



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Ondřej Basler

**Numerický výpočet rozptylové délky při
srážkách atomů**

Ústav teoretické fyziky

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

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2016/2017

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) 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: Numerický výpočet rozptylové délky při srážkách atomů

Autor: Ondřej Basler

Ústav: Ústav teoretické fyziky

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

Abstrakt: Cílem této bakalářské práce je srovnat numerické metody pro výpočet rozptylové délky při srážkách atomů. Porovnááme výsledky vypočítané pomocí metody přímé integrace Schrödingerovy rovnice, metody fázové funkce, řešení Riccatiho rovnice pro rozptylovou délku a metodu vnějšího škálování. Metody používáme pro modelový potenciál založený na exponenciálním útlumu a empirickém potenciálu Cs-Cs dimeru. Vypočítané rozptylové délky dále srovnáváme s výsledky od jiných autorů.

Klíčová slova: rozptyl, rozptylová délka, externí komplexní škálování, metoda fázové funkce

Title: Numerical determination of the scattering length for atomic collisions

Author: Ondřej Basler

Institute: Institute of Theoretical Physics

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

Abstract: The goal of this bachelor thesis is to compare numerical methods designed for the determination of scattering length for atomic collisions. We compare numerical solutions calculated by the method of direct integration of the Schrödinger equation, the variable phase equation, the Riccati equation for the scattering length and the method of exterior complex scaling. Methods are tested on the exponential potential and the empirical potential of the Cs-Cs dimer. Calculated scattering lengths are further compared with results from other authors.

Keywords: scattering, scattering length, exterior complex scaling, Variable phase equation

Rád bych poděkoval RNDr. Karlu Houfkovi, Ph.D. za seznámení s metodou vnějšího komplexního škálování a odborné vedení bakalářské práce.

Obsah

Úvod	2
1 Teorie	3
1.1 Rozptyl na sféricky symetrickém potenciálu a fázové posunutí . . .	3
1.2 Přiblížení efektivního poloměru	4
1.3 Metoda fázové funkce	4
1.3.1 Riccatiho rovnice pro rozptylovou délku	5
2 Numerické metody	6
2.1 Numerické řešení ODR	6
2.1.1 Bulirschova-Stoerova metoda	6
2.1.2 Řešení Riccatiho rovnice pro rozptylovou délku	7
2.2 Vnější komplexní škálování	8
3 Výsledky	10
3.1 Modelový potenciál	10
3.1.1 Přímá integrace Schrödingerovy rovnice	10
3.1.2 Metoda fázové funkce	12
3.1.3 Metoda vnějšího komplexního škálování	15
3.1.4 Srovnání	17
3.2 Potenciál Cs-Cs	18
3.2.1 Přímá integrace Schrödingerovy rovnice	18
3.2.2 Metoda fázové funkce	20
3.2.3 Metoda vnějšího komplexního škálování	21
3.2.4 Srovnání a diskuze metod	22
Závěr	25
Seznam použité literatury	26
Seznam obrázků	27

Úvod

Rozptylová délka a_0 je klíčový parametr při popisu srážek částic při velmi nízkých teplotách. V případě nízkenergetických dvoučásticových srážek lze pomocí ní vyjádřit celkový účinný průřez $\sigma = 4\pi a_0^2$ a mnoho vlastností Boseho-Einsteinova kondenzátu je popsáno pouze rozptylovou délkou. Například chemický potenciál Boseho-Einsteinova plynu je přímo úměrný rozptylové délce $\mu_{Bose} = 4\pi a_0 \frac{n}{m}$, kde n je hustota částic a m je atomová hmotnost.

Z experimentů na ultra chladných atomech lze zkonstruovat spolehlivé empirické molekulární potenciály. Rovnice pro tyto potenciály nemají obecně analytická řešení, a tak je nutné najít robustní, rychlou a vysoce přesnou metodu výpočtu rozptylové délky tak, abychom byli následně schopní například získat derivace rozptylové délky vzhledem k parametrům potenciálu.

Existuje mnoho možných cest k sestavení robustní metody, a to od přímé integrace Schrödingerovy rovnice pro nulovou energii až po extrapolativní metody. V této práci se zaměříme na některé již zavedené metody a na testovacím a empirickém potenciálu zjistíme, jak jsou přesné.

V celé práci používáme pro přehlednost atomové jednotky (a.u.).

1. Teorie

1.1 Rozptyl na sféricky symetrickém potenciálu a fázové posunutí

Při rozptylu na sférickém potenciálu hledáme řešení jednočásticové Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{1}{2\mu}\Delta\psi + V(r)\psi = E\psi \quad (1.1)$$

s okrajovou podmínkou

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} N \left(e^{ikz} + f(k) \frac{e^{ikr}}{r} \right), \quad (1.2)$$

kde $f(k)$ je amplituda rozptylu a N je normalizační konstanta. Jelikož řešení jednočásticové Schrödingerovy rovnice ze symetrie nezávisí na úhlu ϕ , můžeme řešení hledat ve formě parciálních vln

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} u_l(r) \frac{P_l(\cos(\theta))}{r}, \quad (1.3)$$

kde P_l jsou Legendery polynomy a θ je úhel. Dosazením (1.3) do Schrödingerovy rovnice (1.1) vyjádřené ve sférických souřadnicích získáme rovnici pro parciální řešení $u_l(r)$

$$\left(-\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2\mu} \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E \right) u_l(r) = 0, \quad (1.4)$$

kde $V(r)$ je efektivní potenciál interakce. Pro $r \rightarrow \infty$ platí, že potenciál $V(r)$ je utlumen (v celé práci budeme předpokládat, že $V(r)$ klesá rychleji než $\frac{1}{r^2}$) a částice se chová jako volná částice s fázovým posunem δ_l

$$u_l(r) \propto \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right). \quad (1.5)$$

Amplituda rozptylu $f(k)$ je v reprezentaci parciálních vln dána následovně

$$f(k) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos(\theta)), \quad (1.6)$$

kde $f_l(k)$ je parciální amplituda rozptylu, kterou je možné vyjádřit pomocí fázového posunutí

$$f_l(k) = (2l+1) i^l e^{i\delta_l}. \quad (1.7)$$

Uveďme ještě, že pro sféricky symetrický potenciál obvykle platí, že fázový posun $\delta_l(k)$ splňuje Levinsonův teorém ve tvaru

$$\delta_l(0) - \delta_l(\infty) = n_l \pi, \quad (1.8)$$

kde n_l je počet vázaných stavů s daným momentem hybnosti l [1].

1.2 Přiblížení efektivního poloměru

Fázové posunutí obsahuje důležitou informaci o rozptylu a lze z něho získat mnohé užitečné parametry rozptylu. Pomocí teorie Jostovy funkce [2], lze odvodit, že pokud zkoumaný potenciál je omezeného dosahu nebo exponenciálně tlumený, následující rozvoj pro funkci fázové posunutí

$$k^{2l+1} \cot \delta_l(k) = -\frac{1}{a_l} + \frac{1}{2}r_l k^2 + O(k^4), \quad (1.9)$$

v němž a_l je rozptylová délka a r_l je efektivní poloměr interakce. Rozvoj (1.9) se zanedbáním veličin $O(k^4)$ je nazýván přiblížením efektivního poloměru (ERT).

Pro dalekodosahové potenciály (s dominantním členem r^{-n}) je situace obtížnější a přiblížení (1.9) obecně neplatí. Pro „van der Waalsovy“ potenciály s dalekodosahovou složkou $\approx r^{-6}$ lze v případě $l = 0$ nalézt podobný rozvoj v k jako (1.9), který se obvykle nazývá modifikované přiblížení efektivního poloměru (MERT) [3]

$$\frac{1}{k} \tan \delta_0(k) = -a_0 - \frac{1}{2}r_0 a_0^2 k^2 + O(k^4). \quad (1.10)$$

Pro obě přiblížení platí, že rozptylová délka a_0 je

$$a_0 = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{k} \tan \delta_0(k). \quad (1.11)$$

Obecně platí, že v případě $l = 0$ má rozptylová délka a_0 rozměr délky, a v případě potenciálů tlumených rychleji než r^{-4} [4] lze rozptylovou délku a_0 definovat pomocí asymptotického chování řešení u_0 rovnice (1.4) pro nulovou energii

$$u_0(r) = \alpha r + \beta, \quad r \rightarrow \infty, \quad (1.12)$$

kde α, β jsou reálné parametry a rozptylová délka je poté dána jako $a_0 = -\frac{\beta}{\alpha}$. Z grafické hlediska je rozptylová délka vzdáleností, kde asymptotické lineární řešení protne radiální osu.

1.3 Metoda fázové funkce

Je možné řešit problém zadaný Schrödingerovou rovnicí (1.4) pro $k, l = 0$ a poté například z asymptotického řešení (1.12) získat rozptylovou délku. Nebo můžeme použít ekvivalentní rovnici pro fázovou funkci $\delta_0(r)$. V druhém případě je nutné použít ořezaný potenciál $V_\rho(r)$ v bodě ρ

$$V_\rho(r) = \begin{cases} V(r) & \text{pro } r \leq \rho \\ 0 & \text{pro } r > \rho. \end{cases} \quad (1.13)$$

Pro tyto funkce je možné ze Schrödingerovy rovnice získat systém ODR 1. řádu pro fázovou funkci [1], [5]

$$\delta_0'(r) = -\frac{1}{k} U(r) \sin^2(kr + \delta(r)) \quad (1.14)$$

s počáteční podmínkou

$$\delta_0(0) = 0, \quad (1.15)$$

přičemž $U(r) = 2\mu V(r)$. Výsledné fázové posunutí δ_0 získáme z fázové funkce limitou $\delta_0(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \delta_0$.

V článku [6] se autoři pokusili o její elementární použití ve spojitosti s Levinsonovým teorémem (1.8) a pro výpočet rozptylové matice S , přičemž jejich výpočty byly pro různé momenty hybností l a vlnová čísla $k > 10^{-2}$. My se budeme zabývat pouze případem s $l = 0$ a vyzkoušíme její použití pro velmi nízké energie tak, abychom získali rozptylovou délku.

1.3.1 Riccatiho rovnice pro rozptylovou délku

Metodu fázové funkce lze prohloubit, a tak autor [5] dále odvodil Riccatiho rovnici přímo pro rozptylovou délku. Vychází z toho, že rozptylová délka splňuje (1.11), což platí i pro fázovou funkci $\delta_0(r)$ a jí odpovídající funkci rozptylové délky $a_0(r)$. Výslednou rozptylovou délku lze získat limitou $a_0(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} a_0$. V následující Riccatiho rovnici používáme notaci $a_c = -a_0$

$$\frac{da_c}{dr}(r) = (r - a_c(r))^2 U(r) \quad (1.16)$$

s okrajovou podmínkou

$$a_c(0) = 0. \quad (1.17)$$

2. Numerické metody

Pro získání rozptylové délky se používá mnoho různých numerických metod. Můžeme je dělit na dva typy, přímé metody pro $k = 0$ a extrapolativní metody pro $k \neq 0$. Metody prvního typu řeší Schrödingerovu rovnici (1.4) anebo její obměny pro nulovou energii a metody druhé typu, řeší problém pro několik malých nenulových k a z těchto řešení poté extrapolací pro $k \rightarrow 0$ získávají s použitím vztahů (1.9), resp. (1.10), rozptylovou délku a_0 .

Problém je vždy zadán ODR na určitém intervalu, počáteční okrajovou podmínku (např. $u_0(0) = 0$) a známým analytickým chováním pro $r \rightarrow \infty$. V případě ECS metody je tato odcházející okrajová podmínka nahrazena Dirichletovou okrajovou podmínkou, kdy $\psi(R_{max}) = 0$, kde R_{max} je konec komplexně škálované kontury. Více naleznete v odstavci 2.2.

2.1 Numerické řešení ODR

Obyčejná diferenciální rovnice (ODR) n -tého řádu lze vyjádřit jako soustava n obyčejných diferenciálních rovnic 1. řádu ve tvaru $y' = f(x, y)$. Pro případ $l = 0$ a $k = 0$ řešíme Schrödingerovu rovnici (1.4) ve tvaru

$$u_0''(r) - U(r)u_0(r) = 0, \quad (2.1)$$

kterou transformujeme do soustavy dvou ODR 1. řádu

$$u'(r) = v(r), \quad (2.2)$$

$$v'(r) = U(r)u(r). \quad (2.3)$$

V tomto případě je již možné použít různé integrátory řešící danou soustavu s počáteční okrajovou podmínkou $u(0) = 0$ a vhodně zvolenou $v(0)$, která určuje normalizaci vlnové funkce.

2.1.1 Bulirschova-Stoerova metoda

Mezi jedny z nejpřesnějších metod řešící soustavu ODR 1. řádu patří Bulirschova-Stoerova metoda [7], [8], která využívá modifikovanou metodu středního bodu a Richardsonovu polynomiální extrapolaci. Její idea spočívá v tom, že propagujeme-li řešení $y(x)$ z bodu x do bodu $x + H$, tak na intervalu $[x, x + H]$, který rozdělíme mezikroky $h = \frac{H}{n}$, můžeme psát následující soustavu rovnic

$$z_0 = y(x), \quad (2.4)$$

$$z_1 = z_0 + hf(x, z_0), \quad (2.5)$$

$$z_{m+1} = z_{m-1} + 2hf(x + mh, z_m) \quad \text{pro } m = 1, 2, \dots, n-1, \quad (2.6)$$

$$y(x + H) \approx y_{n+1} = \frac{1}{2}[z_n + z_{n-1} + hf(x + H, z_n)], \quad (2.7)$$

kde jsme použili metodu středního bodu (2.6). Přičemž lokální diskretizační chyba aproximace y_{n+1} je dána

$$y_{n+1} - y(x + H) = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i h^{2i}. \quad (2.8)$$

Takto se jedná pouze o metodu 2. řádu. Budeme-li ale zvětšovat n tak, že $n \in \{n_j\}_{j=0}^{j_{max}}$, můžeme díky tomu, že rozvoj lokální diskretizační chyby řešení (2.8) je složen jen ze sudých mocnin, kombinací řešení (2.8) eliminovat vyšší řády chyby. Pro samotnou extrapolaci používáme počty mezikroků dané Deuffhardem $n_j = 2(j+1)$ a Aitkenův-Nevillův algoritmus. S každým dalším užitým n_j získáme metodu o 2 řády větší a můžeme tak dosáhnout požadované lokální diskretizační chyby řešení na daném intervalu. Obecně se shora omezuje počet možných řešení tak, aby se v případech, kdy je nutné pro danou přesnost vzít velké množství funkcí y_{n_j} , raději přistoupilo k menšímu kroku H . My máme nastaven počet funkcí na maximální počet $j_{max} = 12$. Použili jsme Boost C++ implementaci Bulirschovy-Stoerovy metody. Její implementace vyplývá z [8], kde je dále podrobně popsáno řízení chyby a řádu metody.

2.1.2 Řešení Riccatiho rovnice pro rozptylovou délku

Rovnice (1.16) je pro numerické řešení obtížnější díky tomu, že $(r - a_c(r))$ má póly, které odpovídají vázaným stavům, a algoritmy založené na Rungeových-Kuttových nebo Bulirschových-Stoerových metodách je špatně zpracovávají. Je proto nutné zavést vhodnou transformaci proměnných, která se pólům vyhne [9]

$$a_c(r) = \tan \vartheta(r), \quad (2.9)$$

$$r = \tan \phi(r), \quad (2.10)$$

přičemž výsledná ODR má tvar

$$\frac{d\vartheta}{d\phi}(\phi) = \frac{1}{\cos^4 \phi} \sin^2(\vartheta(\phi) - \phi) V(\tan(\phi)) \quad (2.11)$$

s počáteční podmínkou

$$\vartheta(0) = 0, \quad (2.12)$$

kterou řešíme na intervalu $[0, \phi_c]$, kde ϕ_c je blízké $\frac{\pi}{2}$.

2.2 Vnější komplexní škálování

Velmi zajímavá metoda, kterou můžeme zařadit mezi extrapolativní metody, je vnější komplexní škálování (ECS). Je založena na zavedení transformace souřadnic Hamiltoniánu

$$R(r) = \begin{cases} r & \text{pro } r \leq R_0, \\ R_0 + (r - R_0)e^{i\eta} & \text{pro } R_{max} > r > R_0, \end{cases} \quad (2.13)$$

kde R_0 je vzdálenost, do které je vlnová funkce funkcí reálných souřadnic, R_{max} je konec komplexně škálované kontury pod škálovacím úhlem η .

Díky ECS transformaci je snadno aplikovat asymptotickou okrajovou podmínku (viz níže) a zároveň získat parametry vlnové funkce jako fázový posun a rozptylovou délku z regionu, kde je vlnová funkce funkcí reálných souřadnic. Výpočet těchto parametrů nezávisí na škálovacím úhlu η [10]. Máme-li rozptylovou vlnovou funkci ve tvaru

$$u_0 = \psi^{sc} + \psi_0, \quad (2.14)$$

přičemž vlnová funkce ψ_0 splňuje příchozí okrajové podmínky a je dána jako $\psi_0 = j_l(kr) \stackrel{l=0}{=} \sin(kr)$. Vložíme-li rovnici (2.14) do Schrödingerovy rovnice (1.4), získáme

$$(E - H)\psi^{sc} = (H - E)\psi_0, \quad (2.15)$$

$$(E - H)\psi^{sc} = V(r) \sin(kr), \quad (2.16)$$

přičemž hledáme vlnovou funkci ψ^{sc} , která splňuje asymptotickou okrajovou podmínku. V případě, že potenciál $V(r)$ slábne rychleji než $\frac{1}{r^2}$, pak

$$\psi^{sc}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} k f_0(k) e^{ikr}. \quad (2.17)$$

Pokud se pokusíme vyřešit rovnici (2.16) s použitím potočených souřadnic dle (2.13), pak pravá strana rovnice pro $r > R_0$ je ve tvaru

$$V(R_0 + (r - R_0)e^{i\eta}) \sin(k(R_0 + (r - R_0)e^{i\eta})) \quad (2.18)$$

a diverguje pro $r \rightarrow \infty$ (neboť sinus diverguje), pokud potenciál V není omezený nebo exponenciálně tlumený. Bylo ukázáno [11], že lze zamezit divergenci pro $r > R_0$ v případě, kdy potenciál $V(r)$ ořízneme v bodě R_0

$$V_{R_0}(r) = \begin{cases} V(r) & \text{pro } r \leq R_0, \\ 0 & \text{pro } r > R_0. \end{cases} \quad (2.19)$$

Pro tento potenciál můžeme nalézt řešení $\psi_{R_0}^{sc}(r)$ rovnice (2.16), neboť pravá strana již ne-diverguje

$$(E - H)\psi_{R_0}^{sc} = V_{R_0}(r) \sin(kr). \quad (2.20)$$

Vnější komplexní škálování pozměňuje asymptotickou okrajovou podmínku (2.17) na

$$\psi_{R_0}^{sc}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad (2.21)$$

neboť vlnová funkce v komplexní části klesá exponenciálně

$$\psi_{R_0}^{sc}(r) \propto e^{-kr\eta}, \quad (2.22)$$

přičemž rychlost poklesu závisí na k . Z vlnové funkce u_0 je možné získat parciální rozptylovou amplitudu $f_0(k)$ následujícím způsobem [10]

$$f_0(k) = -\frac{1}{k}W(j_0(kr), u_0(r))|_{r=R_0-\varepsilon}, \quad (2.23)$$

kde $W(a,b) = ab' - a'b$ je Wronskián vzhledem k r vyčíslený v bodě $R_0 - \varepsilon$ blízkém konci reálné části kontury. Z rovnice (1.7) je poté možné určit fázové posunutí $\delta_0(k)$.

Námi použitá implementace ECS metody je kombinována s diskrétní reprezentací proměnných (DVR) a s metodou konečných prvků (FEM), která je podrobně popsána v [10]. DVR metoda používá Lagrangeovy interpolační polynomy s body sítě odvozené na základě Gaussovy-Lobattovy kvadratury. Gaussova-Lobattova kvadratura je podobná známější Gaussově-Legenderevě kvadratuře. Obě tyto kvadratury aproximují integrály následovně

$$\int_a^b F(x)dx \approx \sum_{i=1}^n F(x_i)w_i, \quad (2.24)$$

kde n je řád kvadratury. V případě Gaussovy-Lobattovy kvadratury jsou dva krajní kvadraturní body fixovány na hranici intervalu ($x_1 = a$, $x_n = b$). Díky tomu dokážeme přesně aproximovat $F(x)$ v případě, kdy je polynomem stupně $\leq 2n - 1$. Jako normalizované DVR báze funkce můžeme na intervalu $[a,b]$ definovat s pomocí Lagrangeových interpolačních polynomů funkce, které jsou ortogonální pod Gaussovou-Lobattovou integrací.

Jelikož jsou v síti daného elementu ($[a,b]$) zahrnuty krajní body intervalu, lze tyto elementy ve smyslu metody konečných prvků řetězit. Tento FEM-DVR přístup nám umožňuje rozdělit konturu danou ECS metodou pro radiální souřadnici $R(r)$ (2.13) na jednotlivé elementy, přičemž bod R_0 leží na hranici dvou elementů. Každý element má stejný řád GL kvadratury n .

Ve sjednocené bázi funkcí lze vyjádřit matice kinetické energie a potenciálu. Pro získání přesného řešení rovnice (2.20) je nutné splnit několik podmínek. V bodě R_0 musí být $V(R_0) \approx 0$, aby mohl být s dostatečnou přesností použitý vztah 2.19 a poté musí být konec komplexní části kontury R_{max} v dostatečné vzdálenosti, aby bylo řešení utlumené, tedy $\psi^{sc}(R_{max}) \approx 0$. Aby získání přesného řešení bylo efektivní je nutné vhodně přizpůsobit počet elementů na komplexní kontuře průběhu potenciálu.

3. Výsledky

3.1 Modelový potenciál

Pro srovnání výše uvedených metod jsme použili modelový potenciál s exponenciálním útlumem, pro který známe přesné analytické řešení

$$U(r) = -2\mu V_0 \exp\left(-\frac{r}{a}\right), \quad (3.1)$$

přičemž jsme vhodně zvolili $\mu = 1$, $V_0 = 0,0005$ a $a = 3000$ tak, aby potenciál podporoval 60 vázaných stavů a zároveň aby volba velkého rozměru jámy a odpovídala dalekodosahovosti potenciálů chladným atomů, přestože se jedná o krátkodosahový potenciál. Pro potenciál (3.1) existují následující analytická řešení Jostovy funkce \mathcal{F} , S matice a fázového posunutí pro $l = 0$ [12]

$$\mathcal{F}(k) = \exp(iak \log(a^2 2\mu V_0)) \Gamma(1 - 2iak) J_{-2iak}(2a\sqrt{2\mu V_0}), \quad (3.2)$$

$$S(k) = \frac{\mathcal{F}(-k)}{\mathcal{F}(k)}, \quad (3.3)$$

$$\delta_0(k) = \arctan \frac{\text{Im}\{S(k)\}}{\text{Re}\{S(k)\}}. \quad (3.4)$$

Pro námi vybrané parametry potenciálu jsme použitím vztahů (3.4), (1.11) vypočítali rozptylovou délku

$$a_0 = \lim_{k \rightarrow 0} -\frac{1}{k} \tan \delta_0(k) = 26166,778402968. \quad (3.5)$$

Uvedenou rozptylovou délku budeme považovat za referenční a budeme k ní vztahovat všechny následující výsledky tak, abychom mohli metody srovnat v sekci 3.1.4.

3.1.1 Přímá integrace Schrödingerovy rovnice

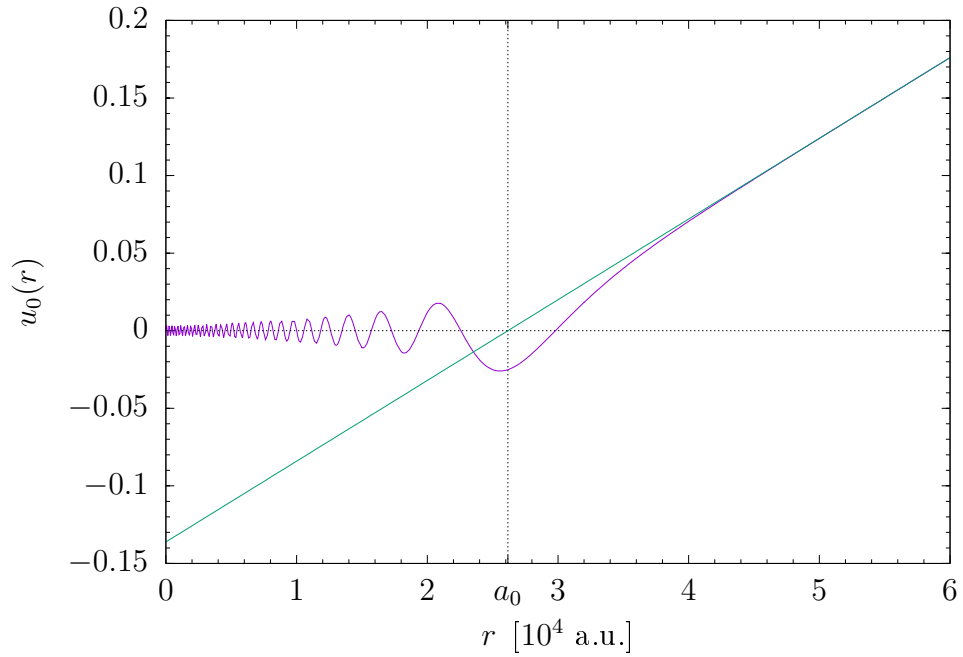
Nejjednodušším možným přístupem k nalezení rozptylové délky je vyřešení Schrödingerovy rovnice pro $k = 0$ (2.1), kterou jsme transformovali na odpovídající soustavu rovnic 1. řádu (2.2) a (2.3). Jako počáteční okrajovou podmínku jsme použili

$$u(10^{-14}) = 0, \quad (3.6)$$

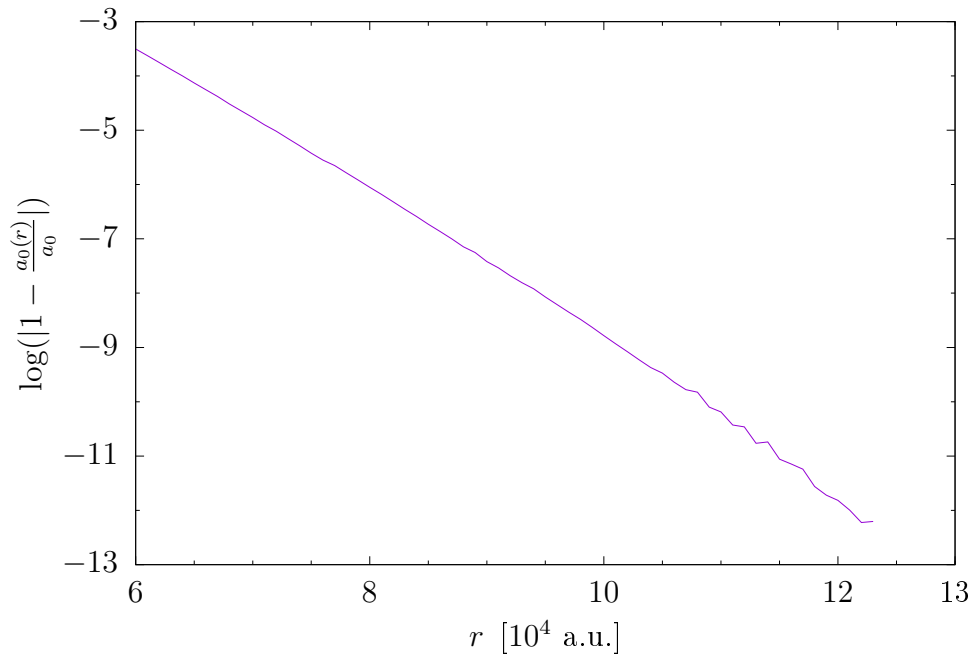
$$v(10^{-14}) = 1, \quad (3.7)$$

kde $v(0)$ je vybráno libovolně a určuje pouze normalizaci vlnové funkce. Pro propagaci řešení jsme používali Bulirschovu-Stoerovu metodu tak, jak je popsáno v odstavci 2.1.1.

Splnění lineární asymptotické podmínky jsme detekovali tak, že jsme s krokem 5000 počítali rozptylovou délku, prokládali několik bodů lineárním fitem, a kontrolovali, kdy bude relativní změna rozptylové délky při jednom kroku pod určitou přesností. Konvergence vypočítané rozptylové délky k přesné rozptylové délce můžete vidět na obrázku 3.2. Průběh vlnové funkce pro $k = 0$, finální fit asymptotické přímky a rozptylová délka jsou ukázány na obrázku 3.1. Pro propagaci řešení do bodu 122000 jsme potřebovali cca 2800 integračních kroků Bulirschovy-Stoerovy metody.



Obrázek 3.1: Graf zobrazující nenormalizovanou vlnovou funkci $u_0(r)$ pro $k = 0$ s vyznačenými asymptotickým chováním a rozptylovou délkou a_0 na ose. Integrovali jsme pomocí Bulirschovy-Stoerovy metody s přibližně 2800 integračními kroky.



Obrázek 3.2: Graf zobrazující konvergenci metody přímé integrace rovnice (1.4) k přesně určené rozptylové délce a_0 v závislosti na koncovém bodě r . Integrovali jsme pomocí Bulirschovy-Stoerovy metody s přibližně 2800 integračními kroky.

3.1.2 Metoda fázové funkce

Podobně jsme postupovali i v případech řešení ODR (1.14) pro fázovou funkci $\delta_0(r)$ a řešení ODR (1.16) pro funkci rozptylové délky $a_c(r)$, resp. její ekvivalentní verze (2.11) pro substituci $\vartheta(\phi)$. V těchto případech jsme jako asymptotickou okrajovou podmínku kontrolovali relativní změnu fázové funkce $\delta_0(r)$, resp. funkce rozptylové délky $a_c(r)$, při daném kroku.

Fázové posunutí $\delta_0(k)$ jsme vyčíslili pro vlnová čísla v intervalu $(10^{-10}, 10^{-2})$, přičemž jsme hledali oblast, pro kterou fázové posunutí splňuje přiblížení efektivního poloměru (1.9). Na obrázku 3.3 je vidět, že pouze hodnoty na intervalu $(10^{-8}, 10^{-5})$ splňují kvadratickou závislost danou přiblížením efektivního poloměru s dostatečnou přesností. Pro hodnoty mimo tento interval buď převládá zaokrouhlovací chyba nebo jsou porušeny podmínky přiblížení. Typický průběh závislosti fázové funkce $\delta_0(r)$ je pro $k = 10^{-5}$ na obrázku 3.4.

Z fázového posunutí $\delta_0(k)$ pro vhodně malá vlnová čísla (např. $k = 10^{-7}, 10^{-6}$) můžeme ověřit podle Levinsonova teorému (1.8) počet vázaných stavů. V tabulce 3.1 jsou uvedena fázová posunutí s odpovídajícím odhadem pro počet vázaných stavů, který jsme vypočítali dle

$$n_0 = \delta_0(k)/\pi. \quad (3.8)$$

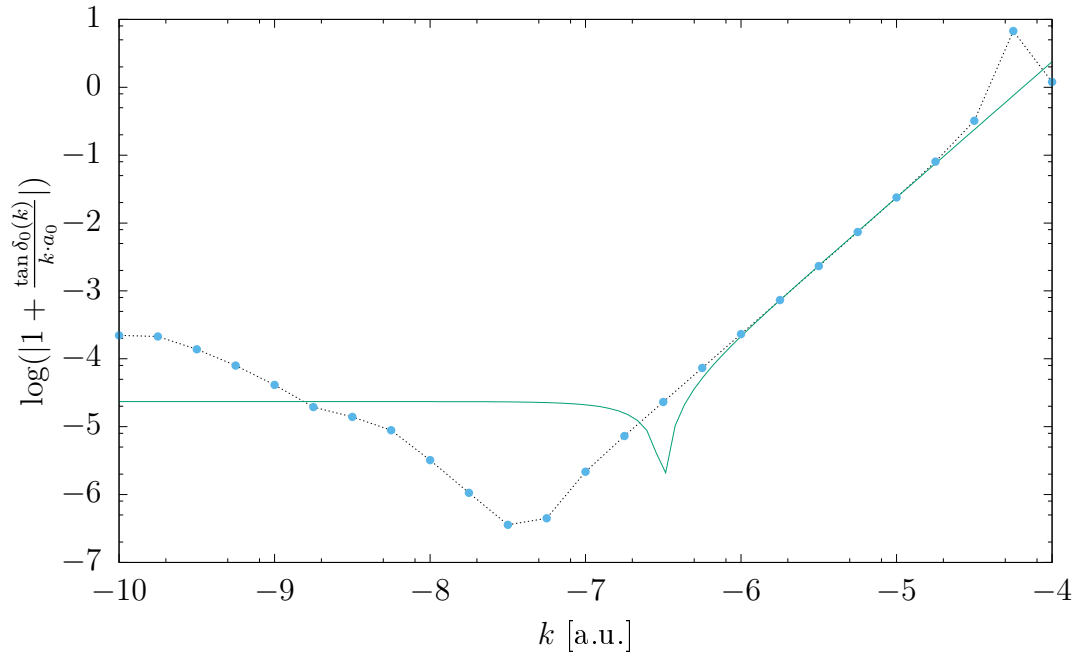
Jelikož jsou daná vlnová čísla dostatečně malá, tak můžeme s jistotou prohlásit, že pro dané parametry má exponenciální potenciál 60 vázaných stavů.

k	δ_0	n_0
10^{-6}	188,4694	59,99167
10^{-7}	188,4929	59,99915

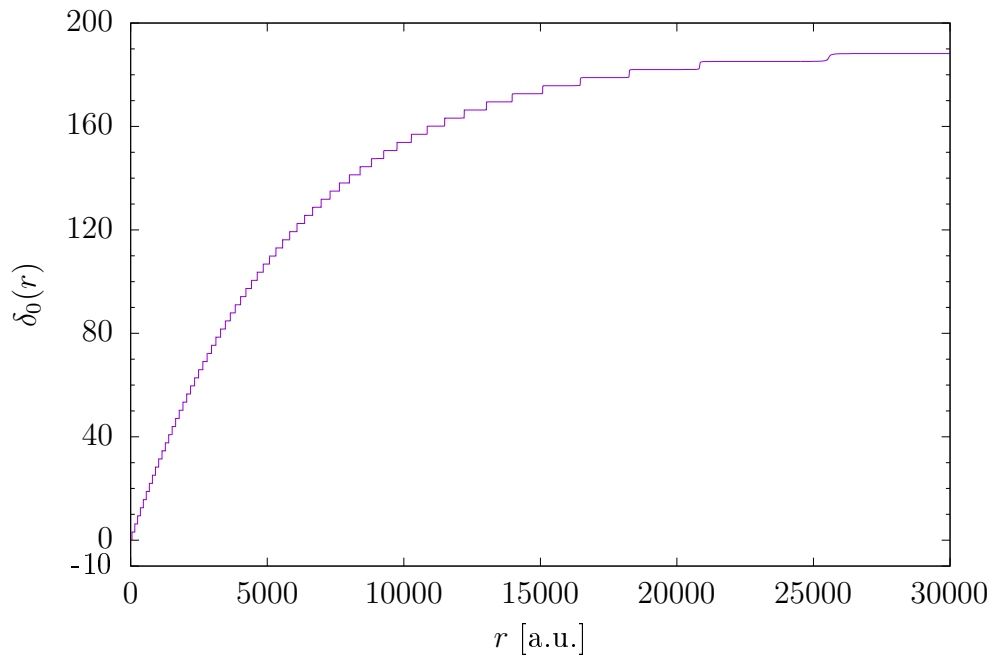
Tabulka 3.1: Počet vázaných stavů, které podporuje exponenciální potenciál (3.1) pro parametry uvedené v odstavci 3.1.

V případě Riccatiho rovnice (1.16), resp. (2.11), jsme získali rozptylovou délku propagací řešení do blízkosti bodu $\frac{\pi}{2}$. Na obrázku 3.5 je patrný průběh substituívané funkce $\vartheta(\phi)$, která na rozdíl od průběhu funkce na obrázku 3.6 neobsahuje póly, což byl důvod pro zavedení substituce (2.11). Konvergenci funkce rozptylové délky $a_0(r)$, k přesné rozptylové délce můžeme pozorovat na obrázku 3.6.

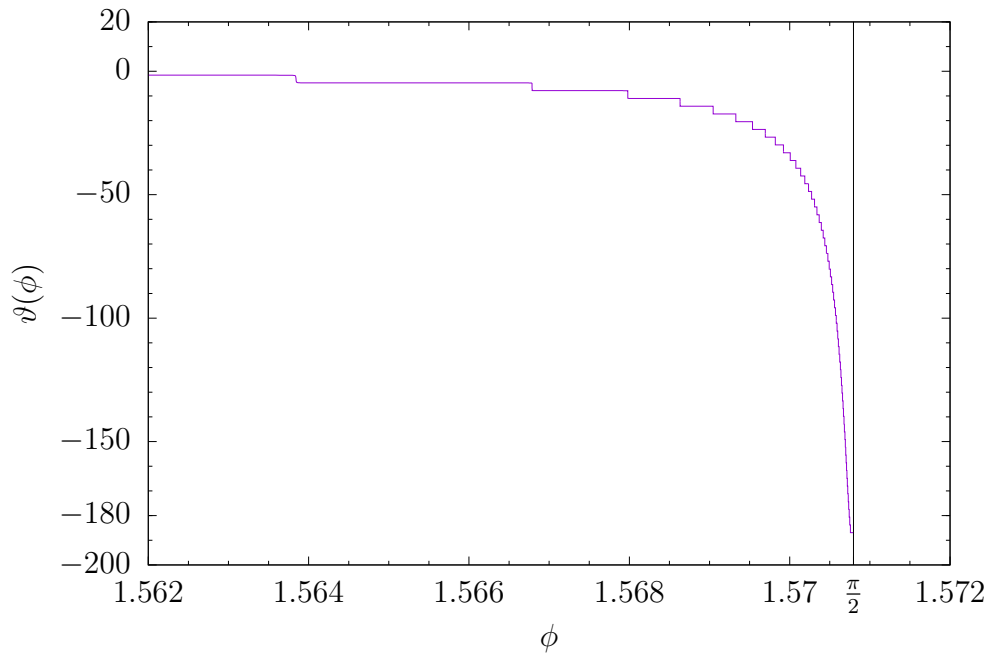
Jak můžeme vidět na obrázcích 3.4 a 3.5, funkce $\delta(r)$ a $\vartheta(\phi)$ mají skokové chování, přičemž počet skoků odpovídá počtu vázaných stavů. To je esenciální důvod pro použití adaptivního integrátoru, který správně ošetří místa skoků a umožní natažení kroku pro velké vzdálenosti r , resp. malá ϕ , tak, aby se ušetřil strojový čas výpočtu a neakumulovala se numerická chyba.



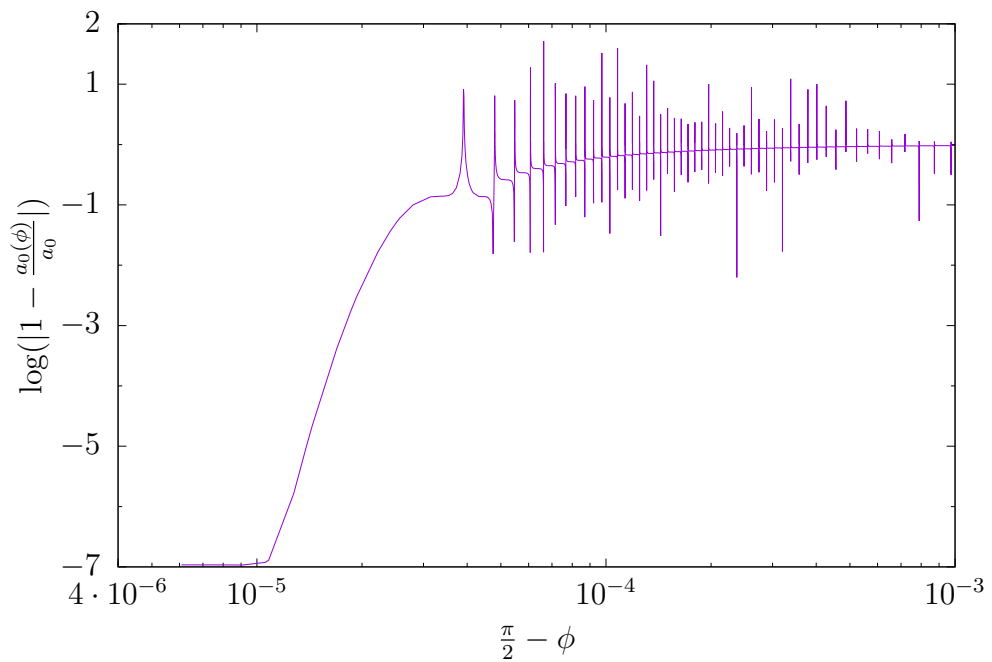
Obrázek 3.3: Graf zobrazující přiblížení efektivního poloměru vztahené k rozptylové délce a_0 s kvadratickým fitem pro hodnoty na intervalu $(10^{-7}, 10^{-5})$ pro metodu fázové funkce (1.14) řešenou Bulirschovou-Stoerovou metodou pro exponenciálně tlumený potenciál.



Obrázek 3.4: Graf zobrazuje průběh fázové funkce $\delta_0(r)$ pro $k = 10^{-5}$.



Obrázek 3.5: Graf průběhu $\vartheta(\phi)$ v blízkosti $\frac{\pi}{2}$.



Obrázek 3.6: Konvergence funkce rozptylové délky $a_0(r)$ k hledané rozptylové délce a_0 v závislosti na vzdálenosti od $\frac{\pi}{2}$.

3.1.3 Metoda vnějšího komplexního škálování

Řešení založené na vnějším komplexním škálování jsme určili pro několik vlnových čísel k v intervalu $(10^{-10}, 10^{-3})$ na jedné komplexní kontuře. Pro výpočty jsme měli na každém elementu 15 kvadraturních bodů. Podle podmínek na konturu, které jsme stanovili na konci sekce 2.2, jsme vybrali vhodnou diskretizaci kontury, která je uvedena v tabulce 3.2.

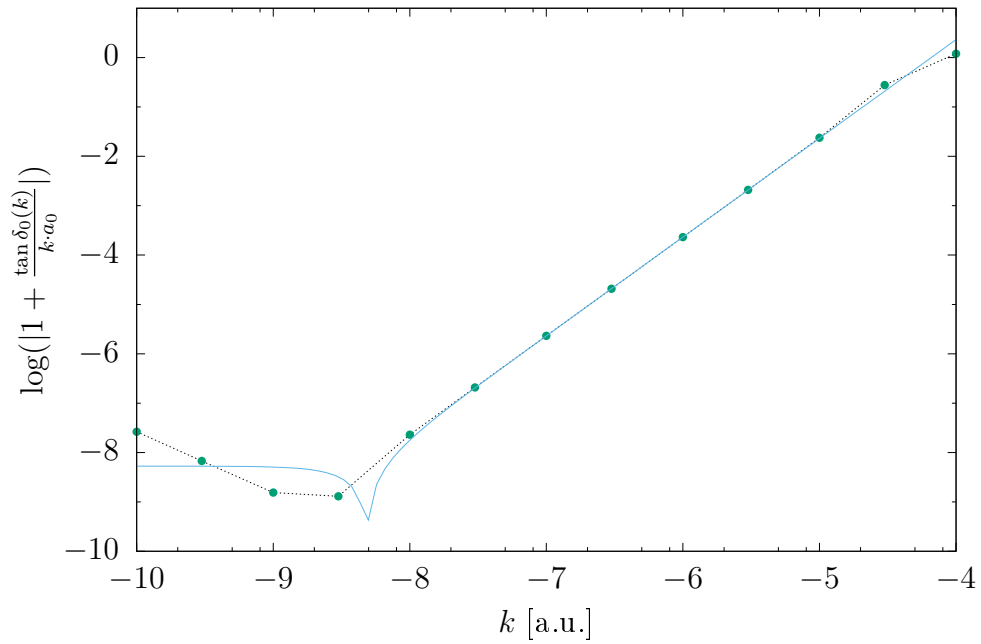
Při diskretizaci kontury jsem postupovali tak, že jsme vybrali dostatečně vysoké R_{max} , aby dle (2.22) byly utlumeny i vlnové funkce s velmi nízkými k . Koncový bod reálné části R_0 jsme volili dostatečně velký, aby byl již potenciál zanedbatelný, tj. $(R_0) < 10^{-15}$. Dále jsme konturu rozdělili na intervaly (viz tabulka 3.2) a osadili je různým počtem elementů v závislosti na lokální hloubce potenciálu tak, aby hustota elementů na intervalu byla v největší hloubce potenciálu největší. Pro jemné doladění počtu elementů na kontuře jsme kontrolovali citlivost fázového posunutí na změně počtu elementů na jednotlivých intervalech.

Elementy na posledním intervalu reálné části kontury a intervalu komplexní části kontury nemají stejnou délku, ale jsou postupně prodlužovány. V těchto případech specifikujeme pouze délku prvního elementu a počet elementů na daném intervalu. Ostatní elementy jsou nataženy tak, že jejich délky splňují geometrickou posloupnost. Udělali jsme to z toho důvodu, že většina vlnových funkcí ψ^{sc} pro takto vysoká $R(r)$ již neosciluje, je pozvolna utlumována, a tak není nutné, aby zde hustota elementů byla vysoká. Dále z toho důvodu, že vlnové funkce pro větší vlnová čísla k jsou pro vysoká $R(r)$ utlumeny a mnoho elementů na kontuře vnáší do výpočtů zbytečné chyby.

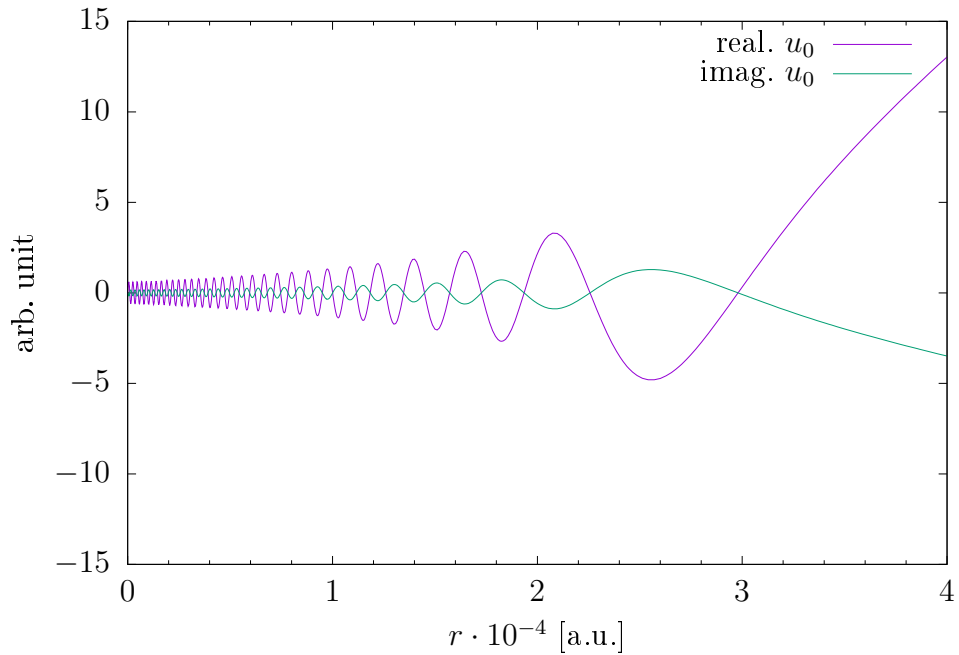
Výsledné vypočítané hodnoty přiblížení efektivního poloměru (1.9) jsou na obrázku 3.7. Díky ECS metodě jsme byli schopni nalézt rozptylové vlnové funkce pro dané energie E , potažmo vlnová čísla k . Nenormalizovanou vlnovou funkci u_0 pro $k = 10^{-5}$ můžete vidět na obrázku 3.8.

<i>typ</i>	\mathbb{R}	\mathbb{R}	\mathbb{R}	\mathbb{R}	\mathbb{R}	\mathbb{R}^*	\mathbb{C}^{**}
r [a.u.]	1	10	100	1000	10000	10^6	10^{12}
n_e	3	5	20	10	30	40	150

Tabulka 3.2: Tabulka konečných elementů použitých pro vnější komplexní škálování, kde *typ* označuje, zda se jedná o reálnou nebo již komplexní část kontury, r označuje radiální vzdálenost, kde končí daný interval, a n_e je počet elementů na intervalu (první interval začíná v bodě $r = 0$), přičemž $R_0 = 10^6$ a $R_{max} = 10^{12}$. *, ** značí intervaly, na nichž nejsou elementy stejně dlouhé. Délka prvního elementu na *, resp. **, je 300, resp. 100000. Na kontuře je přibližně 3600 bodů.



Obrázek 3.7: Přesnost výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0(k)$ pro vnější komplexní škálování a kvadratická ERT extrapolace hodnot z intervalu $(10^{-10}, 10^{-5})$.



Obrázek 3.8: Graf zobrazující nenormalizovanou reálnou a imaginární část rozptylové vlnové funkce u_0 pro $k = 10^{-5}$.

3.1.4 Srovnání

Výše uvedenými metodami jsme získali několik hodnot rozptylové délky pro exponenciálně tlumený potenciál (3.1). Vypočtené hodnoty jsme uvedli v tabulce 3.3.

Je patrné, že z numerických metod je výrazně nejpresnější přímá integrace Schrödingerovy rovnice. Rozptylová délka a_{01} je přesná s relativní chybou přibližně 10^{-13} , což je nejméně o 4 řády více než u ostatních metod. Přesnost této základní metody lze přisoudit tomu, že pracujeme s krátkodosahovým potenciálem a asymptotického řešení (1.12) dosáhneme pro celkem malá $r \approx 10^5$.

Srovnáme-li dvě extrapolativní metody, a to ECS a metodu fázové funkce $\delta_0(r)$, zjišťujeme, že ECS metoda je o 2 řády přesnější. Dále můžeme srovnáním přiblížení efektivního poloměru na obrázcích 3.3 a 3.7 zjistit, že interval platnosti přiblížení efektivního poloměru je výrazně větší u ECS metody, neboť sahá přibližně až do $k \approx 10^{-9}$.

Další výhoda ECS metody spočívá v tom, že k získání přesnějších hodnot pro velmi malá vlnová čísla $k < 10^{-7}$ stačí protáhnout danou konturu zvětšením R_{max} , případně R_0 , a to tak, aby se vlnové funkce s takto malým k mohly řádně utlumit. Je nutné ale podotknout, že tato změna může vnést do výpočtu další numerické chyby, neboť pro velká čísla jsou vlnové funkce utlumeny již pro malé vzdálenosti na komplexní části $R(r)$. Z toho vyplývá, že nelze získat dostatečně přesná řešení splňující přiblížení efektivního poloměru všude na intervalu $(10^{-10}, 10^{-2})$ s užitím pouze jedné diskretizace komplexní kontury. Tomuto jevu a vlivu polohy bodu R_0 se dále věnujeme v kapitole 3.2.3.

Velmi důležitá výhoda ECS metody je, že umožňuje rychlé opakované výpočty pro různé energie, resp. vlnová čísla. Malá část strojového času je spotřebována na rozložení hamiltoniánu do energeticky nezávislé báze, přičemž většinu strojového času zabere samotný výpočet soustavy lineárních rovnic, který je zpracován pomocí velmi rychlého a paměťově nenáročného Intel MKL PARDISO. Tato skutečnost se odráží v tom, že výpočet pro přibližně 20 energetických bodů trvá ECS metodě zhruba 1 s na rozdíl od metody fázové funkce, jejíž výpočet trvá pro podobný počet energetických bodů zhruba 1 min.

Přestože je v tomto případě metoda fázové funkce $\delta_0(r)$ méně přesná a efektivní než metoda ECS, můžeme díky ní snadno získat fázová posunutí a ověřit si například počet vázaných stavů bez toho, abychom museli ladit počty elementů na kontuře.

Dále je nutné uvést, že při výběru bodů pro fitování jsme se řídili pouze přesností výsledné rozptylové délky, což nelze použít například u potenciálů, kde neznáme analytické řešení, jako je to v případě potenciálu v následujícím odstavci.

	a_0	přímá integrace	$a_0(r)$	$\delta_0(r)$	ECS
a_0 [a.u.]	26166,778402968	26166,77840294	26166,78	26166,2	26166,7782
δ_{a_0}	–	$7.3 \cdot 10^{-14}$	$1.1 \cdot 10^{-7}$	$2.4 \cdot 10^{-5}$	$5.4 \cdot 10^{-9}$

Tabulka 3.3: Tabulka výsledných rozptylových délek s uvedenou relativní chybou. Uvedeny jsou analyticky získaná rozptylová délka a_0 (3.5) a řešení přímé integrace Schrödingerovy rovnice, Riccatiho rovnice pro $a_0(r)$, metody fázové funkce $\delta_0(r)$ a ECS metody.

3.2 Potenciál Cs-Cs

Metody jsme prověřili na obtížnějším problému, a to výpočtem rozptylové délky pro pár cesiových atomů s hmotností $m = 2,422 \cdot 10^5$ (redukovaná hmotnost je tedy $\mu = 1,211 \cdot 10^5$), interagující skrze modelový potenciál [13]

$$V(R) = \frac{1}{2}Br^\kappa e^{-\eta r} - \left(\frac{C_6}{r^6} + \frac{C_8}{r^8} + \frac{C_{10}}{r^{10}} \right) \left(\vartheta(r - R_c) + \vartheta(R_c - r)e^{-\left(\frac{R_c}{r} - 1\right)^2} \right), \quad (3.9)$$

kde ϑ je Heavisideova funkce. Parametry potenciálu jsou v tabulce 3.4. První člen 3.9 souvisí s výměnnou interakcí valenčních elektronů a člen v prvních závorkách složený z van der Waalsových členů odpovídá dalekodosa-hové části potenciálu. Člen v posledních závorkách slouží k ořezu dlouhodosa-hové části v bodě R_c , aby se vyrušilo divergentní chování v počátku. Potenciál podporuje 59 vázaných stavů pro všechny analyzované parametry R_c .

κ	η	B	C_6	C_8	C_{10}
5,53	1,072	$1,6 \cdot 10^{-3}$	$7,02 \cdot 10^3$	$1,10 \cdot 10^6$	$1,70 \cdot 10^8$

Tabulka 3.4: Parametry Cs-Cs modelového potenciálu

V této části budeme porovnávat průběžné výsledky se zkonvergovanými rozptylovými délkami a výsledné rozptylové délky srovnáme na konci i s výsledky od jiných autorů. Prezentované výsledky budou pouze pro několik hodnot parametru R_c , přičemž vyčíslíme rozptylové délky i pro další často analyzované hodnoty parametru R_c . Ty pouze uvedeme ve srovnání na konci.

3.2.1 Přímá integrace Schrödingerovy rovnice

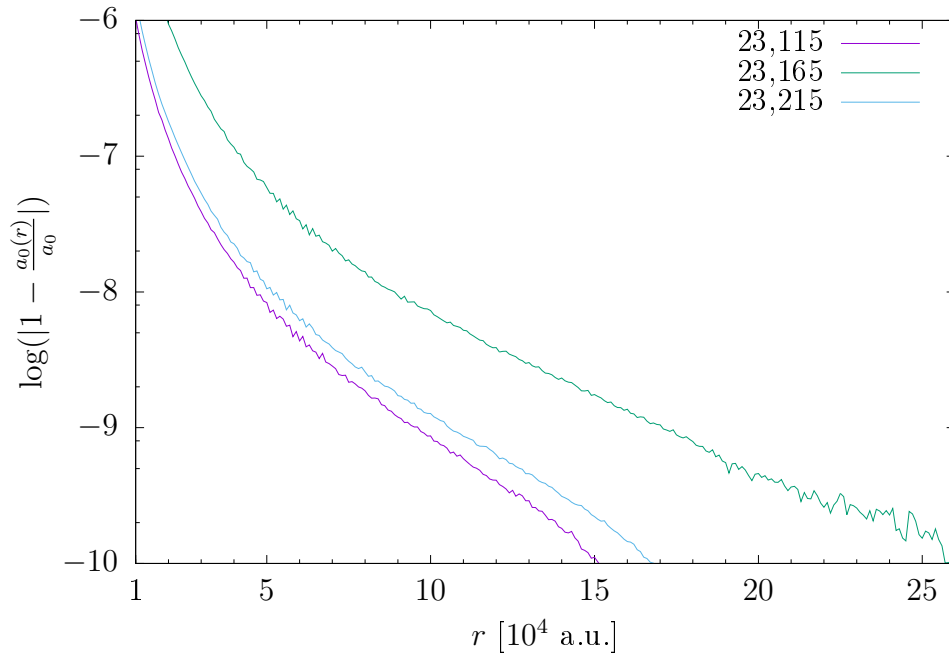
V případě empirického potenciálu Cs-Cs jsme postupovali stejně jako v případě referenčního potenciálu s tím rozdílem, že jsme si vzali následující počáteční okrajovou podmínku

$$u(10^{-10}) = 0, \quad (3.10)$$

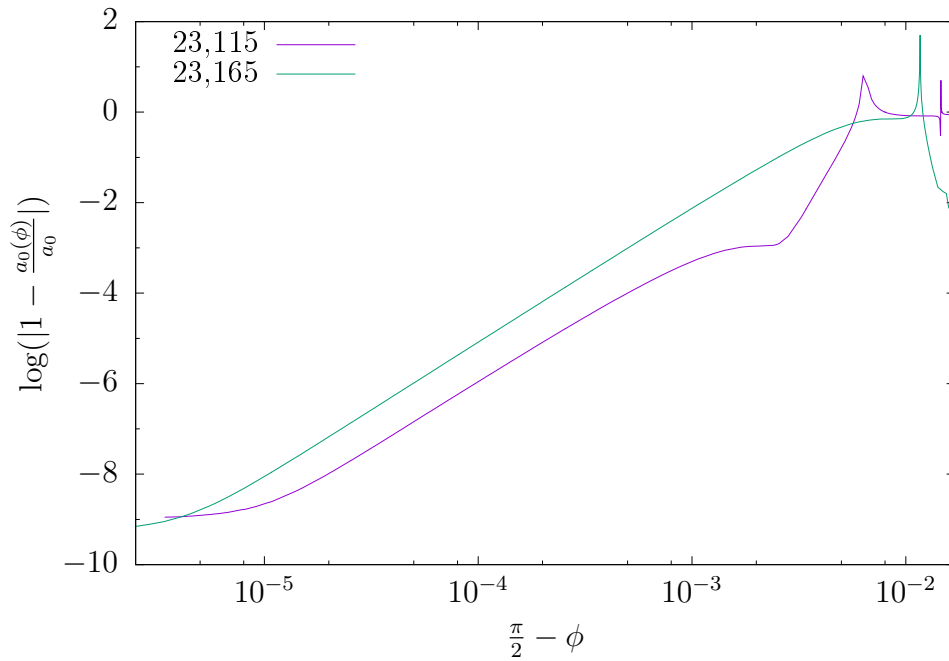
$$v(10^{-10}) = 10^{-14}, \quad (3.11)$$

kde počáteční bod integrace jsme volili 10^{-10} . Jelikož pracujeme s dalekodosa-hovým potenciálem, bylo pro splnění asymptotické okrajové podmínky nutné integrovat do vzdálenosti řádově 10^5 , což je podobná vzdálenost jako v případě exponenciálního potenciálu (viz obrázky 3.2 a 3.9). Zároveň platilo, že hodnoty vlnové funkce u_0 velmi rychle rostly až do 10^{190} .

Konvergence rozptylových délek k výsledným hodnotám pro několik parametrů R_c jsou ukázány na obrázku 3.9. Je zde patrné, že i malá změna parametru R_c způsobí, že je pro požadovanou přesnost nutné integrovat do téměř dvojnásobné vzdálenosti. Fluktuace okolo trendů na obrázku je možné zdůvodnit přetečením amplitudy vlnové funkce a musíme s výsledky nakládat s jistou rezervou. Z konvergence metody vyplývá, že se hodnoty rozptylové délky ustalují na přibližně 10 platných cifer.



Obrázek 3.9: Graf zobrazující konvergenci metody přímé integrace rovnice (1.4) k výsledné rozptylové délce a_0 v závislosti na koncovém bodě r a parametru R_c potenciálu Cs dimeru.



Obrázek 3.10: Graf zobrazující konvergenci řešení Riccatiho rovnice (1.16) $a_0(r)$ k výsledné rozptylové délce v závislosti na vzdálenosti od koncového bodu $\frac{\pi}{2}$ a parametru R_c potenciálu Cs dimeru.

3.2.2 Metoda fázové funkce

U řešení metody fázové funkce nejdříve se zaměříme na řešení ODR pro rozptylovou délku $a(r)$ (1.16), resp. (2.11). Na obrázku 3.10 je zobrazena konvergence rozptylových funkcí k jednotlivým výsledným rozptylovým délkám. Ze substituce $\phi(r)$ (2.10) vyplývá, že jsme pro jednotlivé parametry R_c integrovali přibližně do vzdálenosti $4 \cdot 10^5$. Srovnáme-li obrázek konvergence s obrázkem konvergence pro exponenciální potenciál 3.6, je patrné, že póly rozptylové funkce pro exponenciální potenciál jsou blíže k $\frac{\pi}{2}$, jsou ve větší radiální vzdálenosti r od počátku, než v případě modelového potenciálu Cs dimeru. Je to nejspíše způsobeno tím, že exponenciální potenciál díky velké délce jámy $a = 3000$ je utlumován velmi pomalu. Tento fakt, že póly funkce $a_c(\phi)$, resp. skoky funkce $\vartheta(\phi)$, nejsou pro potenciál Cs-Cs blízko u koncového bodu, má pozitivní vliv na přesnost metody. Pro výpočet bylo pro každý parametr R_c potřeba přibližně 3800 integračních kroků.

U metody fázové funkce $\delta_0(r)$ jsme se již na příkladu exponenciálního potenciálu přesvědčili, že nezajišťuje přesnou výslednou rozptylovou délku. Z tohoto důvodu odprezentujeme výsledky pro parametr $R_c = 23,165$ a vztáhneme je k rozptylové délce získané řešením Riccatiho rovnice, která je uvedena v tabulce 3.6

$$a_{ref} = 68,2159676. \quad (3.12)$$

Na obrázku 3.11 jsou zobrazeny hodnoty pro modifikované přiblížení efektivního poloměru. Přiblížení dané vztahem (1.10) je splněno v dostatečné přesnosti pouze pro hodnoty přibližně v intervalu $(10^{-6}, 10^{-3})$, kterými jsme proložili kvadratický fit. Uvedený obrázek můžeme srovnat s obrázkem pro exponenciální potenciál 3.3. Z důvodu dalekodosahového potenciálu je interval platnosti přiblížení menší a pro velmi nízká k je zřejmý vliv zaokrouhlovacích chyb.

Jelikož jsou výsledné hodnoty rozptylových délek správné pouze na přibližně 4 – 5 platných cifer, tak jsme je do finálního srovnání neuváděli.

3.2.3 Metoda vnějšího komplexního škálování

V případě Cs-Cs dimeru jsme při diskretizaci komplexní kontury postupovali podobně jako v případě exponenciálního potenciálu, ale navíc jsme provedli několik analýz. Interval (0,500), kde je potenciál nejhlubší, jsme osadili dostatečně velkým množstvím elementů (viz tabulka 3.5). Pro větší vzdálenosti r již vlnové funkce nekmitají, a tak jsme zbytek reálné části osadili elementy, které se povolna protahovaly s kvocientem $q \approx 1,5$ do bodu $R_0 = 10000$, přičemž první element posloupnosti měl délku 100.

Polohu koncového bodu komplexní části R_{max} jsme určili pomocí analýzy, která je na obrázku 3.12. Je zde patrná platnost poučky (2.22), že vlnové funkce s malými vlnovými čísly potřebují k utlumení delší kontury, neboť s každým zmenšením k o dva řády je nutné protáhnout konturu o dva řády. Hodnoty výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0(R_{max})$ jsme pro jednotlivá k vztáhli k finálním hodnotám výrazu pro $R_{max} \approx 2,4 \cdot 10^{25}$. Jelikož se hodnota výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0(R_{max})$ pro všechny relevantní k ustálí do radiální vzdálenosti 10^{12} , vybrali jsme jako koncový bod komplexní kontury $R_{max} = 4,5 \cdot 10^{12}$.

Abychom přesně určili koncový bod R_0 reálné části, protahovali jsme poslední skupinu elementů na reálné části kontury a elementy na komplexní části kontury s kvocientem $q = 1,5$ až do bodu $R_{max} = 4,9 \cdot 10^{12}$, přičemž jsme bod R_0 postupně posunovali mezi elementy. Výsledek analýzy je na obrázku 3.13. Hodnoty výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0(R_0)$ jsme vztáhli k hodnotě $a_{opt} = 68,215973$, což je přibližná hodnota, na které se ustalují hodnoty výrazu pro $k = 10^{-10}$ v okolí bodu $5 \cdot 10^5$.

Je zde patrná postupná konvergence hodnot až do bodu $4,5 \cdot 10^5$. Na obrázku vidíme, že fázová posunutí jsou pro velká R_0 nefyzikální. Jedná se o numerický artefakt a souvisí s výpočtem rozptylové amplitudy dle vztahu (2.23). Abychom se vyhnuli numerickým chybám, vybrali jsme bod $R_0 = 4,5 \cdot 10^5$ pro určení správné hodnoty fázového posunutí. Výsledná kontura, kterou jsme použili k výpočtům je v následující tabulce.

<i>typ</i>	\mathbb{R}	\mathbb{R}	\mathbb{R}	\mathbb{R}	\mathbb{R}	\mathbb{R}^*	\mathbb{C}^{**}
r [a.u.]	10	20	30	100	500	$4 \cdot 10^5$	$5 \cdot 10^{12}$
n_e	10	25	30	25	20	30	40

Tabulka 3.5: Tabulka konečných elementů použitých pro vnější komplexní škálování. Na intervalech *, ** jsou elementy natahovány a první element má délku 100, 50000. Na kontuře je přibližně 2500 bodů.

Co se týče MERT extrapolace, soustředili jsme se na hodnoty vlnového čísla k v intervalu $(10^{-9}, 10^{-5})$, pro něž hodnoty dostatečně konvergují. Pro velmi nízké hodnoty k nastává problém s konvergencí podobný případu s nulovou energií a pro velká k můžeme pochybovat o platnosti modifikovaného přiblížení. Výpočty jsme prováděli pro všechny relevantní parametry R_c na stejné kontuře. Na obrázku 3.14 můžete vidět vypočítané hodnoty pro parametr $R_c = 23,165$. Jsou zde patrné výše popsané jevy. Z extrapolace vyplývá, že získané hodnoty rozptylových délek jsou přesné přibližně na 7 – 8 platných cifer.

3.2.4 Srovnání a diskuze metod

Jelikož jsme použili často aplikovaný empirický potenciál Cs dimeru, existuje mnoho výsledků od jiných autorů, které se různí svojí přesností. Vybrali jsme pro srovnání dva výsledky od autorů Marinescu [4] a Šulce [14], přičemž ten první z roku 1994 je jeden z prvních a často odkazovaných článků zabývajících se touto problematikou, kdežto výsledky od Šulce z roku 2010 jsou nejpřesnější (autoři uvádí výsledky na 10 platných cifer) a budeme vůči nim vztahovat naše výsledky. Výsledky od uvedených autorů a výsledky předešlých odstavců jsme uvedli v tabulce 3.6.

Je jisté, že naše výsledky jsou lepší než výsledky uvedené v [4]. Je nutné zmínit pozoruhodnou přesnost přímého řešení Schrödingerovy rovnice pro některé hodnoty parametru R_c . Ze srovnání s výsledky uvedenými v [14] lze vyvodit, že výsledky metody přímého řešení Schrödingerovy rovnice jsme určili přibližně 8–9 platných cifer. Kromě ladění vnitřních parametrů Bulirschovy-Stoerovy metody v Boost C++ implementaci a volby počátečního bodu tato metoda neumožňuje odhad chyby řešení.

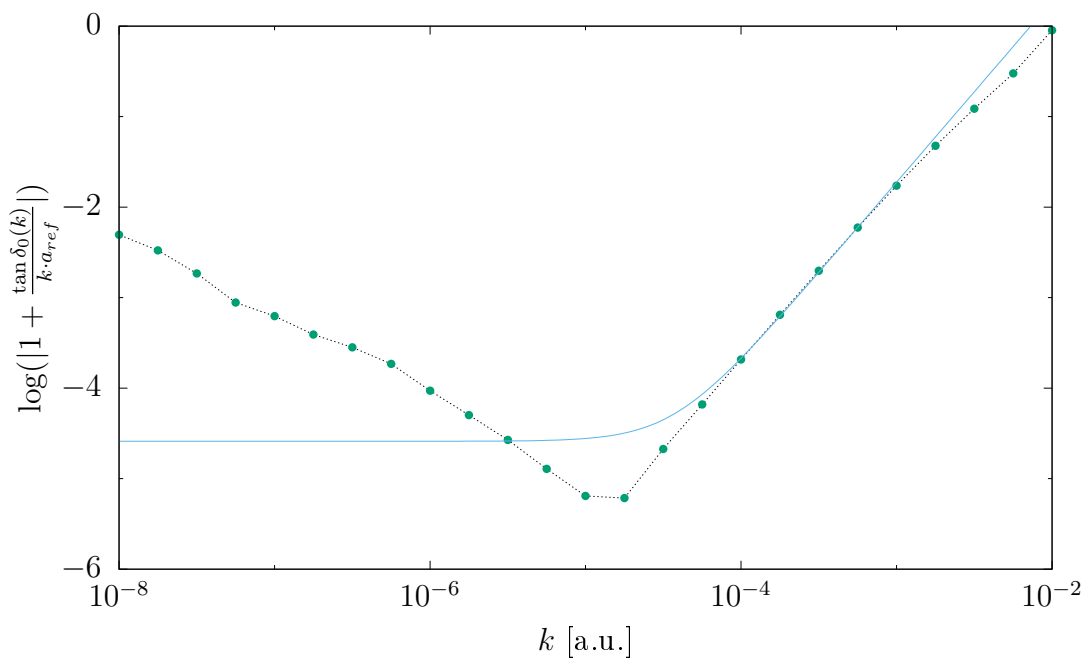
ECS metodou jsme získali rozptylové délky s relativní chybou přibližně 10^{-8} , přičemž chyba metody je dána chybou fitu a chybou jednotlivých fitovaných hodnot. Má srovnatelnou přesnost jako řešení Riccatiho rovnice, ale ECS metoda navíc poskytuje rozptylové vlnové funkce a fázové posunutí, ze kterého můžeme vyjádřit další charakteristiky rozptylu, např. účinný průřez σ . Dále je možné z MERT (1.10) vyjádřit efektivní poloměr interakce r_l . Z Riccatiho rovnice pro rozptylovou funkci $a_0(r)$ naopak snadno získáme rozptylovou délku, kterou hledáme bez toho, abychom diskretizovali komplexní konturu v závislosti na průběhu potenciálu.

Problémem ECS-FEM-DVR metody je skutečnost, že neexistuje efektivní automatizace pro diskretizaci komplexní kontury, která by dávala uspokojivé výsledky. Pro její použití je proto nutné uplatnit podobné analýzy jako ty, které jsme použili v obrázcích 3.12 a 3.13.

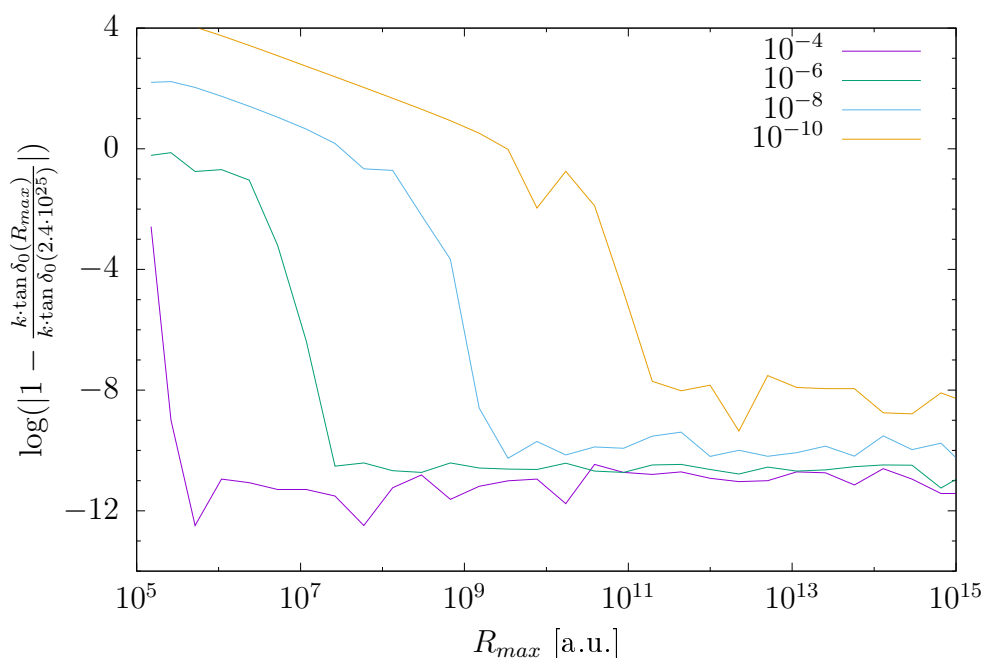
Ve srovnání s ostatními analyzovanými metodami je metoda fázové funkce velmi nevhodná pro přesný výpočet rozptylové délky, neboť nedokáže přesně spočítat fázová posunutí pro $k < 10^{-6}$, abychom mohli použít MERT přiblížení.

R_c [a.u.]	a^1	a^2	přímá integrace	$a_0(r)$	ECS
23,115	477,1465	477,1465226	477,1465226	477,146525	477,14652
23,140	-72,24305	-72,24304633	-72,2430464	-72,2430428	-72,243048
23,165	68,21596	68,21596735	68,21596725	68,2159676	68,215967
23,190	145,4336	145,4335866	145,4335866	145,4335879	145,43358
23,215	350,6305	350,6305570	350,6305568	350,630554	350,63056

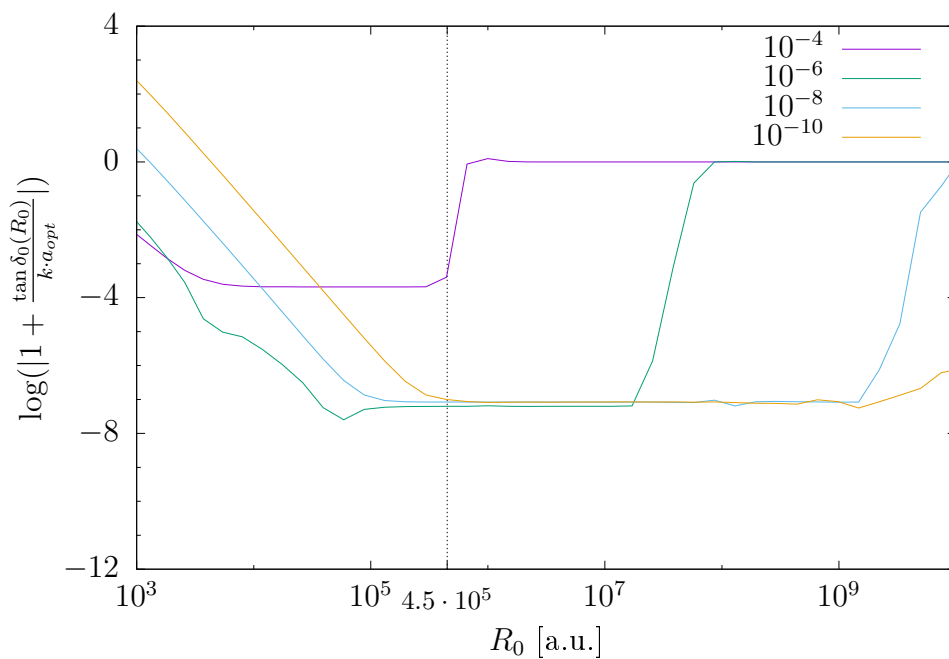
Tabulka 3.6: Srovnání výsledných rozptylových délek pro přímou integraci Schrödingerovy rovnice, Riccatiho rovnici pro $a_0(r)$ a ECS metody s výsledky od dalších autorů. ¹ je převzatý z [4] a ² je převzatý z [14].



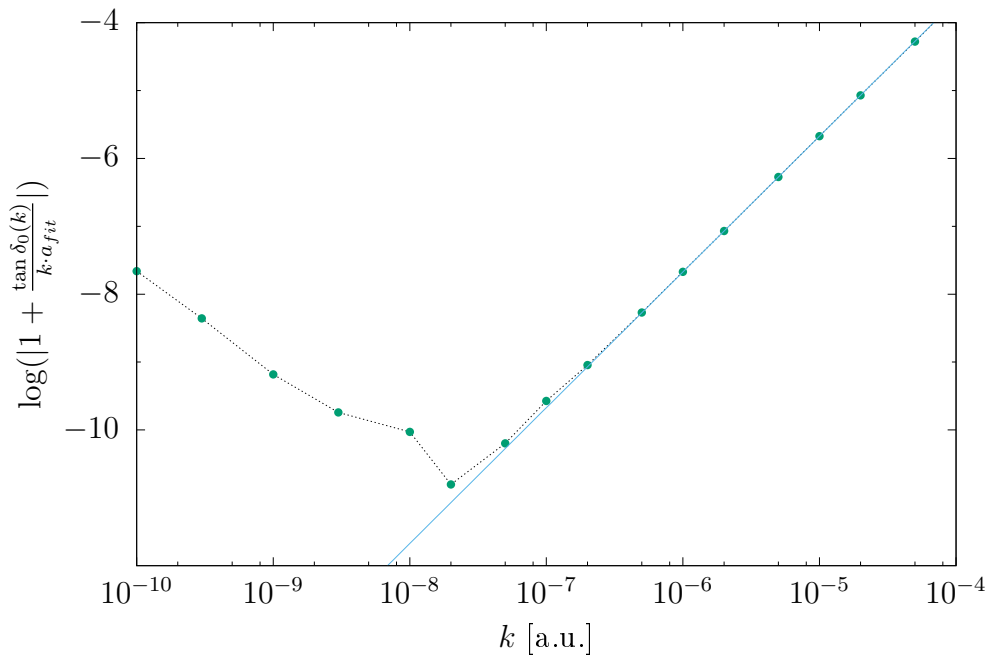
Obrázek 3.11: Přesnost výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0(k)$ vztaheného k rozptylové délce získané řešením Riccatiho rovnice (1.16) v závislosti na k pro parametr $R_c = 23,165$.



Obrázek 3.12: Přesnost výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0$ jako funkce koncového bodu kontury R_{max} pro potenciál Cs-Cs dimeru s parametrem $R_c = 23,165$ pro jednotlivá vlnová čísla k .



Obrázek 3.13: Přesnost výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0$ jako funkce koncového bodu reálné části kontury R_0 pro potenciál Cs-Cs dimeru s parametrem $R_c = 23,165$ pro jednotlivá vlnová čísla k .



Obrázek 3.14: Přesnost výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0(k)$ v závislosti na k vztažené k rozptylové délce získané kvadratickým fitem závislosti (1.10).

Závěr

V této bakalářské práci jsme se seznámili se čtyřmi numerickými metodami pro výpočet rozptylové délky a_0 na případech modelového a empirického potenciálu. Jejich výsledky jsme srovnali s výsledky od jiných autorů, přičemž jsme metodami FEM-DVR-ECS, řešením Riccatiho rovnice a přímou integrací Schrödingerovy rovnice získali rozptylové délky, které byly pouze o 2 až 3 platné cifry méně přesné než velmi přesné výsledky uvedené v [14]. Demonstrovali jsme, že metoda fázové funkce není vhodná pro výpočty rozptylových délek, neboť nedokáže vypočítat dostatečně přesná fázová posunutí δ_0 pro velmi nízká vlnová čísla k .

Ověřili jsme, že metoda vnějšího komplexní škálování je vhodná i pro velmi malá vlnová čísla k a díky své rychlé a efektivní implementaci má široké praktické použití pro výpočet rozptylové délky a_0 . Riccatiho rovnice pro funkci rozptylové délky ve spojení s Bulirschovou-Stoerovou metodou je velmi zajímavou alternativou pro výpočet rozptylové délky a_0 .

Seznam použité literatury

- [1] John R. Taylor. *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*. DOVER PUBN INC, 2006.
- [2] Jiří Formánek. *Úvod do kvantové teorie*. Academia, 1983.
- [3] Otto Hinckelmann and Larry Spruch. Low-energy scattering by long-range potentials. *Physical Review A*, 3(2):642–648, feb 1971.
- [4] M. Marinescu. Computation of the scattering length and effective range in molecular physics. *Physical Review A*, 50(4):3177–3180, oct 1994.
- [5] F. Calogero. *Variable phase approach to potential scattering*. Mathematics in science and engineering. Academic Press, 1967.
- [6] Vitor D. Viterbo, Nelson H.T. Lemes, and João P. Braga. Variable phase equation in quantum scattering. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 36(1):1–5, mar 2014.
- [7] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes*. Cambridge University Pr., 2007.
- [8] Ernst Hairer, Syvert P. Nørsett, and Gerhard Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I*. Springer, 1993.
- [9] H Ouerdane, M J Jamieson, D Vrinceanu, and M J Cavagnero. The variable phase method used to calculate and correct scattering lengths. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 36(19):4055–4063, sep 2003.
- [10] C W McCurdy, M Baertschy, and T N Rescigno. Solving the three-body coulomb breakup problem using exterior complex scaling. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 37(17):R137–R187, aug 2004.
- [11] T. N. Rescigno, M. Baertschy, D. Byrum, and C. W. McCurdy. Making complex scaling work for long-range potentials. *Physical Review A*, 55(6):4253–4262, jun 1997.
- [12] Roger G. Newton. *Scattering Theory of Waves and Particles*. Dover Publications Inc., 2003.
- [13] G. F. Gribakin and V. V. Flambaum. Calculation of the scattering length in atomic collisions using the semiclassical approximation. *Physical Review A*, 48(1):546–553, jul 1993.
- [14] M. Šulc, R. Čurík, and J. Horáček. Efficient solution of scattering equations by combination of r-matrix and lanczos methods. *The European Physical Journal D*, 57(2):187–196, feb 2010.

Seznam obrázků

3.1	Graf zobrazující nenormalizovanou vlnovou funkci $u_0(r)$ pro $k = 0$ s vyznačenými asymptotickým chováním a rozptylovou délkou a_0 na ose. Integrovali jsme pomocí Bulirschovy-Stoerovy metody s přibližně 2800 integračními kroky.	11
3.2	Graf zobrazující konvergenci metody přímé integrace rovnice (1.4) k přesně určené rozptylové délce a_0 v závislosti na koncovém bodě r . Integrovali jsme pomocí Bulirschovy-Stoerovy metody s přibližně 2800 integračními kroky.	11
3.3	Graf zobrazující přiblížení efektivního poloměru vztahované k rozptylové délce a_0 s kvadratickým fitem pro hodnoty na intervalu $(10^{-7}, 10^{-5})$ pro metodu fázové funkce (1.14) řešenou Bulirschovou-Stoerovou metodou pro exponenciálně tlumený potenciál.	13
3.4	Graf zobrazuje průběh fázové funkce $\delta_0(r)$ pro $k = 10^{-5}$	13
3.5	Graf průběhu $\vartheta(\phi)$ v blízkosti $\frac{\pi}{2}$	14
3.6	Konvergence funkce rozptylové délky $a_0(r)$ k hledané rozptylové délce a_0 v závislosti na vzdálenosti od $\frac{\pi}{2}$	14
3.7	Přesnost výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0(k)$ pro vnější komplexní škálování a kvadratická ERT extrapolace hodnot z intervalu $(10^{-10}, 10^{-5})$	16
3.8	Graf zobrazující nenormalizovanou reálnou a imaginární část rozptylové vlnové funkce u_0 pro $k = 10^{-5}$	16
3.9	Graf zobrazující konvergenci metody přímé integrace rovnice (1.4) k výsledné rozptylové délce a_0 v závislosti na koncovém bodě r a parametru R_c potenciálu Cs dimeru.	19
3.10	Graf zobrazující konvergenci řešení Riccatiho rovnice (1.16) $a_0(r)$ k výsledné rozptylové délce v závislosti na vzdálenosti od koncového bodu $\frac{\pi}{2}$ a parametru R_c potenciálu Cs dimeru.	19
3.11	Přesnost výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0(k)$ vztahového k rozptylové délce získané řešením Riccatiho rovnice (1.16) v závislosti na k pro parametr $R_c = 23,165$	23
3.12	Přesnost výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0$ jako funkce koncového bodu kontury R_{max} pro potenciál Cs-Cs dimeru s parametrem $R_c = 23,165$ pro jednotlivá vlnová čísla k	23
3.13	Přesnost výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0$ jako funkce koncového bodu reálné části kontury R_0 pro potenciál Cs-Cs dimeru s parametrem $R_c = 23,165$ pro jednotlivá vlnová čísla k	24
3.14	Přesnost výrazu $-\frac{1}{k} \tan \delta_0(k)$ v závislosti na k vztahové k rozptylové délce získané kvadratickým fitem závislosti (1.10).	24