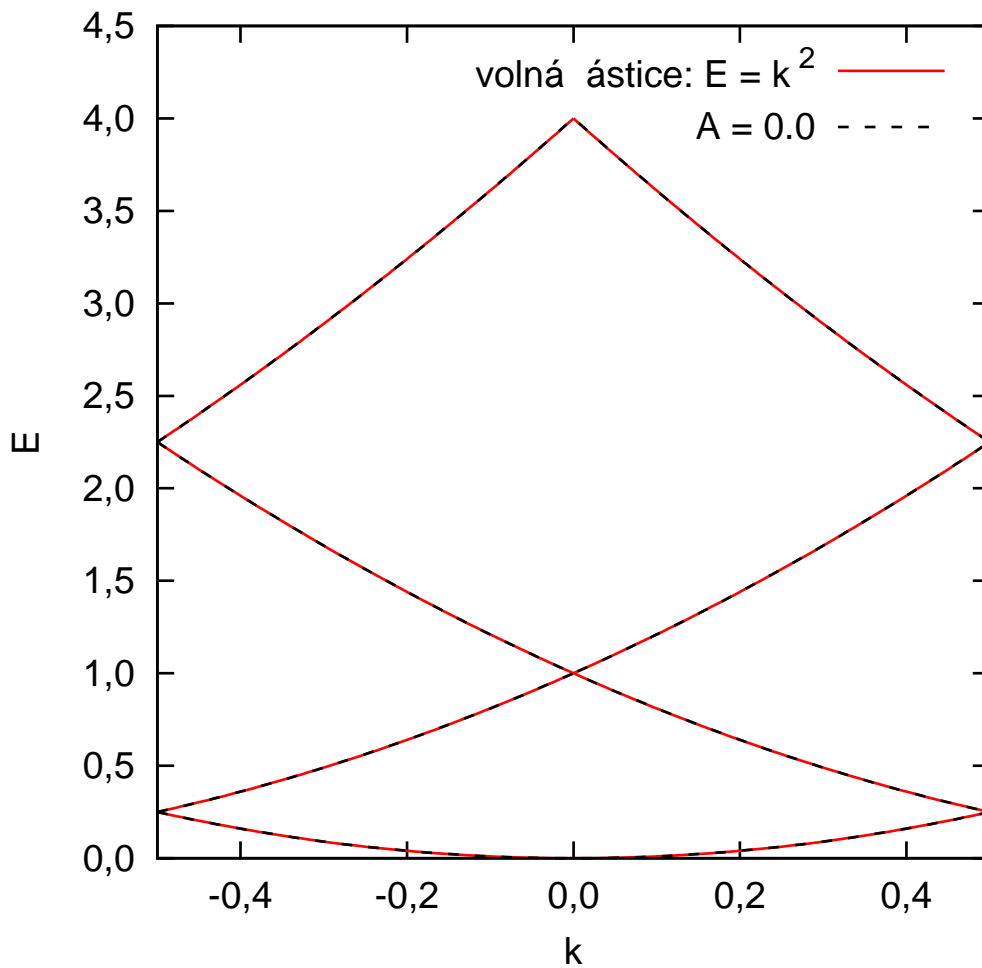
Vázané stavy v blízkosti minima potenciálu (daný funkcí kosinus) se dají přibližně popsat modelem harmonického oscilátoru. Tento lineární harmonický oscilátor, usazený v minimu našeho potenciálu ($x = \pi$), má potenciál daný jako

$$V_{LHO} = \frac{1}{2}m\omega^2(x - \pi)^2.$$

Zároveň můžeme náš periodický potenciál rozvíjet kolem bodu π jako

$$V(x) = \frac{A}{2}(x - \pi)^2 + O((x - \pi)^4).$$

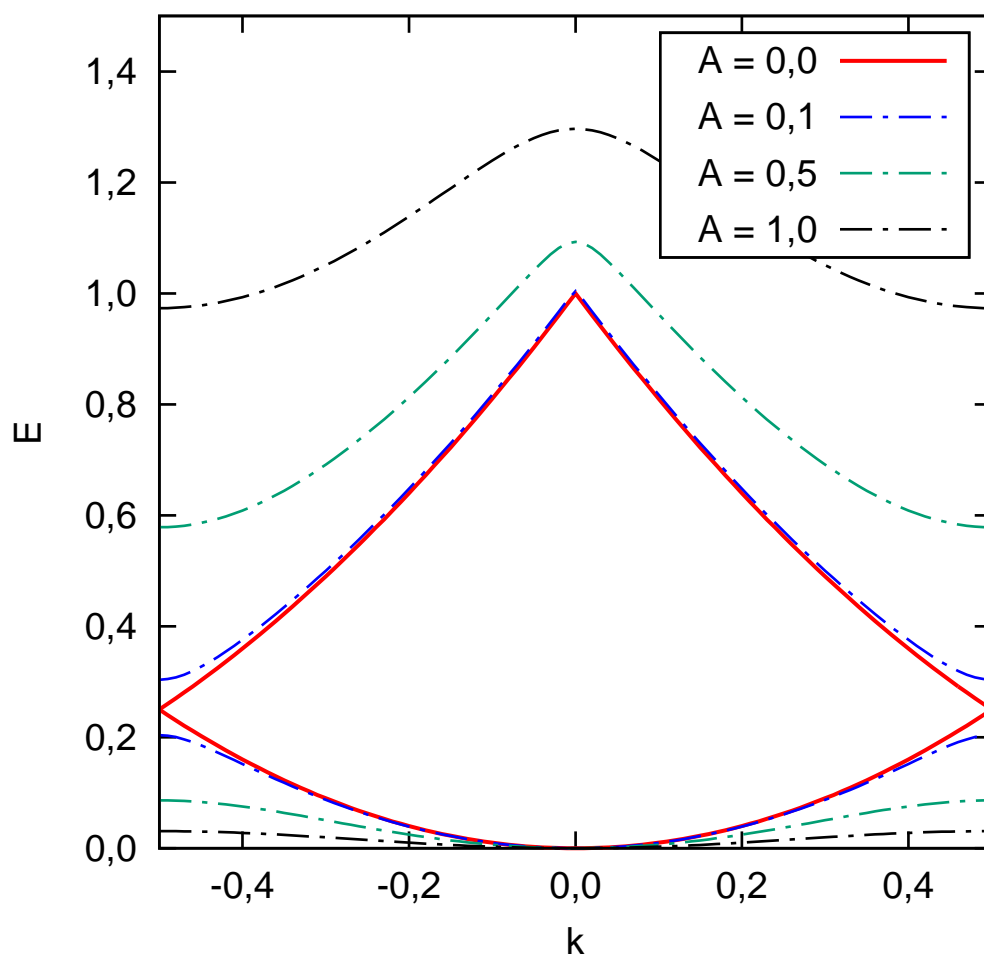
Můžeme tedy parametru ω přiřadit hodnotu $\omega = \sqrt{A/m}$. První energetická hladina harmonického oscilátoru je dána energií $E = \hbar\omega/2$. Růst parametru A odpovídá růstu parametru ω , při kterém roste hodnota první energetické hladiny.



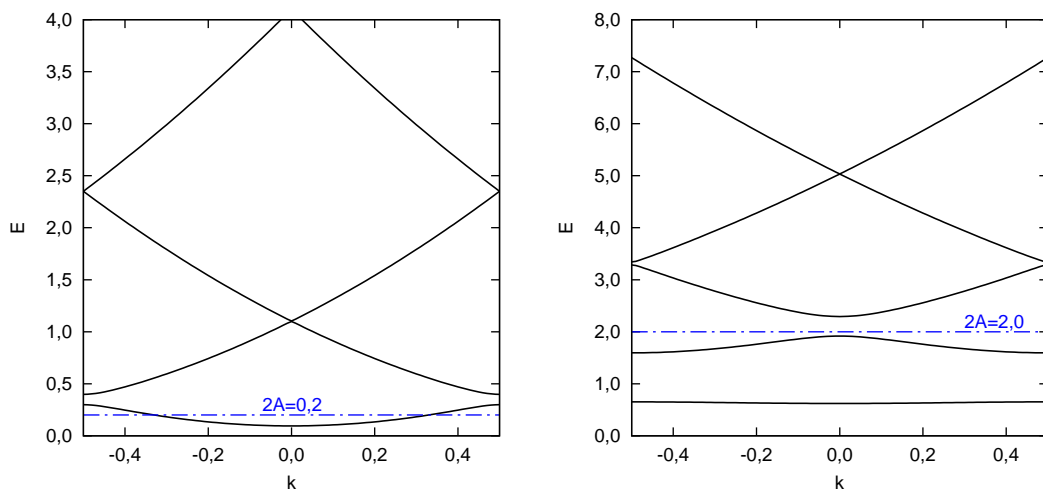
Obrázek 1.2: Energetické hladiny pro $A = 0$, porovnání numerického řešení s analytickým řešením pro volnou částici

Nejdůležitějším efektem, který náš potenciál vytváří, je existence zakázaných pásů energie. Na obrázku 1.3 můžeme vidět, že na prvních energetických hladinách je průběh $E(k)$ podobný průběhu pro volnou částici. Největší rozdíl se objevuje na mezních hodnotách k (tedy u hodnot $-0,5$ a $0,5$), kde průběh „odchlipuje“ od průběhu volné částice a vytváří zakázaný pás. Toto „odchlípení“ je tím větší, čím je větší parametr A a tím větší je tedy a velikost zakázaného pásu.

Na obrázku 1.4 jsou vykresleny hodnoty i pro vyšší hladiny a pro $A = 0,1; 1,0; 10,0$. Zde je dobře vidět, co se děje s energetickými hladinami, které překročí hranici potenciálu (maximální hodnota potenciálu V je $2A$), která je zde také vyznačená. Do této úrovně se vytváří zřetelné zakázané pásy, od této úrovně se již zvolna navrácí charakter volné částice (tedy průběh $E = k^2$).

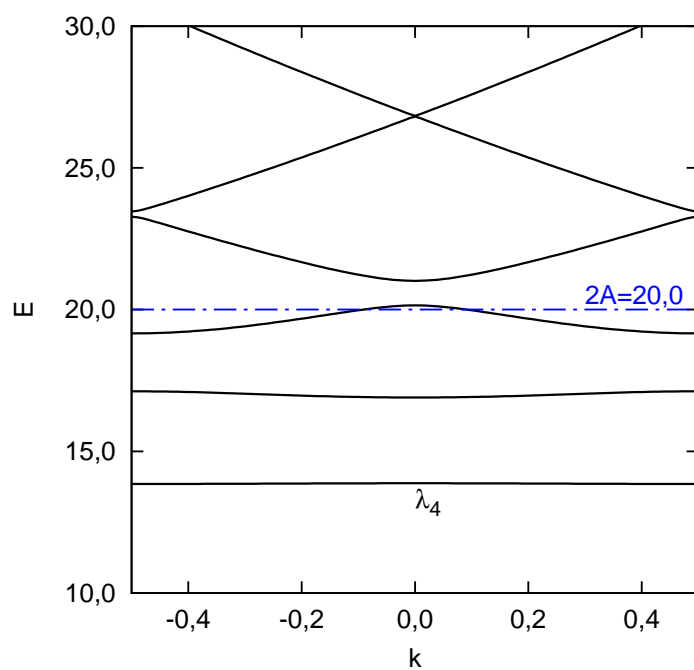


Obrázek 1.3: První dvě energetické hladiny pro $A = 0;0,1;0,5;1$



(a) $A = 0,1$

(b) $A = 1,0$



(c) $A = 10,0$; od čtvrté hladiny

Obrázek 1.4: Energetické hladiny

2. Asociativní odtržení v optické mřížce

Hlavní částí mé práce je zkoumání reakce (2) v přítomnosti optické mřížky. Náš myšlenkový experiment vypadá následovně. Pole periodického potenciálu (vytvořeného stojatými elektromagnetickými vlnami z interakce laserových paprsků) sestaví z neutrálních atomů B mřížkovou strukturu (v našem modelu jednorozměrnou). Nyní do takto připravené struktury vpustíme nabitý iont A^- , který se může (dle vztahu (2)) sloučit s atomem B na molekulu AB a emitovat elektron.

2.1 Parametrizace modelu

Jak jsem zmínil v úvodu asociativní odtržení elektronu popíšu komplexním potenciálem podle vztahu (4).

Reálná část tohoto potenciálu je stejného tvaru jako v předešlé kapitole (tedy dle vztahu (1.4)), neboť taktéž popisuje pohyb částice v optické mřížce. Pro velikost parametru A vycházíme z následující úvahy. Periodický potenciál popsáný parametrem A' je užit pro sestavení mřížky z atomů B . Po sestavení mřížky a před samotným vpuštěním iontu A^- změním parametr potenciálu na hodnotu A (např. zcela vypneme elektromagnetické působení nastavením $A = 0$). Neutrální atomy, z důvodu vlastní setrvačnosti, budou po jistý čas setrvávat v mřížkovém uskupení, ve kterém proběhne zkoumaný myšlenkový experiment. Parametr A tedy bude stále volitelný, nezávisle na struktuře mřížky z atomů B .

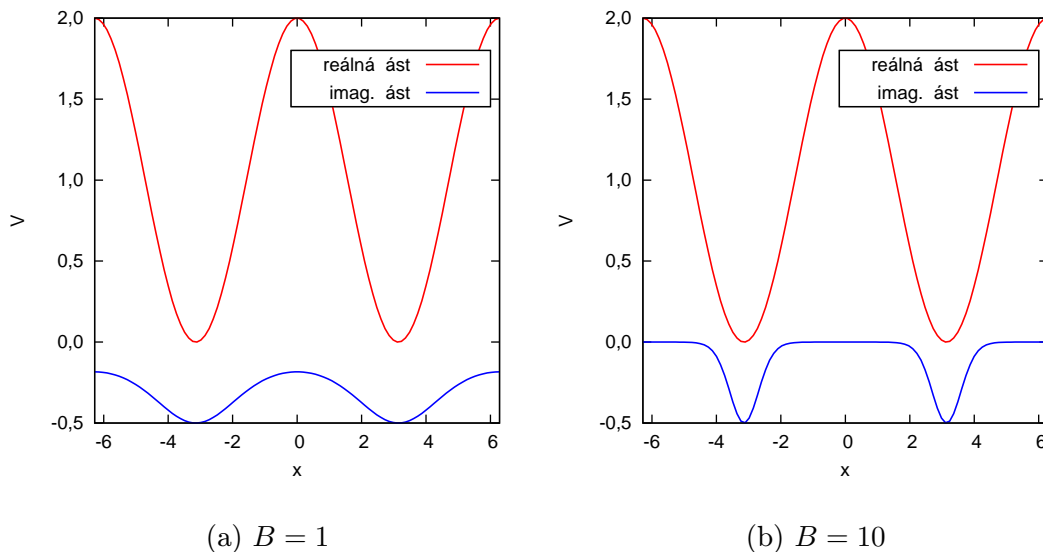
Imaginární část potenciálu budeme volit jako

$$\Gamma = L \cdot e^{-B(\cos^2(\frac{x}{2}))}. \quad (2.1)$$

V tomto případě popisujeme dislokovaný atom B podle normálního rozdělení $\exp(-y^2)$. Parametr L určuje hloubku komplexního potenciálu (lokální šířka Γ se odečítá od reálného potenciálu, viz (4), a platí $\Gamma \in (0; L]$). Parametr B pak určuje šířku normálního rozdělení (a tedy dislokovanost neutrálního atomu), a to v tom smyslu, že nižší hodnoty B popisují více delokalizovaný atom. Parametry L a B jsou dány vlastnostmi neutrálního atomu a pravděpodobností interakce iontu a atomu. V našem modelu je budeme volit v přiměřených hodnotách $L \in [0,1; 10]$ a $B \in [0,1; 10]$.

Nakonec potřebujeme ve funkci Γ zachovat periodičnost potenciálu V . To jsme zajistili užitou substitucí $y = \cos(x/2)$ v použitém normálním rozdělení. Funkce daná vztahem (2.1) má periodu 2π a pokud je záporně vzatá (tak jak ji bereme v komplexním potenciálu) má minima v minimu funkce $V_r(x) = A[\cos(x) + 1]$ (tedy reálnému periodickému potenciálu optické mřížky).

Průběh imaginární složky potenciálu je (v porovnání s reálnou složkou potenciálu) zobrazen na obrázku 2.1.



Obrázek 2.1: Reálná a imaginární složka potenciálu pro $A = 1$; $L = 1$ a B variabilní

2.2 Diagonalizace obecně nehermitovské matice

Postup řešení Schrödingerovy rovnice popsany v podkapitolách 1.1 až 1.3 lze užít i pro variantu obecně komplexního potenciálu¹. Řešíme tedy rovnice (1.8), kde je matice Hamiltoniánu dána vztahem (1.9). Zásadní rozdíl je, že užitý potenciál je obecně komplexní a výsledná matice Hamiltoniánu H_{nm} je obecně nehermitovská. To vidíme z definice matice V_{nm} a z tvaru užitého potenciálu²:

$$V_{nm} = \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^{2\pi} e^{-inx} V_r(x) e^{imx} dx - \frac{i}{2} \int_0^{2\pi} e^{-inx} \Gamma(x) e^{imx} dx \right] = \frac{1}{2\pi} \left[V_{rnm} - \frac{i}{2} \Gamma_{nm} \right],$$

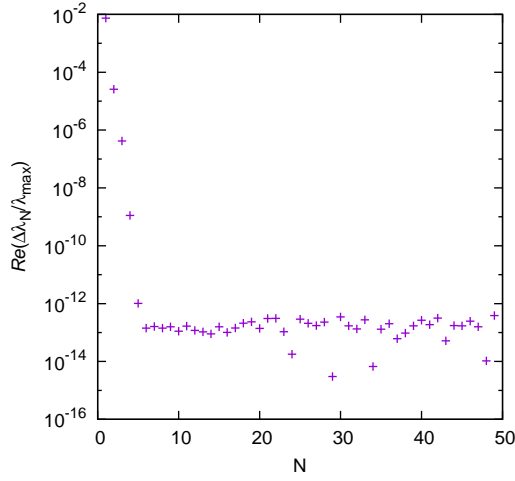
$$\overline{V_{mn}} = \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^{2\pi} e^{imx} V_r(x) e^{-inx} dx + \frac{i}{2} \int_0^{2\pi} e^{+imx} \Gamma(x) e^{-inx} dx \right] = \frac{1}{2\pi} \left[V_{rnm} + \frac{i}{2} \Gamma_{nm} \right].$$

Pro řešení diagonalizace H_{nm} nám již nebude stačit jednoduchá Jacobiho metoda. Pro diagonalizaci užijeme proceduru ze softwarového balíku EISPACK pro diagonalizaci obecné komplexní matice. Výsledná vlastní čísla pak budou řadit podle velikosti reálné složky (první energetická hladina bude mít nejmenší reálnou část energie).

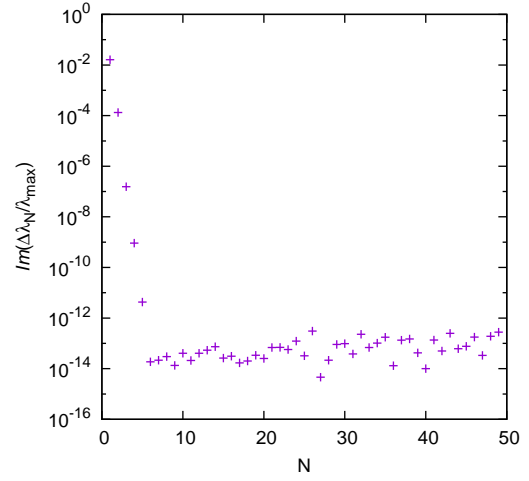
Stejně jako u čistě reálného problému je nutné určit jak velké N (stupeň spektrálního rozkladu) postačuje pro řešení daného problému. Na obrázku 2.2 ukazují reálné a imaginární části členu $\Delta\lambda_N/\lambda_{max}$ daného vztahem (1.10) pro různé hodnoty Blochova vlnového vektoru. Podle těchto údajů hodnota $N = 10$ bude stačit pro dostatečně přesné hodnoty a s touto hodnotou budu nadále pracovat.

¹Primární podmínku periodického potenciálu jsme zachovali.

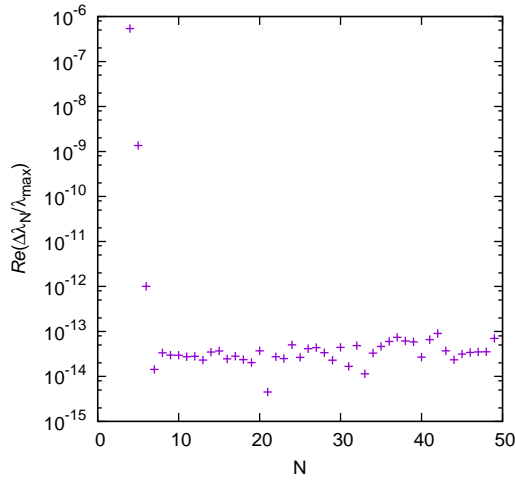
²Využívám toho, že V_r i Γ jsou reálné, a tedy platí $\overline{V_r} = V_r$ a $\overline{\Gamma} = \Gamma$.



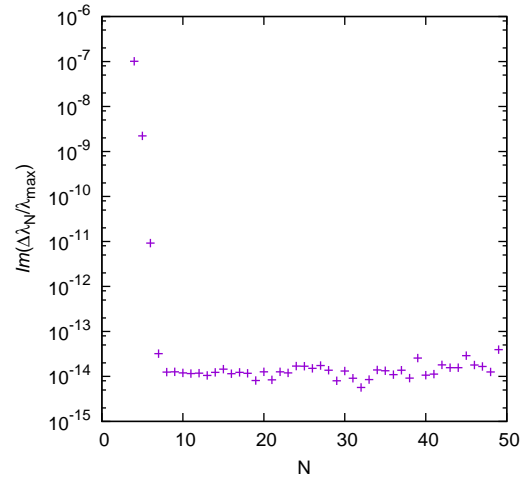
(a) $k = 0,0$; reálná č.; $l = 1$



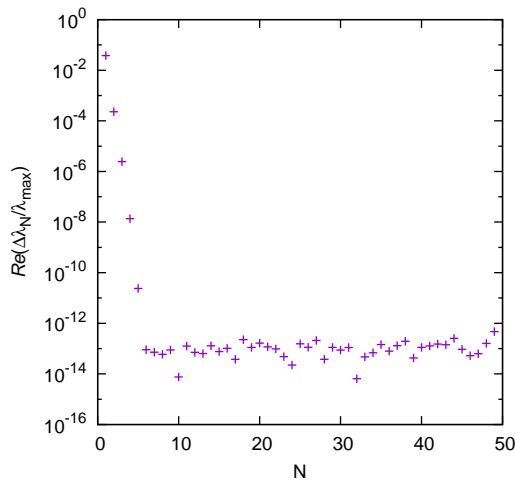
(b) $k = 0,0$; imaginární č.; $l = 1$



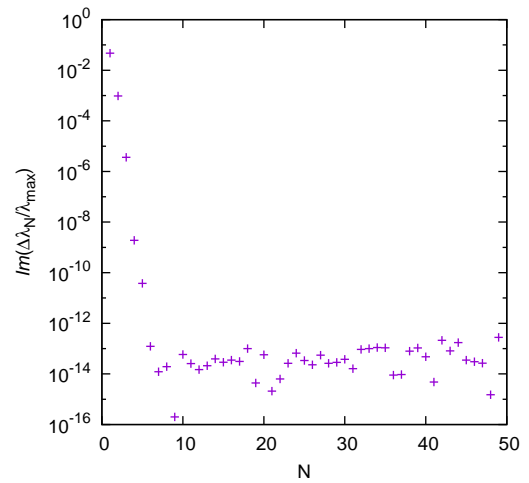
(c) $k = 0,0$; reálná č.; $l = 4$



(d) $k = 0,0$; imag. č.; $l = 4$

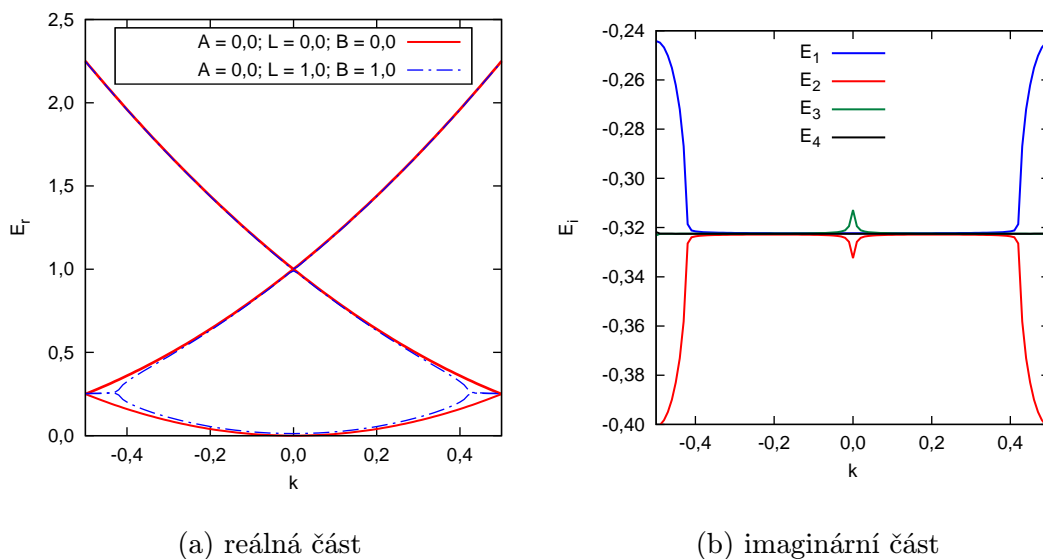


(e) $k = -0,5$; reálná. č.; $l = 1$



(f) $k = 0,5$; imag. č.; $l = 1$

Obrázek 2.2: Nepřesnost numerického řešení, pro komplexní potenciál v závislosti na N , $N_{max} = 50$; $A = 1,0$; $L = 1,0$; $B = 1,0$



Obrázek 2.3: Energetické hladiny pro $A = 0,0$; $L = 1,0$; $B = 1,0$

2.3 Energetické hladiny

Výsledné energetické hladiny mají v tomto případě dvě složky - reálnou a imaginární. Ty budu zobrazovat v závislosti na Blochové vlnové vektoru k , při různě volených parametrech A , L a B . Reálná složka energie má přímý význam energie zkoumané částice. Imaginární složka energie $\gamma = |\text{Im}(E_l(k))|$ (imaginární složka potenciálu je volna záporně, budeme tedy předpokládat záporné hodnoty imaginární složky energie) souvisí se střední dobou života τ vztahem (viz např. Sakurai, 1994, kap. 5.8)

$$\gamma = \frac{\hbar}{\tau}.$$

Imaginární část energie je tedy nepřímo úměrná střední době života a bude charakterizovat reakční rychlost pro odtržení elektronu (za vzniku molekuly AB) v daném stavu.

2.3.1 Nulový reálný potenciál

Základním řešeným problémem bude situace s nulovou reálnou složkou potenciálu (tedy $A = 0$). Tomuto stavu odpovídá situace kdy po vytvoření optické mřížky s neutrálními atomy úplně vypneme laserové paprsky a tedy kompletně zrušíme stojaté elektromagnetické vlnění. Do takto vzniklé mřížky z neutrální atomů posíláme nabitě ionty a pozorujeme interakce.

Základní výsledky pro hodnoty parametrů $L = 1$ a $B = 1$ shrnuje obrázek 2.3. Průběh reálné složky (první část obrázku) se zde, podle očekávání, příliš neliší od výsledků pro volnou částici (viz obr. 1.2) — a to zvláště na vyšších energetických hladinách — a nevytvářejí se zde žádné zakázané pásy. Navíc vidíme, že zde existuje tendence nepřekračovat energii volné částice a pro první hladinu v oblasti $k \in [-0,5; -0,4]$ a $k \in [0,4; 0,5]$ je energie téměř konstantní.

V druhé části obrázku 2.3 vidíme imaginární složky prvních čtyř energetických hladin ($\text{Im}(E_l)$ pro $l = 1,2,3,4$). Ukazuje se, že imaginární složky energie závisí

na Bochově vektoru k jen velmi slabě, až na extrémních případy v okolí hodnot $k = -0,5; 0; 0,5$. Dále vidíme, že s vyššími energetickými hladinami se postupně imaginární složka srovnává na konstantu i v těchto extrémních případech.

Pokud budeme předpokládat, že imaginární část potenciálu je dostatečně menší než reálná část, můžeme ji popsat tzv. poruchovou teorií (kap. 5 Sakurai, 1994, viz např.). V takovém případě rozdíl reálného výsledku oproti řešení bez imaginárního členu je v prvním přiblížení dán vztahem

$$\Delta E = \langle \psi | \frac{i}{2} \Gamma | \psi \rangle, \quad (2.2)$$

$$\Delta E = \int_0^{2\pi} \psi(x) \frac{i}{2} \Gamma \overline{\psi(x)} dx, \quad (2.3)$$

$$\Delta E = \frac{i}{2} \int_0^{2\pi} |\psi(x)|^2 \Gamma dx, \quad (2.4)$$

kde ψ je vlnová funkce řešení pro pouze reálný potenciál. Zde vidíme, že v tomto prvním přiblížení (rozdíváme pouze do prvního řádu) je změna způsobená imaginárním potenciálem ryze imaginární (Γ a $|\psi(x)|^2$ jsou kladné funkce) a je záporná. To vysvětluje malou změnu reálné části energetické hladiny pro nízké, až středně velké hodnoty L (při porovnání s velikostí parametru A).

Pokud do vztahu (2.2) dosadíme vlnovou funkci volné částice $\psi(x) = \exp(ikx)$ dostaneme výsledek

$$\Delta E = \int_0^{2\pi} e^{ikx} \frac{i}{2} \Gamma e^{-ikx} dx = \frac{i}{2} \int_0^{2\pi} \Gamma dx.$$

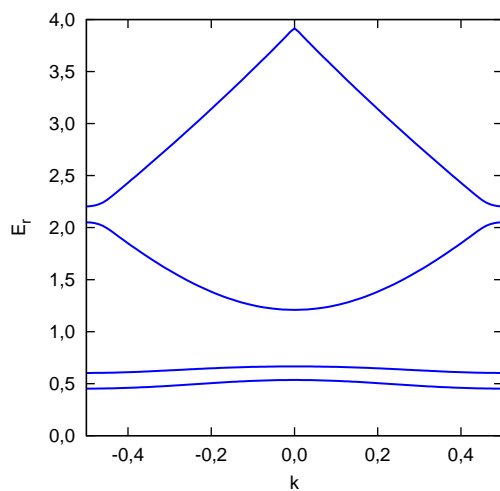
Imaginární část energie je v prvním přiblížení pro stavy podobné volné částici nezávislá na vlnovém vektoru k . To vysvětluje nízkou závislost imaginární složky energie na obr. 2.3 na k (z reálné složky vidíme obdobné chování jako u volné částice) a také postupné srovnávání na konstantní hodnotu u vyšších hladin (vyšší hladiny se stále více chovají jako volná částice).

Na obrázku 2.4 vidíme energetické hladiny pro situaci s vyšší imaginární složkou potenciálu ($L = 10$) oproti reálné složce. Zde již dochází k vytváření zakázaných pásů v reálném energetickém spektru. Avšak opět se u vyšších hladin objevuje návrat k chování volné částice. V imaginární složce vidíme, že vyšší hodnota parametru L vede k vyšší velikosti imaginární složky energie a k rozšíření vzdálenosti mezi jednotlivými hladinami.

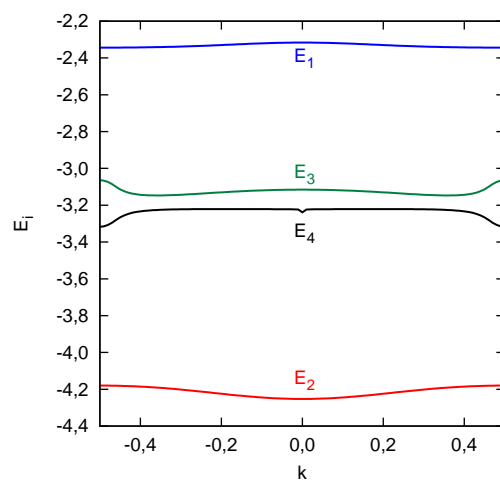
Na obrázku 2.5 vidíme situaci pro vyšší hodnotu parametru $B = 10$. Zde vidíme, že vyšší hodnota B způsobuje nižší hodnotu imaginární složky energie, ale naopak dochází k výraznějším extrémům v okolí bodů $k = -0,5; 0; 0,5$.

Na obrázcích 2.6 a 2.7 pak vidíme porovnání vlivů parametru B (respektive L) na jednotlivé hladiny.

Vyšší hodnota parametru B , tedy nižší míra delokalizace neutrálního atomu, vede k nižším hodnotám v imaginární složce energie, a tedy k nižší reakční rychlosti. Zajímavé je pozorování extrémních hodnot pro krajní hodnoty vlnového vektoru u první hladiny. Imaginární složka energie (u první hladiny) je téměř nezávislá na vlnovém vektoru k , až od jisté mezní hodnoty (jak pro záporné tak pro kladné hodnoty k) začne velikost energie klesat. Velikost této mezní hodnoty s vyšší hodnotou parametru B klesá, ale jen do hodnoty $B \approx 4$. Od této hodnoty

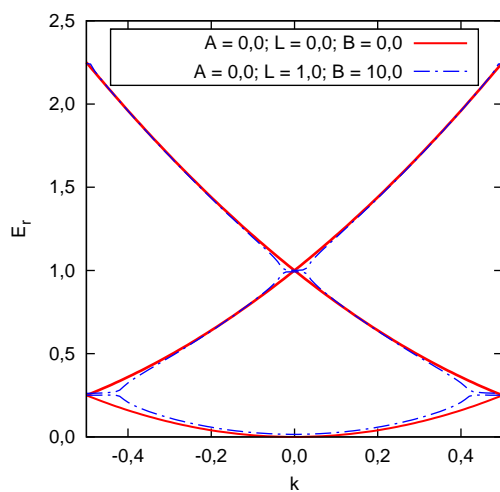


(a) reálná část

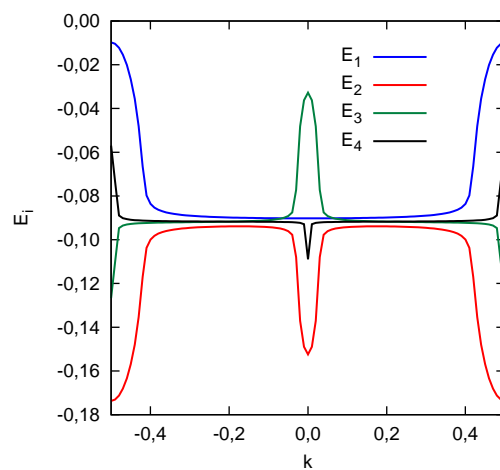


(b) imaginární část

Obrázek 2.4: Energetické hladiny pro $A = 0,0$; $L = 10,0$; $B = 1,0$

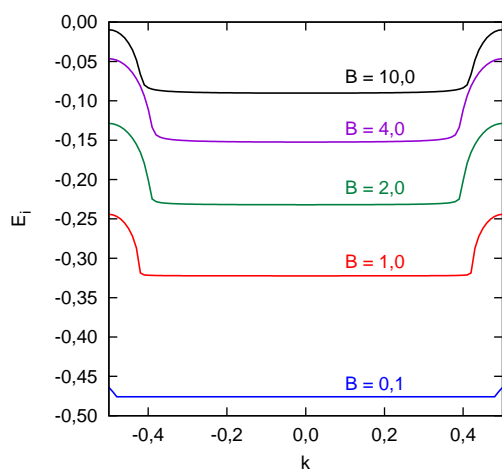


(a) reálná část

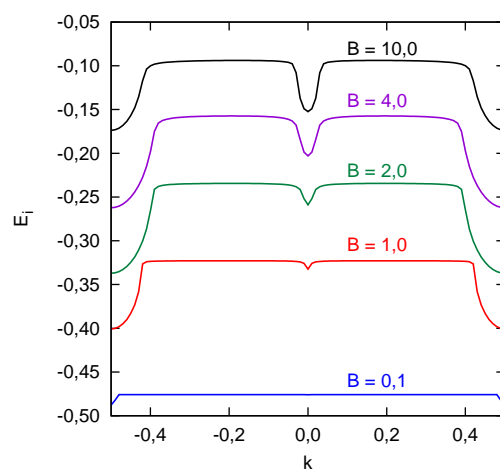


(b) imaginární část

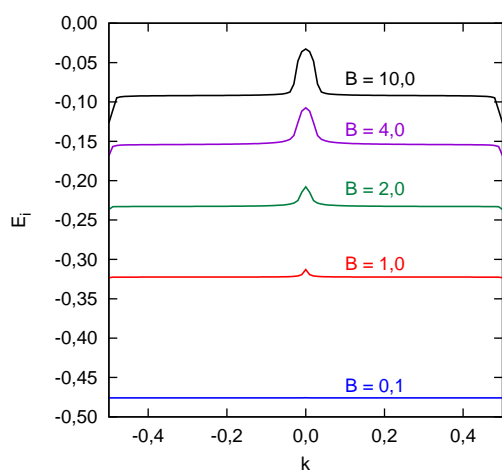
Obrázek 2.5: Energetické hladiny pro $A = 0,0$; $L = 1,0$; $B = 10,0$



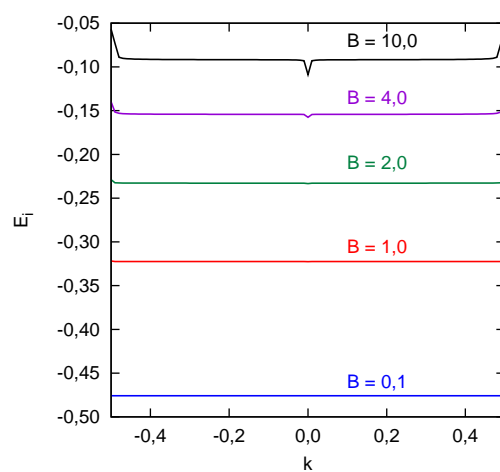
(a) první hladina



(b) druhá hladina

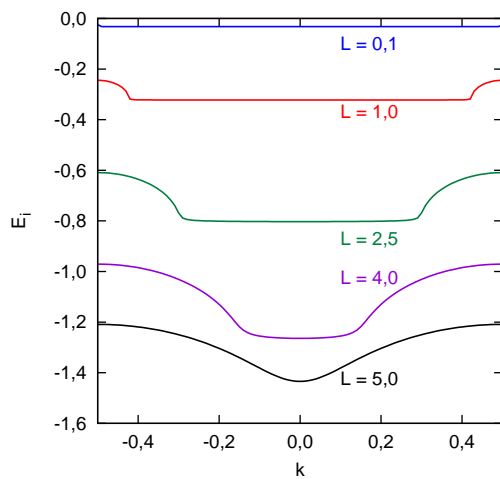


(c) třetí hladina

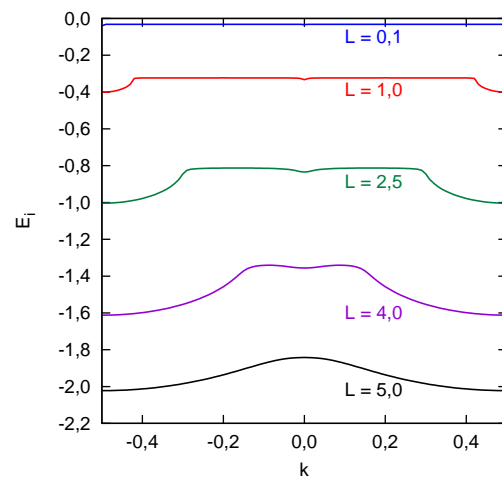


(d) čtvrtá hladina

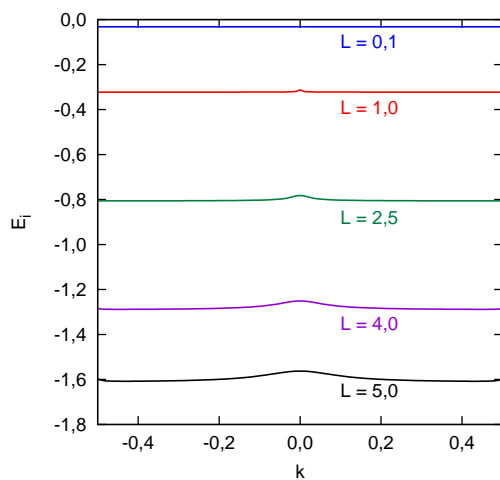
Obrázek 2.6: Porovnání imaginární části energetických hladin ($n = 1; 2; 3; 4$) pro různé hodnoty B . $A = 0,0$; $L = 1,0$



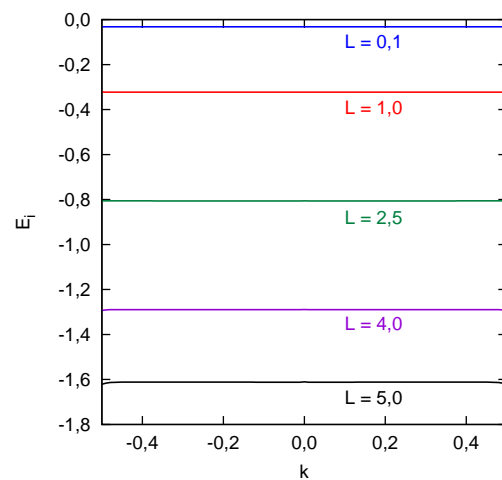
(a) první hladina



(b) druhá hladina

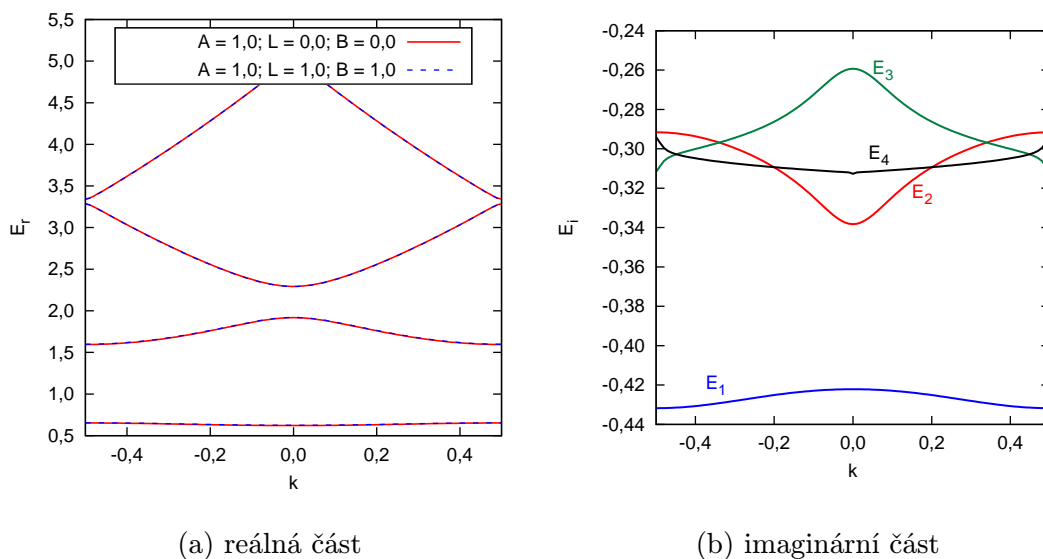


(c) třetí hladina



(d) čtvrtá hladina

Obrázek 2.7: Porovnání imaginární části energetických hladin ($n = 1; 2; 3; 4$) pro různé hodnoty L . $A = 0,0$; $B = 1,0$



Obrázek 2.8: Energetické hladiny pro $A = 1,0$; $B = 1,0$; $L = 1,0$

opět tato mezní hodnota k pozvolna roste. Podobný jev lze pozorovat i u druhé hladiny.

Zvyšování parametru L , popisující hloubku imaginárního potenciálu, vede ke zvyšování velikosti imaginární složky energie, a tedy reakční rychlosti odtržení elektronu. Navíc můžeme vidět, že s vyšší hodnotou L je imaginární složka energie více závislá na hodnotě vlnového vektoru k .

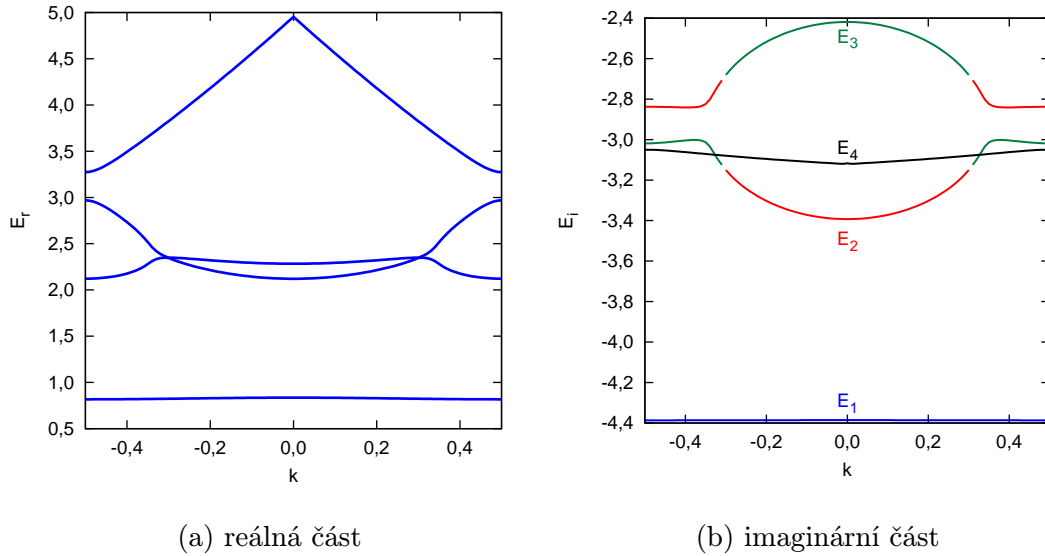
2.3.2 Řešení pro $A = 1,0$

Nyní se podívám na obecný problém s působícím elektromagnetickým polem (charakterizovaným parametrem A , nyní voleným na hodnotu 1) a s možností asociativního odtržení elektronu.

Základní situaci pro $A = 1$; $L = 1$ a $B = 1$ popisuje obrázek 2.8. Reálné složky v podstatě velmi přesně odpovídají situaci bez imaginárního členu. Při bližším zkoumání je reálná část energie posunutá o cca. 1% oproti systému bez imaginární složky.

U imaginární složky energie je nejvýznamnějším rozdílem oproti situaci s nulovým potenciálem nárůst velikosti imaginární složky první hladiny. Největší míra interakcí by tedy měla nastávat pro částice na první energetické (a tedy nejméně energetické) hladině. V situaci s absencí reálné složky potenciálu naopak měla první hladina energii téměř nejmenší. Dále oproti situace bez reálného potenciálu je zde již výraznější závislost imaginární složky energie na Blochově vektoru pro nižší hodnoty (opět postupně dochází k postupnému srovnávání na konstantní hodnotu).

Zajímavé odchylky nastávají v situacích kdy je velikost imaginární složky výraznější než velikost reálné složky. Takovouto konfiguraci je vidět na obrázku 2.9 (pro $A = 1$ a $L = 10$). Zde, kromě běžného zvyšování hladiny, dochází k efektu na pomezí druhé a třetí hladiny. Dochází k vymizení zakázaného pásu mezi druhou a třetí hladinou. Od vyšších hladin pak opět navazuje charakter odpovídající situaci bez imaginárního členu (resp. se postupně navrácí charakter



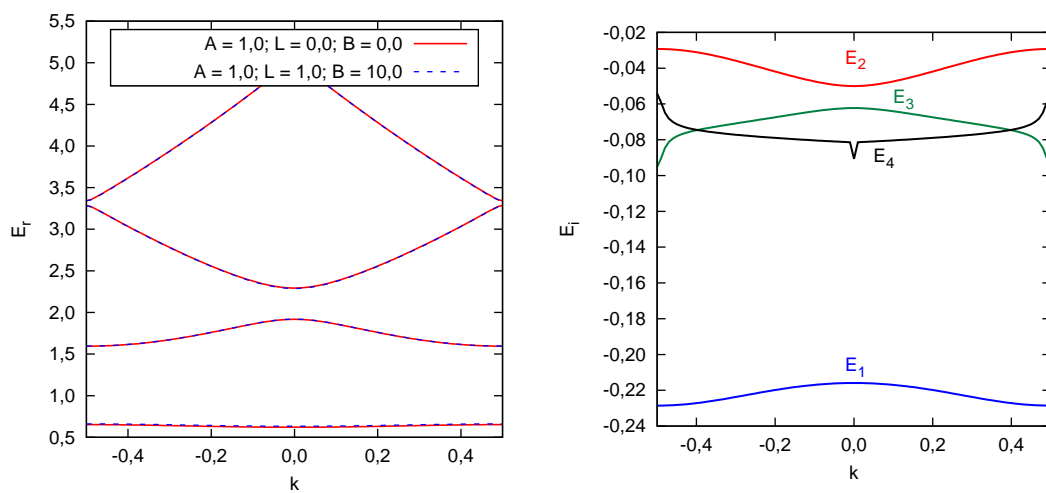
Obrázek 2.9: Energetické hladiny pro $A = 1,0$; $B = 1,0$; $L = 10,0$

volné částice).

U této situace s vysokou hodnotou parametru L nám nastává zvláštní efekt spojený s tříděním vlastních čísel podle velikosti reálné složky. Neboť třídím energetické hladiny tak aby třetí hladina byla pro každý vlnový vektor k větší než druhá hladina dojde v imaginární složkách energie na hodnotě vlnového vektoru $k = \pm 0,3$ ke „skoku“. Přesnějším popisem by asi bylo zespojitění hodnot imaginární složky energie v jedné hladině, kvůli čemuž by pak druhá hladina měla v intervalu $k \in [-0,3; 0,3]$ vyšší hodnoty reálné složky energie než hladina třetí.

Zajímavé jsou i specifické konfigurace s vysokou hodnotou parametru B , viz obrázek 2.10: U imaginární složky energie vidíme, že druhá hladina má nižší absolutní velikost než třetí hladina (oproti případu s $B = 1$ a všem případům s $A = 0$). Naopak už nepozorujeme efekt přimykání energetických hladin ke konstantní hodnotě při zvyšování parametru B . Reálná složka energie naopak velmi dobře odpovídá situaci bez imaginární složky potenciálu.

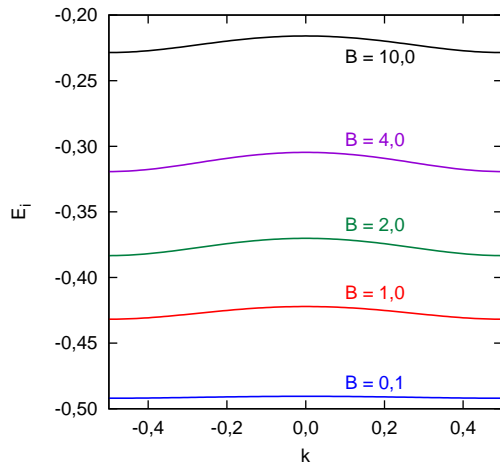
Na obrázcích 2.11 a 2.12 můžeme porovnávat vlivy parametrů B (resp. L) na jednotlivé hladiny. V podstatě jsou zde pozorovatelné všechny efekty, které byly popsány výše u situace s nulovým reálným potenciálem (obr. 2.6 a 2.7). Např. můžeme dobře pozorovat, že s rostoucím parametrem B , křivka imaginární energetické hladiny více zakřivuje, ale opět jen do jisté hodnoty $B \approx 4$. Poté se opět přibližuje konstantní charakteristice (dobře pozorovatelné u druhé a třetí hladiny).



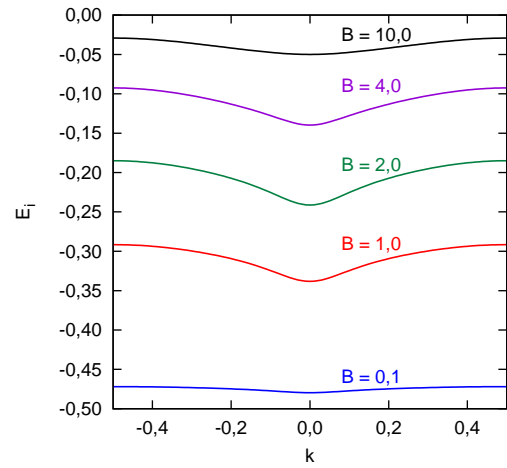
(a) reálná část

(b) imaginární část

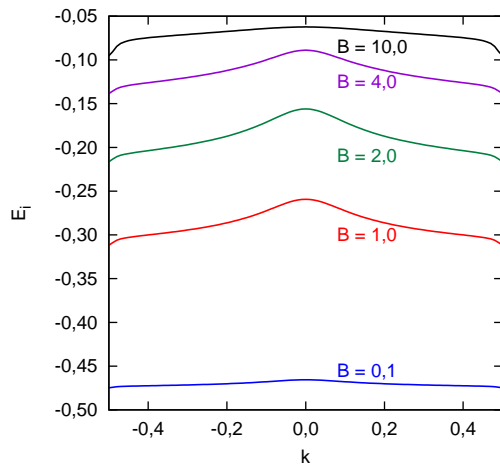
Obrázek 2.10: Energetické hladiny pro $A = 1,0; B = 10,0; L = 1,0$



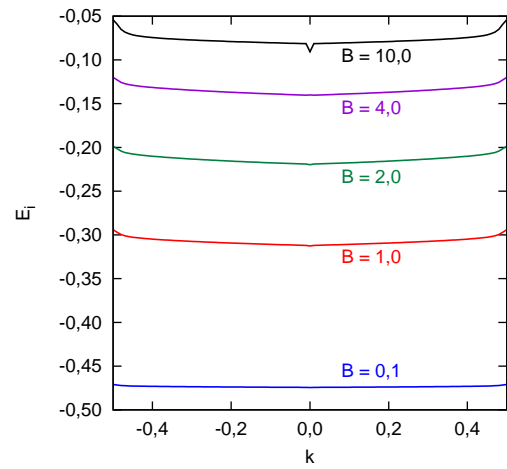
(a) první hladina



(b) druhá hladina

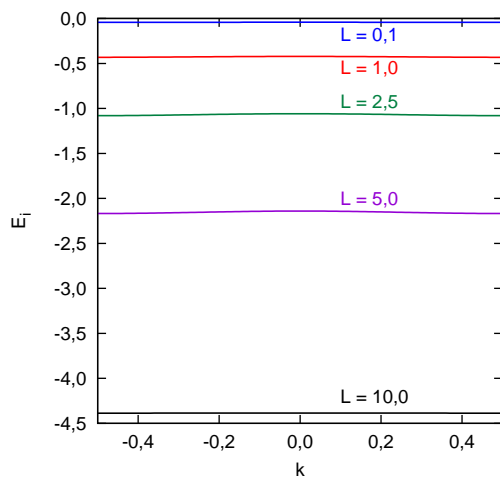


(c) třetí hladina

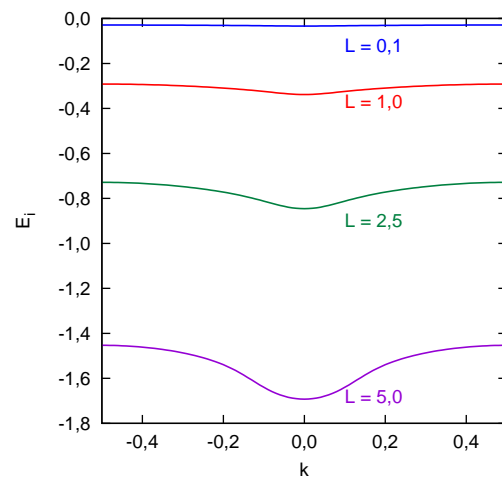


(d) čtvrtá hladina

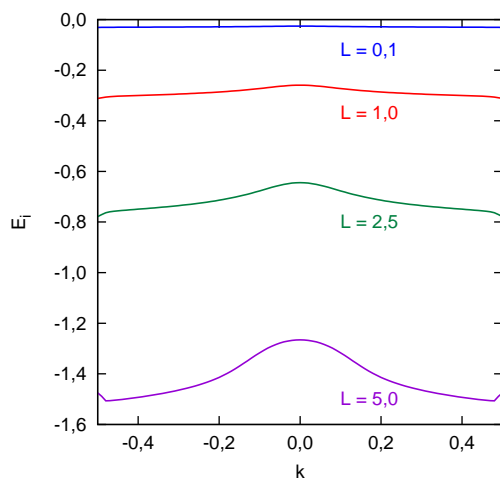
Obrázek 2.11: Porovnání imaginární části energetických hladin ($n = 1; 2; 3; 4$) pro různé hodnoty B . $A = 1,0$; $L = 1,0$



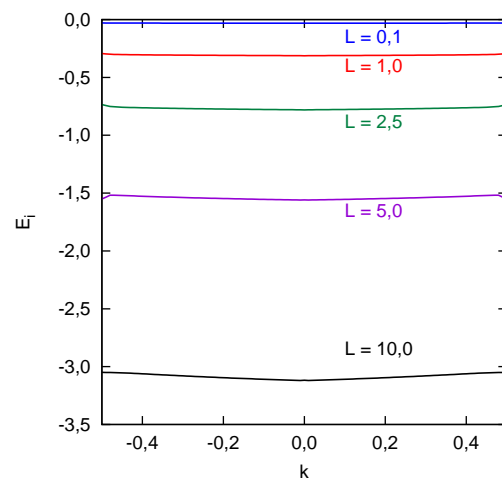
(a) první hladina



(b) druhá hladina



(c) třetí hladina



(d) čtvrtá hladina

Obrázek 2.12: Porovnání imaginární části energetických hladin ($n = 1; 2; 3; 4$) pro různé hodnoty L . $A = 1,0$; $B = 1,0$

Závěr

Nejdřív jsem numericky vyřešil model částice (neutrálního atomu, nebo iontu) v periodickém potenciálu (reprezentující optickou mřížku). K tomu jsem nejdřív upravil hamiltonián do vhodné podoby dané symetrií problému (užitím Blochova teorému) a pro potřeby numerické metody jsem provedl spektrální rozklad takto sestaveného hamiltonova operátoru do konečné báze. Správnost použitých metod jsem následně testoval pro stavy volné částice (viz. obr. 1.2).

Následně jsem se zabýval interakcí iontu s neutrálním atomem v takovéto optické mřížce. Tu jsem popsal přidáním imaginárního členu Γ k potenciálu. Takovýto potenciál vytváří obecně nehermitovský hamiltonián (sestavený obdobně jako problém s reálným potenciálem), který jsem řešil diagonalizační metodou pro obecnou komplexní matici.

Převážně jsem se zabýval vlivem tří parametrů popisující komplexní potenciál — velikost reálné části potenciálu A , velikost imaginární části potenciálu L a míra dislokovanosti neutrálního atomu B — na energetické hladiny, při rozlišení reálné složky (přímá energie částice) a imaginární složky (reakční rychlost pro odtržení elektronu).

Pro další rozšíření této práce by bylo vhodné analyzovat vlastní vlnové funkce, příslušející studovaným energetickým hladinám.

Dalším navázání na řešení tohoto problému by mohlo být studium uvolňovaných elektronů. Bylo by možné modelovat, nebo respektive přímo experimentálně měřit, interferenci elektronů uvolněných z atomů v sousedních minimech potenciálů.

Zajímavým aplikovaným výsledkem zkoumání těchto interakcí v optické mřížce by též mohla být aplikace modelu na další studium dynamiky vzniku molekul z atomu zachycených v optické mřížce. Takovým to způsobem by bylo možné hledat způsob vytváření celých molekulových mřížek.

Seznam použité literatury

- BLOCH, I. (2005). Ultracold quantum gases in optical lattices. *Nature Physics*, **1**(1), 23–30. doi: 10.1038/nphys138.
- DVOŘÁK, J. (2015). Elementární atomové srážkové procesy v raném vesmíru. Bakalářská práce, Univerzita Karlova v Praze, Matematicko fyzikální fakulta, Praha.
- PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T. a FLANNERY, B. P. (2007). *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. 3rd ed. Cambridge University Press, New York. ISBN 05-217-0685-8.
- SAKURAI, J. J. (1994). *Modern Quantum Mechanics*. Rev.ed. Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Mass. ISBN 02-015-3929-2.

Seznam obrázků

1.1	Nepřesnost numerického řešení v závislosti na N , $N_{max} = 50$	9
1.2	Energetické hladiny pro $A = 0$, porovnání numerického řešení s analytickým řešením pro volnou částici	11
1.3	První dvě energetické hladiny pro $A = 0; 0,1; 0,5; 1$	12
1.4	Energetické hladiny	13
2.1	Reálná a imaginární složka potenciálu pro $A = 1$; $L = 1$ a B variabilní	15
2.2	Nepřesnost numerického řešení, pro komplexní potenciál v závislosti na N , $N_{max} = 50$; $A = 1,0$; $L = 1,0$; $B = 1,0$	16
2.3	Energetické hladiny pro $A = 0,0$; $L = 1,0$; $B = 1,0$	17
2.4	Energetické hladiny pro $A = 0,0$; $L = 10,0$; $B = 1,0$	19
2.5	Energetické hladiny pro $A = 0,0$; $L = 1,0$; $B = 10,0$	19
2.6	Porovnání imaginární části energetických hladin ($n = 1; 2; 3; 4$) pro různé hodnoty B . $A = 0,0$; $L = 1,0$	20
2.7	Porovnání imaginární části energetických hladin ($n = 1; 2; 3; 4$) pro různé hodnoty L . $A = 0,0$; $B = 1,0$	21
2.8	Energetické hladiny pro $A = 1,0$; $B = 1,0$; $L = 1,0$	22
2.9	Energetické hladiny pro $A = 1,0$; $B = 1,0$; $L = 10,0$	23
2.10	Energetické hladiny pro $A = 1,0$; $B = 10,0$; $L = 1,0$	24
2.11	Porovnání imaginární části energetických hladin ($n = 1; 2; 3; 4$) pro různé hodnoty B . $A = 1,0$; $L = 1,0$	25
2.12	Porovnání imaginární části energetických hladin ($n = 1; 2; 3; 4$) pro různé hodnoty L . $A = 1,0$; $B = 1,0$	26