



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ  
FAKULTA**  
Univerzita Karlova

## **BAKALÁŘSKÁ PRÁCE**

Matěj Konvalinka

# **Analýza srážkových procesů v kvantové mechanice s použitím Siegertových stavů**

Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Zdeněk Mašín, Ph.D.

Studijní program: Studijní program fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2021

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V ..... dne .....

Podpis autora

Chtěl bych zde poděkovat vedoucímu své práce Mgr. Zdeňku Mašínovi, Ph.D. za všechny poskytnuté zdroje a především za neocenitelný čas věnovaný konzultacím a pomoc při analýze a řešení problému.

Název práce: Analýza srážkových procesů v kvantové mechanice s použitím Siegertových stavů

Autor: Matěj Konvalinka

Ústav: Ústav teoretické fyziky

Vedoucí bakalářské práce: Mgr. Zdeněk Mašín, Ph.D., Ústav teoretické fyziky

Abstrakt: Hlavním úkolem práce je analyzovat interakci částice se sféricky symetrickým polem v kvantové mechanice pomocí tzv. Siegertových stavů. V první kapitole hledáme rozptylové řešení analyticky pro radiální potenciálovou jámu. Popisujeme dále tzv. Siegertovy stavy a ukazujeme jejich vliv na pozorovatelné veličiny (účinný průřez interakce). V druhé kapitole implementujeme numerické řešení Schrödingerovy rovnice pomocí metody R-matice v bázi B-spline funkcí. Ve třetí kapitole prezentujeme výsledky numerické metody a porovnááme je s analytickým řešením. Hlavním výsledkem práce je otestování numerické metody umožňující manipulaci s póly S-matice a analýzu jejich vlivu na účinný průřez.

Klíčová slova: teorie rozptylu, S-matice, teorie R-matic, resonance, virtuální stavy.

Title: Analysis of collision processes in quantum mechanics using Siegert states

Author: Matěj Konvalinka

Institute: Institute of Theoretical Physics

Supervisor: Mgr. Zdeněk Mašín, Ph.D., Institute of Theoretical Physics

Abstract: The main task of the work is to analyze the interaction of a particle with a spherically symmetric field in quantum mechanics using so-called Siegert states. In the first chapter we solve the scattering problem analytically for square well. Then we describe Siegert states and we demonstrate their influence on observable quantities (scattering cross of the interaction) using the analytic approach. In the second chapter we implement the numerical resolution of Schrödinger equation using the R-matrix method in the B-spline basis. In the third chapter we present results of the numerical method and validate it by comparison with the analytic solution obtained earlier. The main output of this work is implementation and verification of a numerical method enabling manipulation and analysis of S-matrix poles in simple radial scattering problems.

Keywords: Scattering theory, S-matrix, R-matrix theory, resonance, virtual state.

# Obsah

Úvod	2
<b>1 Analytické řešení</b>	<b>4</b>
1.1 Řešení pro konstantní potenciálovou jámu . . . . .	5
1.1.1 Vázané stavy . . . . .	7
1.1.2 Rozptylové řešení . . . . .	7
1.1.3 Účinný průřez . . . . .	8
1.2 S-matice a Siegertovy stavy . . . . .	11
1.3 Řešení Schrödingerovy rovnice pomocí metody R-matice . . . . .	15
<b>2 Popis numerické metody</b>	<b>18</b>
2.1 Báze B-spline funkcí . . . . .	18
2.2 Řešení Schrödingerovy rovnice pomocí báze B-spline funkcí . . . . .	20
2.2.1 Hledání vázaných stavů přímou diagonalizací . . . . .	21
2.2.2 Aplikace na metodu R-matice . . . . .	21
2.3 Gauss-Legendrova kvadratura . . . . .	21
<b>3 Výsledky</b>	<b>23</b>
3.1 Výpočet vázaných stavů přímou diagonalizací . . . . .	23
3.2 Výpočet S-matice . . . . .	26
3.2.1 Moment hybnosti $l=0$ . . . . .	27
3.2.2 Moment hybnosti $l=3$ . . . . .	29
3.2.3 Účinný průřez v závislosti na potenciálu . . . . .	33
3.3 Odebírání pólů S-matice . . . . .	35
3.3.1 Použití Cauchyova vzorce . . . . .	35
3.3.2 Odebrání pólu Cauchyovým vzorcem . . . . .	36
3.3.3 Přímé odečtení pólu . . . . .	36
3.3.4 Účinný průřez v závislosti na potenciálu . . . . .	38
<b>4 Diskuze</b>	<b>42</b>
4.1 Hledání vázaných a Siegertových stavů . . . . .	42
4.2 Fázový posuvy a účinné průřezy s odečteným pólem . . . . .	42
4.3 Porovnání odečtení jednoho a dvou pólů . . . . .	43
4.4 Analýza rezonančních struktur . . . . .	43
<b>Závěr</b>	<b>44</b>
<b>Seznam použité literatury</b>	<b>45</b>
<b>Seznam obrázků</b>	<b>46</b>
<b>Seznam tabulek</b>	<b>48</b>

# Úvod

Hlavním předmětem zkoumání této práce jsou nerelativistické srážkové procesy v kvantové mechanice. Studujeme interakci nerelativistické částice (elektronu) se sféricky symetrickým potenciálem. Míru interakce dopadající částice s potenciálem měříme tzv. účinným průřezem, který vyjadřuje poměr počtu rozptýlených částic k toku dopadajících částic (viz [1, 2]). Účinný průřez v závislosti na energii dopadající částice spočítáme z tzv. S-matice, kterou získáme řešením Schrödingerovy rovnice pro kladné energie dopadající částice. Tato tzv. rozptylová řešení jsou plně určena zvolenou energií a asymptotickými rozptylovými okrajovými podmínkami.

Průběh účinného průřezu může být velmi komplikovaný a ovlivněný přítomností pólů S-matice v komplexní rovině energie (či ekvivalentně v komplexní rovině hybnosti). Tyto póly se objevují pro komplexní energie, pro které existují řešení Schrödingerovy rovnice s odcházející okrajovou podmínkou, a příslušné stavy se nazývají rezonanční, virtuální a vázané stavy. Tyto tři typy stavů se souhrnně nazývají Siegertovy stavy [3] a liší se od fyzikálních řešení získaných pro reálné energie.

Důležitá role Siegertových stavů v atomové a molekulové fyzice je velmi dobře známá např. z jaderné fyziky a z oblasti srážek elektronů s atomy a molekulami [3, 2], ale také z atomových a molekulových srážek, tedy chemických reakcí [4]. Konkrétně rezonanční stavy jsou charakterizované energií  $E_R$  a šířkou  $\Gamma$ , které určují polohu rezonančního stavu v komplexní rovině:

$$E = E_R - i\frac{\Gamma}{2}. \quad (1)$$

Šířka rezonance je nepřímě úměrná tzv. době života rezonance. Rezonanční stavy se tedy interpretují jako dočasně vázané stavy celého systému. Čím menší je šířka rezonance, tím výrazněji se rezonance projevuje v účinném průřezu. Oproti tomu virtuální stavy leží na imaginární ose komplexní hybnosti a tedy pro ně nelze definovat dobu života. Přesto tyto stavy nacházející se blízko počátku výrazně ovlivňují účinný průřez pro nízké energie. Podobným způsobem ovlivňují účinný průřez slabě vázané stavy.

Nicméně ne všechny struktury v účinných průřezích jsou nutně způsobeny rezonancemi s dlouhou dobou života nebo virtuálními a vázanými stavy. Pro fyzikální interpretaci spočítaných a naměřených účinných průřezů je tedy výhodné znát polohy pólů S-matice (Siegertovy stavy) a tedy určit, které struktury jsou způsobeny Siegertovými stavy ležícími blízko reálné osy a které jsou jiného původu.

Odcházející okrajová podmínka Siegertových stavů způsobuje, že virtuální a rezonanční stavy exponenciálně divergují a nejsou tedy normalizovatelná řešení. V důsledku je tedy netriviální získat tato řešení standardními numerickými metodami.

Cílem této práce je implementovat a otestovat metodu R-matice [5, 6] na řešení 1D radiální Schrödingerovy rovnice a studovat její aplikaci na rozptylová řešení, hledání Siegertových stavů a následnou manipulaci (odstraňování) pólů S-matice. Tato metoda nám umožní získat stejně snadno řešení na reálné ose i divergentní

Siegertovy stavy. Metoda R-matice bude zkombinovaná s rozvojem radiální vlnové funkce do báze B-spline funkcí. Aplikace těchto funkcí na problémy v atomové fyzice byla detailně popsána v přehledovém článku [7], ze kterého budeme čerpat.

Získáme tedy numerickou metodu aplikovatelnou na libovolné krátkodosahové radiální potenciály, kterou lze efektivně použít ke studiu vlivu jednotlivých Siegertových stavů na pozorovatelné na reálné ose.

V minulosti byl vliv Siegertových stavů na účinné průřezy studován numericky pomocí metody tzv. Jostových funkcí [4], která je ale zatím dostupná pouze pro jednoduché modelové systémy. Výhoda naší metody hledání Siegertových stavů pomocí R-matice spočívá především v tom, že ji lze v budoucnu implementovat do již existujících R-maticových kódů pro výpočty na více-elektronových systémech [6].

Pro vývoj naší metody si zvolíme jednoduchý problém srážky elektronu s pravouhloú potenciálovou jámou, který lze řešit analyticky. Poprvé byl problém Siegertových stavů v tomto systému detailně studován analyticky v [8] a později například v [9] a pro širší třídu potenciálů např. v [10].

V části 1 popisujeme nejprve Schrödingerovu rovnici pro jednoduché srážkové procesy pro potenciál, který jsme schopni analyticky řešit, a zavádíme účinný průřez. V podkapitole 1.2 vysvětlujeme a zavádíme pojem S-matice a jejich pólů jako Siegertových stavů. Dále v části 2 vysvětlujeme numerickou metodu R-matice a aproximace vlnové funkce pomocí B-spline funkcí a jejich aplikaci. Kapitola 3 obsahuje výsledky numerické metody, tj. ukázkou jejího použití na analyticky řešitelný problém a v podkapitole 3.3 výsledky odstraňování pólů S-matice. V kapitole 4 se nachází diskuze získaných výsledků, především pak výsledků odstraňování pólů z 3.3.

# 1. Analytické řešení

Naším úkolem je vyřešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici pro jednu částici bez spinu

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

$$\hat{H} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right], \quad (1.2)$$

kde  $\hat{H}$  je operátor Hamiltoniánu, jenž je součtem kinetické energie a potenciálu,  $E$  je příslušná energie vlastního stavu,  $m$  je hmotnost částice a  $\mathbf{r} = (r, \theta, \phi)$  označuje kolektivně sférické souřadnice částice. Řešení rovnice (1.1) lze pak pro sférický potenciál  $V(\mathbf{r}) = V(r)$  hledat rozvojem vlnové funkce do parciálních vln

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_l R_{l,p}(r) Y_{l,0}(\theta, \phi) = \sum_l \frac{\chi_{l,p}(r)}{r} Y_{l,0}(\theta, \phi), \quad (1.3)$$

kde  $Y_{l,0}(\theta, \phi)$  jsou sférické harmoniky,  $l$  je kvantové číslo momentu hybnosti a  $p$  je hybnost částice, jež je s energií  $E$  spojená dle následujícího vztahu,

$$E = \frac{\hbar^2 p^2}{2m}. \quad (1.4)$$

Vložení vztahu (1.4) do rovnice (1.1) a projekcí na sférické harmoniky dostaneme po triviálních úpravách radiální diferenciální rovnici pro parciální vlny s příslušnou okrajovou podmínkou

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + p^2 \right] \chi_{l,p}(r) = 0, \quad (1.5)$$

$$\chi_{l,p}(0) = 0. \quad (1.6)$$

V této rovnici jsme zavedli tzv. redukovaný potenciál

$$U(r) = \frac{2m}{\hbar^2} V(r). \quad (1.7)$$

V dalším budeme uvažovat pouze krátkodosahové sféricky symetrické potenciály  $V(\mathbf{r}) = V(r)$  s asymptotickým chováním [2]

$$V(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\cong} O\left(\frac{1}{r^{3+\epsilon}}\right), \quad \epsilon > 0. \quad (1.8)$$

Diferenciální rovnici (1.5) jsme schopni vyřešit analytickými nástroji jen pro několik málo potenciálů. Jedním z nich je právě pravoúhlá potenciálová jáma ve třech dimenzích. Pro jámu o šířce  $a$  a hloubce  $V_0$  má potenciál  $V(r)$  následující tvar

$$V = \begin{cases} V_0 & , \quad r \leq a, \\ 0 & , \quad r > a. \end{cases} \quad (1.9)$$

V této práci dále předpokládám, že  $V_0 < 0$ . Podle energie  $E$  pak rozlišujeme, zda je příslušný vlastní stav hamiltoniánu vázaný nebo rozptylový. Pro tyto stavy požadujeme různé okrajové podmínky pro  $r \rightarrow \infty$ :



- **Vázaný stav** může existovat pro zápornou energii  $E < 0$ , čili imaginární hybnost  $p = \sqrt{2mE/\hbar}$ . Jak dále vyplyne, nutnou okrajovou podmínkou pro vlnovou funkci je exponenciální pokles v nekonečnu, tedy  $\chi_{l,p} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{-Kr}$  pro  $K > 0$ .
- **Rozptylový stav** získáme pro kladnou energii  $E > 0$ , tedy reálnou hybnost  $p = \sqrt{2mE/\hbar}$ , pokud má hamiltonián spojité spektrum. V nekonečnu má vlnová funkce oscilující charakter a příslušné okrajové podmínky budou diskutovány níže.

Ve zbytku práce, pokud není řečeno jinak, řešíme problém pro elektron, čili  $m = m_e$ , a přecházíme od jednotek SI do atomových jednotek [11], ve kterých platí

$$\hbar = 1 \quad , \quad m_e = 1. \quad (1.10)$$

V těchto jednotkách je energie elektronu s hybností elektronu spojená vztahem

$$E = \frac{p^2}{2} \quad (1.11)$$

V práci se vyskytují výrazy, kde kombinujeme formalismus hybností  $p$  a energií  $E$ , pokud není řečeno jinak předpokládám v tom případě platnost vztahu (1.11). Dále v celé práci píšeme namísto  $\chi_{l,p}$ , resp.  $\chi_{l,E}$  pro zkrácení pouze  $\chi_l$ .

## 1.1 Řešení pro konstantní potenciálovou jámu

Mějme tedy sféricky symetrický potenciál (1.9) a k němu příslušný redukovaný potenciál o konstantní hodnotě  $U_0$ . Řešení tohoto problému je dopodrobna rozebráno v [1] a [2], odkud v této kapitole také čerpám. Rovnici (1.5) pro  $U(r) = U_0$  řeší Riccati-Besselovy funkce  $\hat{j}_l(kr)$  a  $\hat{n}_l(kr)$ . Např. pro  $l = 0$  nabývají Riccati-Besselovy funkce jednoduchého tvaru

$$\hat{j}_l(z) = \sin z \quad , \quad \hat{n}_l(z) = \cos z. \quad (1.12)$$

Mezi Riccatiho a sférickými Besselovými funkcemi  $j_l$  a  $n_l$  platí vztah (viz [2])

$$\hat{j}_l(z) = z j_l(z) \quad , \quad \hat{n}_l(z) = -z n_l(z), \quad (1.13)$$

čili pokud Riccatiho funkce řeší rovnici (1.5) pro  $\chi_{l,p}$ , potom radiální část  $R_{l,p}$  vlnové funkce  $z$  (1.3) řeší sférické Besselovy funkce. Tvar sférických Besselových či Riccati-Besselových funkcí můžeme nalézt v tabulkách (prvních několik je v [2]), kupříkladu v Mathematice (a i v mnoha jiných programovacích jazycích) jsou Besselovy funkce již implementované.

Asymptotické chování Riccati-Besselových funkcí v známé [2]:

$$\hat{j}_l(pr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin\left(pr - l\frac{\pi}{2}\right) \quad , \quad \hat{n}_l(pr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \cos\left(pr - l\frac{\pi}{2}\right), \quad (1.14)$$

a pro  $r \rightarrow 0$

$$\hat{j}_l(pr) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{(pr)^{l+1}}{(2l+1)!!} \quad , \quad \hat{n}_l(pr) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{(2l-1)!!}{(pr)^{-l}}. \quad (1.15)$$

Je tedy zřejmě, že řešení v okolí nuly musí být kvůli podmínce (1.6) úměrné pouze funkci  $\hat{j}_l$ , tedy parciální funkce  $\chi_l$  zde má tvar

$$\chi_l^{int}(r) = D\hat{j}_l(k_{int}r) \quad , \quad r \leq a, \quad (1.16)$$

kde  $D$  je nezávislá konstanta a veličina  $k_{int}$  má rozměr hybnosti a je závislá na  $p$  a  $U_0$  dle

$$k_{int} = \sqrt{U_0 + p^2}. \quad (1.17)$$

Řešení úlohy mimo jámu a tedy i určení nezávislé konstanty se pak různí podle toho, zda se jedná o vázaný nebo rozptylový stav. Obecné řešení je dáno kombinací obou nezávislých řešení

$$\chi_l^{ext}(r) = A\hat{j}_l(k_{ext}r) + B\hat{n}_l(k_{ext}r) \quad , \quad r > a, \quad (1.18)$$

ve kterém vystupuje opět veličina  $k_{ext}$  rozměru hybnosti, pro niž zde platí

$$k_{ext} = p \quad (1.19)$$

a dále dvě konstanty  $A$  a  $B$ .

Řešení v jámě a mimo jámu jsou spolu svázány napojovacími podmínkami, jimiž rozumíme podmínku spojitosti vlnové funkce a její první derivace v bodě  $r = a$ . Napojovací podmínky lze vyjádřit vztahem

$$\left. \frac{d\chi_l^{int}(r)}{dr} \right|_{r=a} \chi_l^{ext}(a) = \left. \frac{d\chi_l^{ext}(r)}{dr} \right|_{r=a} \chi_l^{int}(a). \quad (1.20)$$

S pomocí vztahů (1.14) a součtových vzorců pro goniometrické funkce nyní zjistíme asymptotické chování funkce  $\chi_l(r)$  pro velká  $r$ . Zavedeme-li konstantu  $\delta_l$  (tzv. fázový posuv)

$$\delta_l = \arctan\left(\frac{B}{A}\right), \quad (1.21)$$

můžeme popsat chování  $\chi_l(r)$  v nekonečnu jako

$$\chi_l(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} A \sin\left(pr - l\frac{\pi}{2}\right) + B \cos\left(pr - l\frac{\pi}{2}\right) \quad (1.22a)$$

$$\sim \cos \delta_l \sin\left(pr - l\frac{\pi}{2}\right) + \sin \delta_l \cos\left(pr - l\frac{\pi}{2}\right) \quad (1.22b)$$

$$= \sin\left(pr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l\right). \quad (1.22c)$$

Vidíme nyní, že veličina  $\delta_l$  má opravdu význam fázového posuvu. Pokud hledáme pouze fázový posuv pro velká  $r$ , postačí nám právě vyjádření napojovacích podmínek z (1.20), jež lze vyjádřit pomocí Riccati-Besselových funkcí jako

$$\tan \delta_l = \frac{p\hat{j}_{l-1}(pa)\hat{j}_l(k_{int}a) - k_{int}\hat{j}_{l-1}(k_{int}a)\hat{j}_l(pa)}{p\hat{n}_{l-1}(pa)\hat{j}_l(k_{int}a) - k_{int}\hat{n}_l(pa)\hat{j}_{l-1}(k_{int}a)}. \quad (1.23)$$

V dalších výsledcích pro konstantní potenciálovou jámu (např. v tabulkách 1.1 a 1.2) píšeme potenciál  $U_0$  v jednotkách  $a^{-2}$  a hybnost  $p$  v  $a^{-1}$ , kde  $a$  je poloměr potenciálové jámy.

### 1.1.1 Vázané stavy

Vázaným stavem označujeme normalizovatelné řešení pro zápornou energii  $E$ . Pro hybnost  $p$  tak platí

$$p = i|p|, \quad (1.24)$$

čili hybnost je imaginární. Ukažme nyní, že z tohoto plyne okrajová podmínka na vlnovou funkci v nekonečnu. Zavedme tzv. Riccati-Hankelovy funkce (viz [2])

$$\hat{h}_l^{(\pm)}(r) = \hat{n}_l(r) \pm i\hat{j}_l(r). \quad (1.25)$$

Tyto funkce zřejmě tvoří bázi komplexních řešení, která je ekvivalentní bázi reálných řešení  $\hat{j}_l$  a  $\hat{n}_l$ . S využitím asymptotiky Riccati-Besselových funkcí v (1.14) snadno nahlédneme i asymptotiku funkcí Hankelových

$$\hat{h}_l^{(\pm)} \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \exp \left[ \pm i \left( pr - l \frac{\pi}{2} \right) \right]. \quad (1.26)$$

Z tohoto vzorce plyne, že pro hybnost (1.24) bude mít funkce  $\hat{h}_l^{(+)}(pr)$  v nekonečnu exponenciální pokles, zatímco  $\hat{h}_l^{(-)}(pr)$  exponenciální růst: funkce  $\hat{h}_l^{-}$  tedy nepatří do Hilbertova prostoru. Z tvaru funkcí je zřejmé, že vázaný stav implikuje okrajovou podmínku v nekonečnu

$$\chi_l(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \exp(-|p|r). \quad (1.27)$$

V případě vázaného stavu má tedy řešení ve vnější, klasicky zakázané oblasti tvar

$$\chi_l^{ext}(r) = C\hat{h}_l^{(+)} \quad , \quad r > a. \quad (1.28)$$

Tento tvar tedy splňuje okrajovou podmínku. Napojovací a normalizační podmínky nám celkem dávají tři rovnice, jimiž určíme konstanty  $C$  a  $D$  z rovnic (1.16) a (1.28) a hybnost vázaného stavu. Platí tedy, že hybnost u vázaného stavu nabývá jen speciální hodnoty vyhovující těmto podmínkám; resp. spektrum vázaných stavů hamiltoniánu je bodové.

### 1.1.2 Rozptylové řešení

Pro popis jednoduché srážky musíme najít rozptylové řešení rovnice (1.1). Rozptylovým řešením rozumíme případ kladné energie  $E > 0$ , tj. reálné hybnosti ve spojité části spektra. Asymptotický vztah (1.26) nám dále říká, že funkce  $\chi_l$  bude oscilující.

Zvolme konkrétní okrajovou podmínku pro  $r \rightarrow \infty$ . Stejně jako ve [1] volíme pro velké  $r$  okrajovou podmínku

$$\psi(\mathbf{r}) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{ipz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ipr}}{r}, \quad (1.29)$$

jíž popisujeme přicházející rovinnou vlnu  $e^{ipz}$  a rozptýlenou sférickou vlnu  $e^{ipr}$ . Koeficient  $f(\theta, \phi)$  nazýváme amplitudou rozptylu. V případě sféricky symetrického interakčního potenciálu nezávisí tato amplituda na úhlu  $\phi$ , tedy  $f(\theta, \phi) = f(\theta)$ .

### 1.1.3 Účinný průřez

Účinný průřez  $\sigma$  s rozměrem plochy je veličina, kterou měříme intenzitu interakce přicházející částice s částicí terčíku. Mějme terčík a tok přicházejících částic ostřelujících terčík. Při dostatečném počtu měření můžeme účinný průřez  $\sigma$  dle [2] vyjádřit vztahem

$$n_{inc}\sigma = N_{sc}, \quad (1.30)$$

kde  $n_{inc}$  je počet přicházejících částic na jednotku plochy terčíku a  $N_{sc}$  je celkový počet rozptýlených částic. Vzorci (1.30) v kvantové mechanice odpovídá výraz pro diferenciální účinný průřez

$$d\sigma = \frac{\mathbf{j}_{out}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{s}}{|\mathbf{j}_{in}(\mathbf{r})|}, \quad (1.31)$$

kde  $\mathbf{j}_{in}(\mathbf{r})$  a  $\mathbf{j}_{out}(\mathbf{r})$  značí hustotu toku pravděpodobnosti přicházející resp. odcházející vlny,  $d\sigma$  diferenciální účinný průřez a  $d\mathbf{s}$  je vektorový element plochy. Veličinu

$$\sigma = \int d\sigma \quad (1.32)$$

nazýváme celkovým neboli integrálním účinným průřezem.

Odvodíme nyní účinný průřez  $\sigma$  pro rozptylové řešení (pokud není řečeno jinak, čerpám při odvozování z [1]). Vyjádříme hustotu toku pravděpodobnosti vlnové funkce

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2im} (\psi^*(\mathbf{r})\nabla\psi(\mathbf{r}) + \psi(\mathbf{r})\nabla\psi^*(\mathbf{r})), \quad (1.33)$$

kde funkce  $\psi(\mathbf{r})$  je rozptylové řešení rovnice (1.1) splňující okrajovou podmínku (1.29). Vyjádříme tedy dle vzorce (1.33) hustotu toku pravděpodobnosti přicházející vlny  $\mathbf{j}_{in}(\mathbf{r})$  a odcházející vlny  $\mathbf{j}_{out}(\mathbf{r})$  z rovnice (1.29)

$$\mathbf{j}_{in}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar k}{m} \hat{\mathbf{e}}_z, \quad \mathbf{j}_{out}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta)|^2 \frac{\hat{\mathbf{e}}_r}{r^2} + O\left(\frac{1}{r^3}\right), \quad (1.34)$$

kde vektory  $\hat{\mathbf{e}}_z$  a  $\hat{\mathbf{e}}_r$  jsou jednotkové vektory ve směru souřadnice  $z$ , resp. ve směru radiálním.

Vyjádříme vektorový element plochy  $d\mathbf{s}$  ze vzorce (1.31) jako  $d\mathbf{s} = \hat{\mathbf{e}}_r r^2 d\Omega$ , kde  $d\Omega$  je element prostorového úhlu a dosadíme společně s výrazy (1.34) do vztahu (1.31). Získáváme tak vzorec nejen pro diferenciál účinného průřezu ale také pro diferenciální účinný průřez  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  vyjádřený rozptylovou amplitudou  $f(\theta)$

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega, \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2. \quad (1.35)$$

Integrální účinný průřez  $\sigma$  spočteme ze vzorce

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega. \quad (1.36)$$

Pro sférické harmoniky  $Y_{l0}$  platí vztah

$$Y_{l0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta), \quad (1.37)$$

kde  $P_l(\cos \theta)$  jsou Legendrovy polynomy. Rozviňme nyní přicházející vlnu a amplitudu rozptylu z okrajové podmínky (1.29) do parciálních vln

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \frac{\hat{j}_l(kr)}{kr} P_l(\cos \theta), \quad (1.38)$$

$$f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l \frac{e^{ikr}}{r} P_l(\cos \theta), \quad (1.39)$$

kde  $f_l$  jsou rozptylové amplitudy parciální vlny. Porovnáním dvou předcházejících vztahů s asymptotikou plného řešení, viz (1.3) a (1.22), získáme asymptotiku parciální radiální funkce  $\chi_l$

$$\chi_l \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} i^l \left[ \left( \frac{2l+1}{k} i f_l \right) \sin \left( kr - l \frac{\pi}{2} \right) + f_l \cos \left( kr - l \frac{\pi}{2} \right) \right]. \quad (1.40)$$

Ze vztahů (1.18) a (1.21) získám opětovným použitím součtových vzorců goniometrických funkcí výraz pro rozptylové amplitudy pomocí fázových posuvů

$$f_l = \frac{2l+1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1). \quad (1.41)$$

Dosadme získané výsledky do vzorce (1.35) pro diferenciální účinný průřez a provedme integraci přes prostorový úhel. Díky ortogonalitě Legendrových polynomů pak integrální účinný průřez vyjde jako suma čtverců rozptylových amplitud parciálních vln

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \quad , \quad \sigma_l = \frac{4\pi}{2l+1} |f_l|^2, \quad (1.42)$$

kde  $\sigma_l$  je tzv. parciální účinný průřez. S využitím již získaného vztahu (1.41) dostaneme parciální účinný průřez jako funkci fázového posuvu  $\delta_l$ ,

$$\sigma_l(p) = \frac{4\pi}{p^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l, \quad (1.43)$$

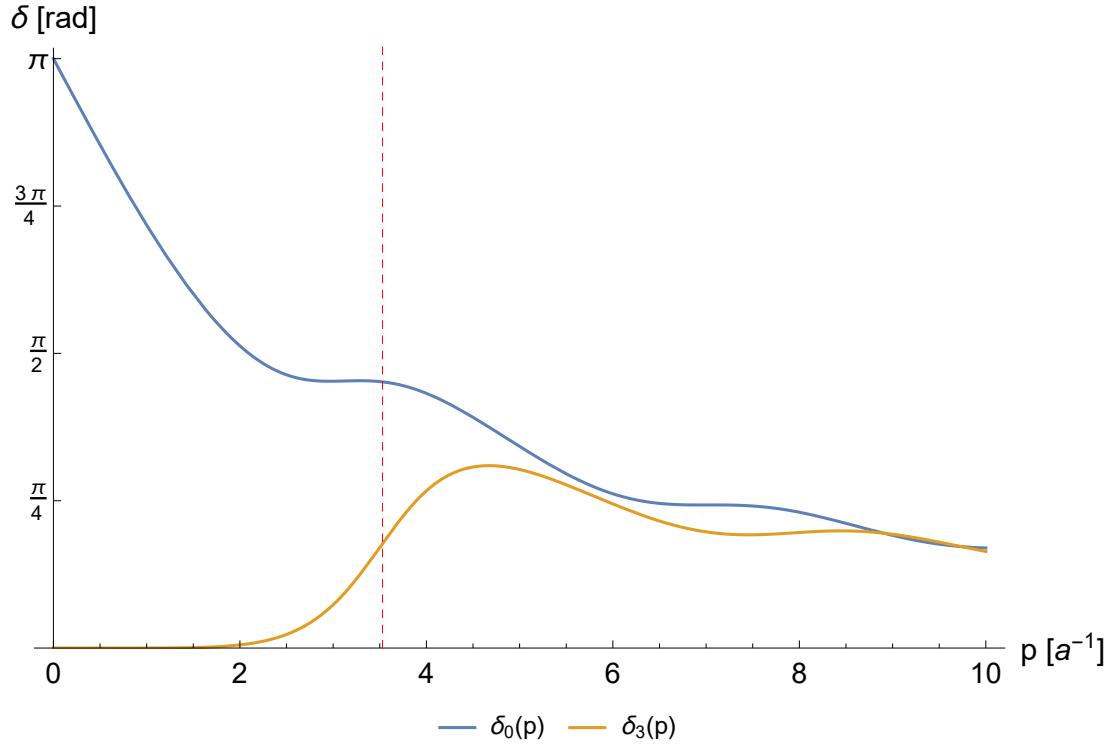
čímž získáváme poslední důležitý analytický výsledek této části.

V programu Mathematica jsem vyčíslil průběh  $\delta_l(p)$  a  $\sigma_l(p)$  pro potenciálovou jámu a  $l = 0, 1, \dots, 5$ , podle příkladu v [2] v kapitole 11. Na obr. 1.1 a 1.2 jsou fázové posuvy a účinné průřezy pro případ  $U_0 = 11.4 a^{-2}$ , kde  $a$  je poloměr jámy.

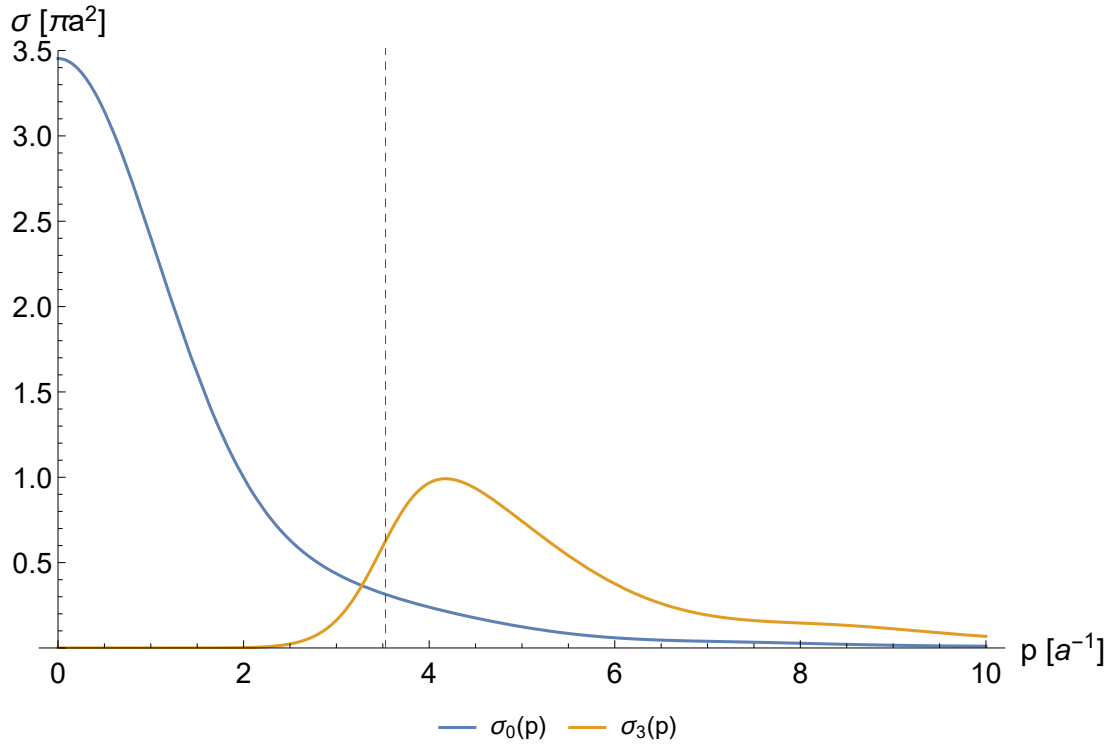
Případ  $l = 0$  je výjimečný tím, že u něj nepozorujeme rezonanční stavy (viz níže) a průběh obou funkcí je velmi specifický. Naopak u  $\delta_3(p)$  pozorujeme typický rezonanční tvar fázového posuvu a tedy rezonanční maximum v  $\sigma_3(p)$ . Tímto tzv. Breit-Wignerovým tvarem rozumíme prudký nárůst fázového posuvu o  $\pi$  v okolí rezonanční hybnosti nebo energie (její reálné složky) vyjádřený vztahem

$$\sin \delta_{res}(E) = \frac{\Gamma/2}{[(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2]^{\frac{1}{2}}}, \quad (1.44)$$

kde  $E_R$  značí reálnou část energie rezonančního pólu a  $\Gamma$  imaginární část. Breit-Wignerův peak funkce  $\delta_l(E)$  má šířku  $\Gamma$  a pozorujeme ho v bodě  $E_R$  [2].



Obrázek 1.1: Průběh fázového posuvu  $\delta_l(p)$  pro  $l = 0$  a  $l = 3$  v případě potenciálové jámy s  $U_0 = 11.4 a^{-2}$ . Svislá čára v grafu značí existenci rezonančního pólu S-matice pro  $l = 3$  s reálnou částí hybnosti  $\Re(p) \doteq 3.53 a^{-1}$ .



Obrázek 1.2: Průběh účinného průřezu  $\sigma_l(p)$  pro  $l = 0$  a  $l = 3$  v případě potenciálové jámy s  $U_0 = 11.4 a^{-2}$ . Svislá přerušovaná čára v grafu značí existenci rezonančního pólu S-matice pro  $l = 3$  s reálnou částí hybnosti  $\Re(p) \doteq 3.53 a^{-1}$ .

## 1.2 S-matice a Siegertovy stavy

V této kapitole zavádíme novou funkci komplexní hybnosti, S-matici  $S(p)$ , a řešení Schrödingerovy rovnice pro hybnosti v komplexní rovině. Ukazujeme, že tato řešení, jinak též Siegertovy stavy jsou spjata s póly S-matice. Při jejich zavedení čerpám opět z [1] a [2].

Dosud jsme řešili Schrödingerovu rovnici (1.1) pouze pro reálné energie. Existují ale i řešení v komplexní rovině zvané Siegertovy stavy [3]. Tato řešení jsou definované okr. podmínkou

$$\chi_l(r) \sim \hat{h}_l^{(+)}(pr) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \exp(ipr) \quad , \quad p \in \mathbb{C}. \quad (1.45)$$

Víme již, že parciální účinný průřez pro dané  $l$  lze vypočíst dle vzorce (1.43). Tento vztah lze zapsat ekvivalentně

$$\sigma_l = \frac{\pi}{p^2}(2l+1)|e^{2i\delta_l(p)} - 1|^2 = \frac{\pi}{p^2}(2l+1)|S(p) - 1|^2, \quad (1.46)$$

kde nově zavádíme tzv. S-matici jako

$$S(p) = e^{2i\delta_l(p)}. \quad (1.47)$$

Je patrné, že průběh této S-matice přímo ovlivňuje účinný průřez. V tomto případě se jedná o skalární funkci, na matici přechází pro nesférické potenciály. Případné póly této funkce v komplexní rovině hybnosti  $p$  tedy ovlivňují pozorovatelné.

Zapišme funkci  $\chi_l$  z (1.18) pro  $r > a$  opět pomocí Riccati-Hankelových funkcí (1.25)

$$\chi_l(r) = f_l^-(p)h_l^{(-)}(pr) - f_l^+(p)h_l^{(+)}(pr), \quad (1.48)$$

kde  $f_l^-(p)$  a  $f_l^+(p)$  jsou nezávislé funkce hybnosti  $p$  (analogie  $A$  a  $B$  ze vztahu (1.18)). S pomocí rovnice (1.26) získáme asymptotický tvar

$$\chi_l(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{-i(pr - l\frac{\pi}{2})} - \frac{f_l^+(p)}{f_l^-(p)} e^{+i(pr - l\frac{\pi}{2})}. \quad (1.49)$$

Pro S-matici platí vztah

$$S(p) = \frac{f_l^+(p)}{f_l^-(p)}, \quad (1.50)$$

který získáme porovnáním rovnic (1.49) s (1.22)

$$\chi_l(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin\left(pr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \quad (1.51a)$$

$$\sim e^{-i(pr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} - e^{i(pr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l)} \quad (1.51b)$$

$$\sim e^{-i(pr - \frac{l\pi}{2})} - e^{2i\delta_l} e^{i(pr - \frac{l\pi}{2})}. \quad (1.51c)$$

Porovnáním (1.51c) s (1.49) dostáváme

$$S(p) = e^{2i\delta_l(p)} = \frac{f_l^+(p)}{f_l^-(p)}. \quad (1.52)$$

Tedy S-matici lze počítat přímo hledáním řešení pro  $r > a$  ve tvaru:

$$\chi_l(r) = N \left[ h_l^{(-)}(pr) - S(p)h_l^{(+)}(pr) \right], \quad (1.53)$$

kde  $N$  je normalizační konstanta, na jejíž volbě S-matice nezávisí.

S-matice  $S(p)$  je zřejmě ze své definice unitární funkce (pro reálný fázový posuv). Dále pro ni platí, že v komplexní rovině je symetrická podle imaginární osy – význam pro nás má ale pouze pravá polovina komplexní roviny, tj. hybnosti s  $\Re(p) > 0$ , které jsou blízko reálné ose, na které počítáme pozorovatelné.

Uvažujme nyní póly S-matice pro hybnost  $p$  v komplexní rovině (hledáme je tedy pouze v pravé polovině, ale pro každý pól mimo imaginární osu existuje symetrický pól v opačné polovině). Hledáním pólů se podrobně zabývá článek [8], kde je rozebrán především případ  $l = 0$ . Z (1.49) je zřejmé, že existence pólu je ekvivalentní s podmínkou

$$f_l^-(p) = 0, \quad (1.54)$$

kteřou můžeme při vyjádření funkce  $\chi_l$  výrazem (1.48) vyjádřit jako

$$\chi_l = f_l^+(p)h_l^+(pr) \quad , \quad r > a. \quad (1.55)$$

Vidíme, že existence pólu S-matice v bodě  $p$  je skutečně ekvivalentní s existencí řešení Schrödingerovy rovnice a okrajovou podmínkou (1.45). Z napojovací podmínky (1.20) získám implicitní vztah pro pól v bodě  $p$ ,

$$p\hat{h}_{l-1}^{(-)}(pa)\hat{j}_l(k_{int}a) - k_{int}\hat{j}_{l-1}(k_{int}a)\hat{h}_l^{(-)}(pa) = 0, \quad (1.56)$$

kde  $k_{int}$  je funkce  $p$ , viz (1.17).

Tyto póly, jinak též Siegertovy stavy, rozdělujeme na tři typy:

**Vázaný stav:**  $p = i | p |$ ,

**Virtuální stav:**  $p = -i | p |$ ,

**Komplexní pól:**  $p = \pm \Re(p) - i | \Im(p) | \quad \Im(p) > 0$ .

V případě, že je příslušná rezonanční energie  $E_R > 0$  a pozorujeme výrazný rezonanční (Breit-Wignerův) průběh  $\delta_l(p)$  a  $\sigma_l(p)$  v okolí reálné složky pólu, nazýváme tento pól rezonančním. V [8] je popsán pohyb pólů po komplexní rovině v závislosti na potenciálu  $U_0$ . Ve výsledcích se zaměříme na pohyb virtuálních a komplexních pólů směrem k počátku, kde přechází ve vázané stavy.

Póly S-matice jsem hledal numerickou cestou hledáním kořenů rovnice (1.56), k tomu jsem použil program Wolfram Mathematica a funkci **FindRoot**. Pro  $l = 0$ , resp.  $l = 3$ , jsou některé z hodnot pólů  $p$  v závislosti na potenciálu  $U_0$  v tabulkách 1.1 a 1.2. Je patrné, že v případě  $l = 0$ , pozorujeme pouze virtuální stav, jenž s rostoucím potenciálem přechází ve vázaný. V tabulce jsou hodnoty pro dva nalezené stavy, jež takto přechází z virtuálního na vázaný – mohli bychom jich s rostoucím potenciálem najít nekonečně mnoho.

Pro  $l = 3$  pozorujeme rezonanční stav, jenž postupně přechází na vázaný. Případ  $l = 3$  je při hledání rezonančního stavu velmi názorný, na obrázku 1.1 je patrný Breit-Wignerův tvar závislosti a na obrázku 1.2 pozorujeme výrazný růst účinného průřezu (jenž souhlasí s umístěním pólu pro odpovídající potenciál  $U_0 = 11.4 a^{-2}$  v tabulce 1.2). Pro názornost přikládám ještě na obrázku 1.3 graf

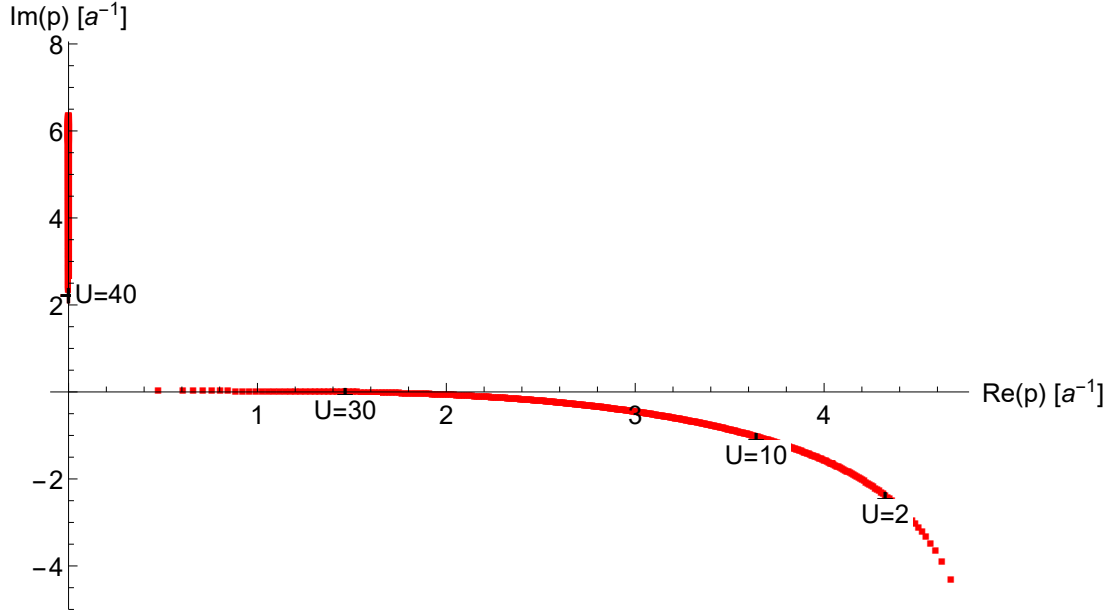


Tabulka 1.1: Závislost polohy virtuálního, resp. vázaného pólu S-matice na potenciálu  $U_0$  pro  $l = 0$ . Tyto póly leží na imaginární ose hybnosti  $p$ .

Potenciál $U_0 [\frac{1}{a^2}]$	Stav 1 $\Im(p) [\frac{1}{a}]$	Potenciál $U_0 [\frac{1}{a^2}]$	Stav 2 $\Im(p) [\frac{1}{a}]$
0.02	-4.050	21.22	-0.833
0.06	-3.302	21.26	-0.742
0.1	-2.935	21.3	-0.676
0.5	-1.651	21.7	-0.295
0.9	-1.104	22.1	-0.055
1.3	-0.730	22.5	0.138
1.7	-0.438	22.9	0.303
2.1	-0.195	23.3	0.451
2.5	0.016	23.7	0.585
2.9	0.204	24.1	0.710
3.3	0.373	24.5	0.827
3.7	0.529	24.9	0.937
4.1	0.673	25.3	1.041
4.5	0.808	25.7	1.141
4.9	0.935	26.1	1.237
5.3	1.054	26.5	1.329
5.7	1.168	26.9	1.417
6.1	1.277	27.3	1.503
6.5	1.381	27.7	1.586
6.9	1.481	28.1	1.666

Tabulka 1.2: Závislost polohy komplexního rezonančního, resp. vázaného pólu S-matice na potenciálu  $U_0$  pro  $l = 3$ . Rezonanční póly leží v dolní polorovině komplexní hybnosti  $p$ , vázané póly na kladné části imaginární osy hybnosti  $p$ . V poslední řádce jsou rezonanční póly **B** a **C** (viz kapitola 3.2) pro potenciál  $U_0 = 11.4 a^{-2}$ . Tento potenciál odpovídá grafům na obrázcích 1.1 a 1.2.

$U_0 [\frac{1}{a^2}]$	$\Re(p) [\frac{1}{a}]$	$\Im(p) [\frac{1}{a}]$	$U_0 [\frac{1}{a^2}]$	$\Re(p) [\frac{1}{a}]$	$\Im(p) [\frac{1}{a}]$
0.05	4.709	-4.738	17.8	2.995	-0.470
0.6	4.519	-3.236	21	2.693	-0.305
1.8	4.347	-2.481	23	2.483	-0.218
3.4	4.183	-1.995	27.4	1.924	-0.072
5	4.042	-1.676	30.6	1.329	-0.012
6.6	3.910	-1.433	32.2	0.844	-0.001
8.2	3.783	-1.234	44	0	2.920
9.8	3.656	-1.066	50	0	3.698
11	3.562	-0.954	56	0	4.357
13	3.401	-0.788	62	0	4.939
14.6	3.270	-0.671	68	0	5.468
16.2	3.135	-0.566	74	0	5.955
<b>B: 11.4</b>	3.53	-0.919	<b>C: 11.4</b>	7.839	-1.783



Obrázek 1.3: Trajektorie pólu S-matice pro  $l = 3$  v komplexní rovině hybností v závislosti na potenciálu  $U_0$ ; vybrané body jsou označeny hodnotami potenciálu.

trajektorie rezonančního a následně vázaného stavu po komplexní rovině. Vázaný stav jsem byl pro  $l = 3$  schopen použitou metodou (aplikací funkce **FindRoot** na (1.52)) nalézt až od jistého potenciálu, jak je patrné z obrázku i tabulky. V kapitole 3.2 rozebíráme podrobněji pohyb pólů po komplexní rovině a problematiku hledání pólů v okolí počátku.

Podrobnější analytické řešení, které lze pro  $l = 0$  i  $l = 3$  najít, je v článku [8], kde jsou póly hledány graficky. Z článku plyne, že pro  $l = 0$  pozorujeme komplexní póly jdoucí pro  $U_0 \rightarrow 0$  do  $n\pi - i\infty$ , kde  $n$  je přirozené číslo. Tyto póly pro rostoucí potenciál dojdou k bodu  $-i$  na imaginární ose. Zde se komplexní póly (z levé a pravé poloroviny) rozdělí na virtuální pól jdoucí po záporné části imaginární ose do  $-i\infty$  a na pól jdoucí do počátku a přecházející na vázaný stav (takové pozorujeme v tabulce 1.1).

Pro  $l > 0$  je chování pólů především v komplexní rovině hůř zachytitelné. Opět ale pozorujeme komplexní póly (nyní potenciálně rezonanční) směřující k počátku, kde se rozštěpí na vázaný a virtuální pól. Pro  $l$  sudé jdou póly asymptoticky (pro  $U_0 \rightarrow 0$ ) k  $n\pi - i\infty$ , pro  $l$  liché k  $(n - \frac{1}{2})\pi - i\infty$ , kde  $n$  je v obou případech přirozené (uvažujeme pouze pravou část komplexní roviny). Jak ale ukážeme v dalších výsledcích, existují komplexní póly, které zůstávají v komplexní rovině (resp. v pravém dolním kvadrantu) a do počátku nikdy nedojdou. Tyto póly nebyly v [8] studovány.

Porovnejme nakonec údaje z tabulky 1.2 a průběhy  $\delta_3(p)$  a  $\sigma_3(p)$  na obrázcích 1.1 a 1.2, jež jsme spočetli pro hodnotu redukovaného potenciálu  $U_0 = 11.4 a^{-2}$ . V tabulce je reálná část hybnosti pro tento potenciál  $\Re(p) = 3.53 a^{-1}$ , na obrázcích je tento bod označen vertikální přerušovanou čarou. Vidíme, že se tato hybnost shoduje s bodem strmého nárůstu obou veličin. Na tomto příkladu je tedy ukázáno, že rezonanční póly S-matice skutečně významně ovlivňují pozorovatelné veličiny.

### 1.3 Řešení Schrödingerovy rovnice pomocí metody R-matice

V této části popíšu použití tzv. metody R-matice, což je jedna z metod řešení Schrödingerovy rovnice. Získáme její řešení jak na reálné ose tak i v komplexní rovině. Použití této metody můžete najít např. v [12] a jako zdroj jsem pro tuto kapitolu použil [6] a zejména článek [5]. Vycházíme z tvaru Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{1}{2} \left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] \chi_l(r) = \hat{H}_l \chi_l(r) = E \chi_l(r), \quad (1.57)$$

kde zavádíme tvar operátoru hamiltoniánu  $\hat{H}_l$ .

Mějme od jistého  $r = a$  sférický potenciál  $V(r) = \frac{1}{2}U(r)$ . Jak je ukázáno v [2], potřebujeme chování potenciálu

$$V(r) \stackrel{r \rightarrow \infty}{\cong} O\left(\frac{1}{r^{3+\epsilon}}\right), \quad \epsilon > 0. \quad (1.58)$$

V této práci uvažujeme krátkodosahový potenciál  $U(r)$ , který je pro  $r \geq a$  roven nule. Poté můžeme funkci  $\chi_l$  pro  $r \geq a$  psát

$$\chi_l^{ext}(r) \sim \hat{h}_l^{(-)}(pr) - S(p)\hat{h}_l^{(+)}(pr), \quad r \geq a. \quad (1.59)$$

Ve vnitřní oblasti vyjádřím řešení jako lineární kombinaci konečného počtu  $N$  lineárně nezávislých funkcí  $\phi_i(r)$  splňujících okrajovou podmínku v  $r = 0$

$$\chi_l^{int} = \sum_{j=1}^N c_j \phi_j(r), \quad \phi_j(0) = 0. \quad (1.60)$$

Operátor  $\hat{H}_l$ , resp. pouze člen  $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2}$ , není na vnitřní oblasti  $(0, a)$  hermitovský, pokud jsou funkce báze  $\phi_j(r)$  nenulové v  $r = a$ . Tento problém řešíme přidáním tzv. Blochova operátoru

$$\hat{L} = \frac{1}{2}\delta(r-a)\frac{d}{dr}, \quad (1.61)$$

kde  $\delta$  značí Diracovu  $\delta$ -distribuci. Dokažme nyní že operátor  $\hat{H} + \hat{L}$  je hermitovský. Maticové komponenty počítáme jako integrály, například pro hamiltonián

$$H_{ij} = \langle \phi_i | \hat{H}_l | \phi_j \rangle = \int_0^a \phi_i(r) \hat{H}_l \phi_j(r) dr. \quad (1.62)$$

Komponenty hamiltoniánu jsou zřejmě symetrické kromě členu  $\frac{d^2}{dr^2}$ , ten chceme vykompenzovat přičtením Blochova operátoru. Počítejme nyní integrál

$$\langle \phi_i | \frac{d^2}{dr^2} - \delta(r-a) \frac{d}{dr} | \phi_j \rangle = \int_0^a \phi_i(r) \frac{d^2 \phi_j(r)}{dr^2} dr - \phi_i(a) \frac{d\phi_j(r)}{dr} \Big|_a \quad (1.63a)$$

$$\stackrel{p.p.}{=} \phi_i(a) \frac{d\phi_j(r)}{dr} \Big|_a - \int_0^a \frac{d\phi_i(r)}{dr} \frac{d\phi_j(r)}{dr} dr - \phi_i(a) \frac{d\phi_j(r)}{dr} \Big|_a \quad (1.63b)$$

$$\stackrel{p.p.}{=} -\frac{d\phi_i(r)}{dr} \Big|_a \phi_j(a) + \int_0^a \frac{d^2 \phi_i(r)}{dr^2} \phi_j(r) dr \quad (1.63c)$$

$$= \langle \phi_j | \frac{d^2}{dr^2} - \delta(r-a) \frac{d}{dr} | \phi_i \rangle. \quad (1.63d)$$

V (1.63) jsem použil v krocích (1.63b) a (1.63c) integraci per partes, rovnosti (1.63a) a (1.63d) pak plynou z definice maticové komponenty. Pomocí vztahu (1.63) jsme tak ukázali, že pro komponenty matice v bázi funkcí  $\{\phi_i\}_{i=1}^N$  platí rovnost  $H_{ij} + L_{ij} = H_{ji} + L_{ji}$ .

Díky Blochovu operátoru jsme schopni zakomponovat podmínku spojitosti první derivace  $\chi_l$  v  $r = a$  do Schrödingerovy rovnice ve vnitřní oblasti

$$(\hat{H}_l + \hat{L} - E)\chi_l^{int} = \hat{L}\chi_l^{ext}, \quad (1.64)$$

tento vztah nazýváme nehomogenní Bloch-Schrödingerovou rovnicí se zdrojovým členem  $\hat{L}\chi_l^{ext}$ . Dále požadujeme spojitost funkce  $\chi_l$  v  $r = a$ . Řešení  $\chi_l^{int}$  můžeme formálně získat inverzí operátoru na levé straně rovnice

$$\chi_l^{int} = (\hat{H}_l + \hat{L} - E)^{-1}\hat{L}\chi_l^{ext}, \quad (1.65)$$

neboli Greenovou funkcí zavedenou jako

$$G_l(E) = -(\hat{H} + \hat{L} - E)^{-1}. \quad (1.66)$$

Diagonalizací hermitovské matice operátoru  $\hat{H} + \hat{L}$  na vnitřní oblasti získáme množinu vlastních funkcí  $\{\psi_i\}_{i=1}^N$  a příslušných vlastních energií  $E_k$

$$(\hat{H} + \hat{L})\psi_k = E_k\psi_k. \quad (1.67)$$

Greenovu funkci z (1.66) mohu pomocí této báze vyjádřit jako (viz [2])

$$G_l(E) = -\sum_{k=1}^N \frac{|\psi_k\rangle\langle\psi_k|}{E_k - E}. \quad (1.68)$$

Nyní zavedeme R-matici  $R_l(E)$  jako funkci energie. Podobně jako u S-matice se v našem případě bude jednat o skalární funkci. Definujeme ji výrazem

$$R_l(E) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \frac{\psi_k(a)\psi_k(a)}{E_k - E}, \quad (1.69)$$

čili pro Greenovu funkci z (1.68) pro  $r = a$  platí

$$2R_l(E) = -G_l(E) \Big|_{r=a}. \quad (1.70)$$

Vzorec (1.65) pro  $r = a$  přejde na vztah

$$\chi_l(a) = R_l(E)\chi_l'(a). \quad (1.71)$$

Analogicky k postupu v [5] (kde je metoda předvedena na případě coulombického potenciálu) tak získám explicitní výraz pro S-matici  $S(p)$  pomocí R-matice. Rovnice (1.71) nám společně s vyjádřením  $\chi_l^{ext}$  z (1.59) dá vztah

$$S(p) = \frac{R_l(E)p \frac{d\hat{h}_l^{(-)}(z)}{dz} \Big|_{z=pa}}{R_l(E)p \frac{d\hat{h}_l^{(+)}(z)}{dz} \Big|_{z=pa}} \frac{-\hat{h}_l^{(-)}(pa)}{-\hat{h}_l^{(+)}(pa)}. \quad (1.72)$$

Získali jsme tak možnost výpočtu S-matice  $S(p)$  pomocí aproximace vlnové funkce konečným počtem známých funkcí  $|\psi_k\rangle$  definovaných v kouli o poloměru  $a$ . Dle vzorce (1.46) pak můžeme vypočítat parciální účinný průřez  $\sigma_l$ . Analogicky při zápisu vlnové funkce  $\chi_l^{ext}$  pomocí Riccati-Besselových funkcí v (1.18) nám podmínka (1.71) dá výraz pro fázový posuv  $\delta_l(p)$

$$\tan(\delta_l(p)) = \frac{\hat{j}_l(pa) - R(E)p \frac{d\hat{j}_l(z)}{dz} \Big|_{z=pa}}{R(E)p \frac{d\hat{n}_l(z)}{dz} \Big|_{z=pa} - \hat{n}_l(pa)}. \quad (1.73)$$

Dosazením vlnové funkce (1.45) splňující okrajovou podmínku pro existenci Siegertova stavu do (1.71) vznikne vztah

$$R(E)p \frac{d\hat{h}_l^{(+)}(z)}{dz} \Big|_{z=pa} \hat{h}_l^{(+)}(pa) = \hat{h}_l^{(+)}(pa). \quad (1.74)$$

Definujeme tedy implicitní funkci

$$F(p) = R(E)p \frac{d\hat{h}_l^{(+)}(z)}{dz} \Big|_{z=pa} - \hat{h}_l^{(+)}(pa). \quad (1.75)$$

Nulové body  $p_0$  funkce  $F(p)$  v komplexní rovině jsou póly S-matice  $S(p)$ . Tento postup je ekvivalentní hledání nulových bodů jmenovatele ve výrazu pro  $S(p)$  v (1.72).

# 2. Popis numerické metody

## 2.1 Báze B-spline funkcí

V této části popíšeme bázi B-spline funkcí, pomocí nichž aproximujeme vlnovou funkci na omezeném intervalu, abychom mohli následně použít metodu R-matice. B-spline funkce a jejich použití jsou podrobně popsány v [7], odkud i čerpám, zde je podán pouze krátký výťah článku, abych vysvětlil jejich použití.

Pro reprezentaci vlnové funkce jsem použil její aproximaci s využitím tzv. B-spline funkcí. Jedná se o po částech polynomiální funkce definované na intervalu  $[0, a]$ . Pro všechna  $r$  z tohoto intervalu pak radiální funkci  $\chi_{l,p}$  aproximujeme lineární kombinací B-spline funkcí  $B_i(r)$  jako

$$\chi_l = \sum_i c_i B_i(r) \quad , \quad r \leq a. \quad (2.1)$$

Mimo tuto oblast (tj. sféru) považujeme potenciál za nulový, tudíž řešitelný vlnovou funkcí ze vztahu (1.18). V případě aplikace metody R-matice stačí, když tzv. hranici gridu  $a$  zvolíme tak, abychom za ní mohli považovat potenciál za nulový (pro pravouhlou potenciálovou jámu lze brát hranici jámy).

Mějme uspořádanou sekvenci bodů (tzv. break points)

$$\{\xi_i\}_{i=0}^n \quad , \quad \xi_0 = 0, \quad \xi_n = a \quad , \quad \xi_i < \xi_{i+1}, \quad (2.2)$$

jež rozděluje interval  $[0, a]$  do  $n$  podintervalů  $[\xi_i, \xi_{i+1}]$ . B-spline funkce jsou po částech polynomiální funkce. Na každém intervalu je funkce buď nulová nebo je rovna polynomu  $q(x)$  řádu  $k$

$$q(x) = \sum_{i=1}^k c_i x^{i-1}. \quad (2.3)$$

Polynom řádu  $k$ , jak ukazuje vztah (2.3), má nejvyšší nenulový koeficient u členu  $x^{k-1}$ . Báze B-spline funkcí je pak zadefinována pro uspořádanou množinu uzlů,

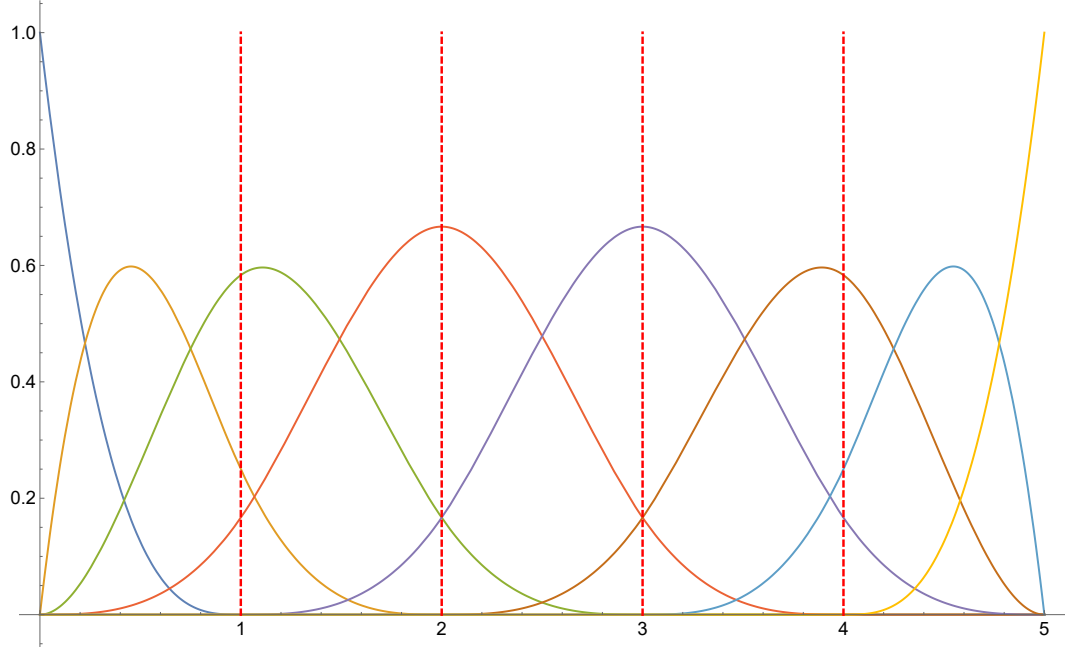
$$\begin{aligned} \{t_j\}_{j=0}^{n+2k-1} \quad , \quad t_j = \xi_{j-k} \quad \text{pro } j \in \{k, \dots, n+k\} \quad , \\ t_1 = t_2 = \dots = t_k = 0 \quad , \quad t_{n+k} = \dots = t_{n+2k-1} = a. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Množina uzlů  $t_j$  je tedy mimo násobnost okrajových bodů  $\xi_0$  a  $\xi_n$ , jež je rovna  $k$ , totožná s množinou bodů  $\xi_i$ . Jak je dále popsáno v [7], násobnost větší než 1 nemusí mít pouze krajní body. V našem případě ale vždy budeme používat množinu definovanou v (2.4), kde multiplicita všech vnitřních bodů je 1. Multiplicita uzlů ovlivňuje spojitost B-spline funkcí v těchto bodech.

Dohromady pro danou množinu uzlů a řád  $k$  tvoří funkce B-spline bázi o následujících vlastnostech:

- Kompletní báze  $\{B_i\}_{i=1}^{n+k-1}$  čítá  $n+k-1$  funkcí.
- Funkce  $B_i(x)$  je nenulová pouze na intervalu  $[t_i, t_{i+k}]$ , čili např. funkce  $B_1$  je nenulová pouze pro  $x \in [\xi_0, \xi_1]$ .
- Platí tedy:  $B_i(x)B_j(x) = 0$  pro  $|i-j| \geq k$ .

- V bodech  $\xi_j$  pro  $j \in \{1, \dots, n-1\}$  platí  $B_i \in C^{k-2}$ .
- V bodě  $\xi_0$ , resp.  $\xi_n$ , platí  $B_i \in C^{i-2}$ , resp.  $B_i \in C^{n+k-i-2}$ , kde spojitost v těchto bodech znamená spojitě navázání funkce či její derivace do nuly. Platí tedy, že funkce  $B_1$  je jako jediná v bodě  $\xi_0$  nemulová, analogicky  $B_{n+k-1}$  v  $\xi_n$ .



Obrázek 2.1: Kompletní báze B-spline funkcí řádu  $k = 4$  na ekvidistantní sekvenci bodů  $\{0,1,2,3,4,5\}$ . Svislé červené čáry oddělují jednotlivé intervaly, na kterých je každá B-spline funkce polynomem.

Názorný příklad báze B-spline funkcí je na obrázku 2.1, kde jsou vykresleny všechny B-spline funkce řádu  $k = 4$  na ekvidistantní sekvenci bodů  $\{0,1,2,3,4,5\}$ , čili množinu uzlů  $\{0,0,0,0,1,2,3,4,5,5,5,5\}$ .

Ekvidistantní sekvence bodů je typickým příkladem. V práci též používám exponenciální sekvenci

$$\xi_i = a \frac{e^{\gamma \frac{i}{n}} - 1}{e^{\gamma} - 1}, \quad (2.5)$$

kde  $\gamma$  je parametr rozdělení uzlů. Tato sekvence má za důsledek zhuštění bázi v blízkosti nuly, což je užitečné pro aproximaci vlnové funkce, která blízko počátku osciluje.

V praxi pak při implementaci B-spline funkcí používáme rekurzivní vzorec z [7]

$$B_i^k(x) = \frac{x - t_i}{t_{i+k-1} - t_i} B_i^{k-1}(x) + \frac{t_{i+k} - x}{t_{i+k} - t_{i+1}} B_{i+1}^{k-1}(x), \quad (2.6)$$

kde  $B_i^k$  je  $i$ -tý B-spline o řádu  $k$ . Pro  $k = 1$  platí pro B-spline funkce triviální vztah

$$B_i(x) = 1, \quad x \in [t_{i-1}, t_i] \quad \text{a} \quad B_i(x) = 0, \quad x \notin [t_{i-1}, t_i]. \quad (2.7)$$

## 2.2 Řešení Schrödingerovy rovnice pomocí báze B-spline funkcí

V této kapitole aplikujeme bázi B-spline funkcí a posléze i metodu R-matice a popíšeme výslednou numerickou metodu, kterou jsme použili. Vyjádříme konečně funkci  $\chi_l(r)$  na intervalu  $[0, a]$  lineární kombinací  $N$  B-spline funkcí  $B_i(r)$  dle vzorce (2.1). Dosadíme ji do bezčasové Schrödingerovy rovnice (1.5) s operátorem hamiltoniánu

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + \frac{1}{2}U(r), \quad (2.8)$$

pro něž hledám vlastní energie a příslušné vlastní stavy  $\chi_l(r)$  takové, že

$$\hat{H}|\chi_l\rangle = E|\chi_l\rangle. \quad (2.9)$$

V bázi B-spline funkcí má tento problém tvar

$$\sum_{i=1}^N \langle B_m | \hat{H} | B_i \rangle c_i = E \sum_{i=1}^N \langle B_m | B_i \rangle c_i, \quad (2.10)$$

jenž lze přepsat ve formě vektorů a matic

$$H \cdot \mathbf{c} = ES \cdot \mathbf{c}, \quad (2.11)$$

kde  $\mathbf{c}$  je vektor z  $\mathbb{R}^N$  o komponentách  $c_i$ ,  $H$  je matice hamiltoniánu a  $S$  je tzv. překryvová matice. Maticové elementy

$$H_{ij} = \langle B_i | H | B_j \rangle \quad , \quad S_{ij} = \langle B_i | B_j \rangle, \quad (2.12)$$

v Hilbertově prostoru počítáme jako integrály; např. pro potenciálovou část hamiltoniánu  $U(r)$  počítáme příslušný maticový element jako

$$\langle B_i | U | B_j \rangle = \int_0^a B_i(r)U(r)B_j(r)dr. \quad (2.13)$$

Abychom mohli snadno řešit problém vlastních stavů matice  $\hat{H}$ , je nutné upravit B-spline bázi tak, aby matice  $S$  byla jednotková - čili bázi ortonormalizovat. Ortonormální báze se skládá z vlastních funkcí matice  $S$ , které lze vždy vypočítat, neboť překryvová matice musí být symetrická (z tvaru (2.12) lze nahlédnout, že  $S_{ij} = S_{ji}$ ). Nová ortonormalizovaná báze se skládá z funkcí

$$\tilde{B}_i(r) = \sum_{i=1}^N B_i(r)\nu_{ij} \quad , \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.14)$$

jež jsou lineární kombinací původních B-spline funkcí pro reálné koeficienty  $\nu_{ij}$ . Platí pro ně dále

$$\int_0^R \tilde{B}_i(r)\tilde{B}_j(r)dr = \delta_{ij}. \quad (2.15)$$

Překryvová matice  $S$  vyjádřená těmito funkcemi je pak zřejmě jednotková. Vlastní stav  $\chi_{l,p}(r)$  vyjádříme funkcemi ortonormální báze jako

$$\chi_l(r) = \sum_{i=1}^N d_i \tilde{B}_i(r) \quad (2.16)$$



a vektorová rovnice (2.11) a matice hamiltoniánu tak přejde do tvaru

$$H \cdot \mathbf{d} = E\mathbf{d} \quad , \quad H_{ij} = \langle \tilde{B}_i | \hat{H} | \tilde{B}_j \rangle, \quad (2.17)$$

kde  $\mathbf{d}$  je opět vektor z  $\mathbb{R}^N$ . Rovnici (2.17) pak můžeme řešit diagonalizací matice  $H$  a hledáním jejích vlastních stavů.

### 2.2.1 Hledání vázaných stavů přímou diagonalizací

Při aproximaci vlnové funkce lineární kombinací B-spline funkcí nepoužíváme celou bázi, resp. vyřazujeme krajní B-spline  $B_1$ , jenž je nenulový v  $r = 0$  a nesplňuje tak okrajovou podmínku z (1.60). Rozlišujeme jednodušší případ, kdy hledáme pouze vázané stavy hamiltoniánu. V tom případě vyškrtáváme z báze i poslední B-spline  $B_{n+k-1}$  (báze tak čítá  $N = n + k - 3$  funkcí), jenž je u hranice gridu  $r = a$  nenulový. Předpokládáme tedy, že vlnová funkce je v našem přiblížení pro všechna  $r \geq a$  nulová.

Zde je důležité si uvědomit, že nám nestačí  $a$  takové, že potenciál  $V(r)$  je pro  $r \geq a$  nulový – chceme diagonalizovat v bázi pokrývající celý prostor, kde je hledaná vázaná funkce nezanedbatelná. Potřebujeme tedy zpravidla velké  $a$ , přičemž je zde důležité znát chování vlnové funkce pro velká  $r$ , abychom mohli odhadnout potřebnou hranici gridu.

### 2.2.2 Aplikace na metodu R-matice

Pro řešení problému s libovolnou okrajovou podmínkou nemůžeme předpokládat nulovost vlnové funkce na hranici gridu (v  $r = a$ ), proto do báze zařazujeme i B-spline  $B_{n+k-1}$  nenulový v  $r = a$ . Zde použijeme metodu R-matice z kapitoly 1.3. K hamiltoniánu přičteme Blochův operátor přeškálovaný na tvar hamiltoniánu z (2.8)

$$\hat{L} = \frac{1}{2} \delta(r - a) \frac{d}{dr}. \quad (2.18)$$

Ze vztahu (1.63) již víme, že matice reprezentující operátor  $\hat{H} + \hat{L}$  v bázi funkcí  $\tilde{B}_i$  bude symetrická. Diagonalizací této matice získáme množinu vlastních čísel  $E_k$  a vlastních funkcí  $\psi_k(r)$  opět jako lineární kombinaci B-spline funkcí. Dosazením vlastních čísel a funkcí do vzorce (1.69) vypočítáme R-matici  $R(E)$  a můžeme aplikovat napojovací podmínku (1.71).

Aplikací vzorců (1.72), (1.73) a (1.75) lze přímo spočítat hodnoty S-matice  $S(p)$ , fázového posuvu  $\delta_l(p)$  (tedy i účinného průřezu  $\sigma_l(p)$ ) a hledat póly S-matice.

## 2.3 Gauss-Legendrova kvadratura

Pro numerickou integraci nutnou pro vyčíslení členů překryvové matice  $\hat{S}$  a hamiltoniánu  $\hat{H}$  používám Gauss-Legendrova kvadraturu (dále GL) popsanou podrobněji v [13] a [14]. Jedná se o numerickou integrační metodu aproximující integrál funkce přes interval  $[-1, 1]$ . Jediným parametrem metody je stupeň GL kvadratury, jenž dále značím  $m$ . Pro každý řád existuje množina uzlů  $\{x_i\}_{i=1}^m$  a vah  $\{w_i\}_{i=1}^m$  GL kvadratury, kde uzly jsou z intervalu  $(-1, 1)$ , váhy jsou kladná

reálná čísla. Typicky získávám tyto data z tabulek, v mém případě byla součástí fortranového kódu procedura obsahující (pro daný řád  $m$ ) množiny uzlů a vah vzata z [15].

Integrál funkce  $f(x)$  přes daný interval aproximujeme výrazem

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=1}^m f(x_n)w_n, \quad (2.19)$$

tedy jako sumu hodnot funkcí v uzlech  $x_i$  s vahami  $w_i$ . Rovnost ve vztahu (2.19) platí vždy, pokud je integrovaná funkce polynomem stupně  $k \leq 2m$ . GL kvadratura je tedy metoda vhodná k počítání integrálů polynomů, čili i B-spline funkcí. Pokud chceme provést integraci přes obecný interval  $[a,b]$ , kde  $a$  i  $b$  jsou reálná čísla, musíme uzle i váhy přeskálovat dle

$$\tilde{x}_i = \frac{(x_i + 1)(b - a)}{2} + a, \quad \tilde{w}_i = \frac{b - a}{2}w_i, \quad (2.20)$$

kde  $x_i$  a  $w_i$  značí nepřeskálované parametry a  $\tilde{x}_i$  a  $\tilde{w}_i$  uzle a váhy přeskálované k danému intervalu.

Důležitá je dále přesnost odhadu integrálu nepolynomiální funkce (např. potenciálové části matice potenciálu pro coulombický potenciál  $\frac{1}{r}$ ). Ukazuje se ale, že i zde je GL kvadratura velmi přesná. Porovnával jsem za tímto účelem odhady výpočtu GL kvadratury s integrály vypočtenými v Mathematice právě pro coulombický potenciál (tj. integrály funkcí typu  $\frac{1}{x}B_i(x)B_j(x)$ ). Pro řád B-spline funkcí  $k = 5$  a řád GL  $m = 11$  byla při použití reálných čísel o velikosti 8 bytů (tzv. double precision) relativní chyba řádu  $10^{-14}$ , tedy blížil jsem se maximální dosažitelné přesnosti.

## 3. Výsledky

### 3.1 Výpočet vázaných stavů přímou diagonalizací

Numerickou metodu popsanou v předešlé kapitole jsem nejprve vyzkoušel ve Wolfram Mathematice, kde jsou B-spline funkce předdefinované, a stačí tedy spočítat příslušné matice a diagonalizovat hamiltonián. Pro B-spline bázi bez poslední funkce jsem hledal hybnosti vázaných stavů diagonalizací matice hamiltoniánu. Pro konstantní potenciálovou jámu jsem porovnal vázané stavy získané pomocí B-spline funkcí a již dříve vypočtené vázané stavy z tabulky 1.1, které jsou výsledkem hledání kořenů analytického vztahu (1.56), beru je tedy jako referenční. Členy hamiltoniánu a překryvové matice v Mathematice počítám funkcí **Integrate**, diagonalizaci pak funkcí **Eigenvalues**, resp. **Eigensystem**. Důležitá pro mě byla především přesnost určení vázaných stavů a vliv jednotlivých parametrů B-spline báze na přesnost. V tabulkách 3.1 a 3.4 jsou vypsány hodnoty imaginární složky hybnosti  $\Im(p)$  vázaného stavu jako ukázka optimalizace parametrů B-spline báze. V Mathematice byla pro větší B-spline báze problémem časová náročnost programu (např. pro  $n = 64$  a  $k = 5$  už bylo třeba čekat v řádu minut). Vidíme, že pro dosažení přesnosti cca  $10^{-5}$  je nutné zvolit hustotu uzlů B-spline báze alespoň  $h = 32$ . Výsledky udávám v jednotkách  $a^{-1}$ , kde  $a$  je poloměr potenciálové jámy. Ten jsem ve fortranovém programu zvolil  $a = 1$ .

Tabulka 3.1: Výsledky výpočtu  $\Im(p)$   $[\frac{1}{a}]$  vázaných stavů z vlastních hodnot matice hamiltoniánu v B-spline bázi v závislosti na parametrech báze; horní hranici gridu  $R$  a počtu uzlů  $n + 1$ , resp. hustoty uzlů  $h = \frac{n}{R}$  na jednotku délky  $a$ , kterou je poloměr potenciálové jámy. Počítáno pro řád polynomů  $k = 5$ , ekvidistantní sekvenci uzlů a redukovaný sférický potenciál  $U = 17.9 a^{-2}$ , pro nějž jsem z rovnice (1.56) vypočetl referenční hodnotu  $\Im(\mathbf{p}) = \mathbf{3,407863 a^{-1}}$ . Počet desetinných míst u každého čísla je dán počtem platných desetinných míst vytištěných Mathematicou.

$h [\frac{1}{a}]$	$R [a]$					
	5	10	20	30	40	60
0.5	3.3	3.3	3.3	3.3	3.3	3.3
1	3.39	3.38	3.38	3.38	3.38	—
2	3.400	3.400	3.400	3.400	3.400	—
4	3.406	3.406	3.410	3.406	—	—
8	3.4076	3.4076	3.4076	3.4076	—	—
16	3.40783	3.40783	3.40783	—	—	—
32	3.407860	3.407859	—	—	—	—
64	3.407859	—	—	—	—	—

Pro další výpočty jsem použil programovací jazyk Fortran. Implementuji množinu uzlů (sekvence ekvidistantní nebo exponenciální) a pak množinu B-spline funkcí. Na základě rekurzivního vzorce (2.6) získám pro každý B-spline koeficienty polynomu řádu  $k$  na každém intervalu.

Tabulka 3.2: Výsledky výpočtu  $\mathfrak{S}(p) [\frac{1}{a}]$  vázaných stavů z vlastních hodnot matice hamiltoniánu v B-spline bázi v závislosti na řádu  $k$  polynomů B-spline funkcí. Počítáno pro hranici gridu  $R = 5 a$ , ekvidistantní sekvenci a hustotu uzlů  $h = 16 \frac{1}{a}$  a redukovaný sférický potenciál  $U = 17.9 \frac{1}{a^2}$ , pro nějž jsem z rovnice (1.56) výše vypočetl referenční hodnotu  $\mathfrak{S}(\mathbf{p}) = \mathbf{3,407863} \frac{1}{a}$ .

$k$	$\mathfrak{S}(p) [\frac{1}{a}]$	$k$	$\mathfrak{S}(p) [\frac{1}{a}]$
1	4.2	5	3.40783
2	3.40786	6	3.40785
3	3.40785	7	3.40783
4	3.40785	8	3.40784

Ve Fortranu jsem dále vypočetl příslušnou překryvovou matici a ortogonalizoval bázi B-spline funkcí. Pro ortogonalizovanou bázi jsem vypočetl matici hamiltoniánu a získal tak symetrickou matici  $\hat{H}$  ze vztahu (2.17). Nejprve jsem pro případ vázaných stavů a bázi bez poslední B-spline funkce opět vypočetl vlastní čísla hamiltoniánu pro konstantní potenciálovou jámu. Ještě jednou jsem pak porovnal získané hodnoty s těmi vypočtenými stejným způsobem ve Mathematice a s výsledky získanými funkcí FindRoot z analytického vztahu (1.56). Přesnost určení hybnosti vázaného stavu byla pro tytéž parametry stejná jako při použití této metody v Mathematice. Časová náročnost výpočtu se při použití Fortranu řádově snížila.

Tabulka 3.3: Energie  $E_k$  vlastních stavů atomu vodíku, porovnání s výsledky z [7] a přesnými hodnotami  $E_k^{exact} = -1/2k^2$  (hodnoty zaokrouhleny na šest desetinných míst). Absolutní chyba určení vlastních energií  $E_k$  v mých výsledcích, resp.  $E_k^{Bachau}$  z [7] vypočtená jako  $\Delta E = |E_k - E_k^{exact}|$ . Počítáno pro řád  $k = 5$ , exponenciální sekvenci uzlů B-spline báze s parametrem  $\gamma = 5$ , horní hranici gridu  $R = 100$  au a  $n = 100$ .

$k$	$E_k$	$E_k^{Bachau}$	$E_k^{exact} = -1/2k^2$	$\Delta E$	$\Delta E^{Bachau}$
1	-0.500000	-0.500000	-0.500000	$1 \cdot 10^{-11}$	$1 \cdot 10^{-12}$
3	-0.055555	-0.055555	-0.055555	$2 \cdot 10^{-12}$	$1 \cdot 10^{-13}$
5	-0.019999	-0.019999	0.020000	$3 \cdot 10^{-8}$	$3 \cdot 10^{-8}$
7	-0.009596	-0.009596	-0.010204	$6 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-4}$
8	-0.004662	-0.004662	0.007812	$3 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-3}$

Opět pro bázi bez poslední B-spline funkce jsem vypočetl energie  $E_k$  vázaných stavů pro coulombický potenciál (tedy energie vlastních stavů atomu vodíku) a porovnal výsledky s tabulkou hodnot z [7] počítaných stejným způsobem a pro stejné parametry báze. Konkrétně pro řád  $k = 5$ , exponenciální sekvenci uzlů báze s parametry  $\gamma = 5$ , horní hranici gridu  $R = 100$  au a  $n = 100$  jsem vypočetl hodnoty  $E_k$ , jejichž porovnání s přesnými hodnotami s výsledky z [7] je v tabulce 3.3. Přesnost mého kódu je přibližně o řád menší než v [7], pro nižší  $k$  platí pro přesnost mých výsledků přibližně  $\Delta E_k \sim 10^{-12}$ . Důležité je porovnání mnou zjištěných hodnot a hodnot z [7] pro vyšší hodnoty  $k$  (v tabulce 5, 7 a 8), které se přesně shodují – vidíme tedy, že mnou použitá metoda se shoduje s tou použitou

v [7]. Přikládám dále tabulku, kde jsou hodnoty  $E_k$  vypočítané pro  $n = 200$  a  $R = 100$  au, jako ilustraci, že větší hranicí gridu lze výsledky pro  $k$  řádově zpřesnit.

Tabulka 3.4: Energie  $E_k$  vlastních stavů atomu vodíku porovnané s přesnými hodnotami  $E_k^{exact} = -1/2k^2$  a absolutní chyba energie  $\Delta E = |E_k - E_k^{exact}|$ . Počítáno pro řád  $k = 5$ , exponenciální sekvenci uzlů báze s parametrem  $\gamma = 5$ , horní hranici gridu  $R = 200$  au a  $n = 200$ .

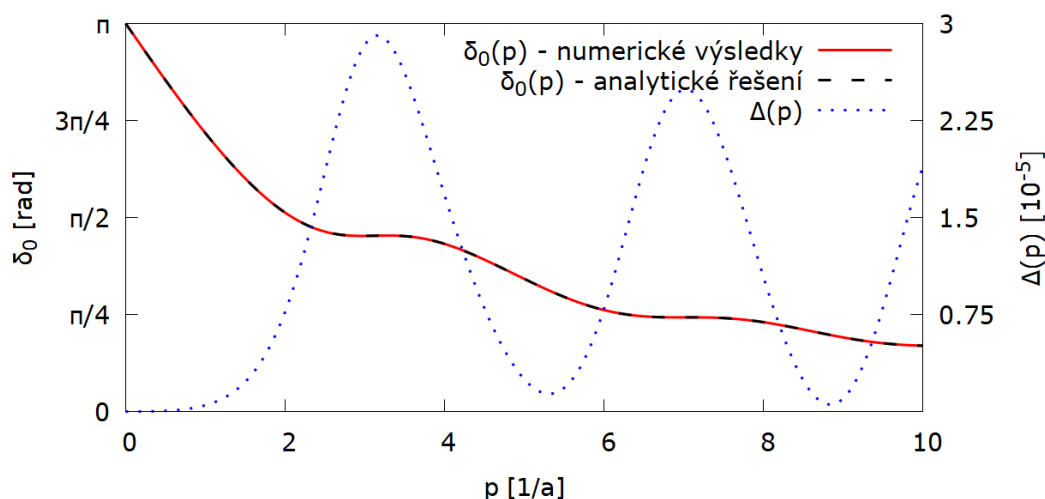
$k$	$E_k$	$E_k^{exact} = -1/2k^2$	$\Delta E$
5	-0.020000 000009	-0.020000 000000	$9 \cdot 10^{-12}$
6	-0.013888 888896	-0.013888 888889	$7 \cdot 10^{-12}$
7	-0.010204 081569	0.010204 081633	$6 \cdot 10^{-11}$
8	-0.007812 381091	0.007812 500000	$1.2 \cdot 10^{-7}$

## 3.2 Výpočet S-matice

Pokud není řečeno jinak, používal jsem ve zbytku práce následující parametry B-spline báze:

- Řád B-spline funkcí:  $k = 5$ .
- Počet intervalů v gridu:  $n = 160$ .
- Používám ekvidistantní sekvenci uzlů, resp. výsledky jsem ověřil i pro exponenciální sekvenci s parametrem:  $\gamma = 5$ .
- Pro případ s konstantní potenciálovou jámou o šířce  $r = a$  lze zřejmě nastavit horní hranici gridu též na hodnotu  $a$ , neboť potenciál je pro  $r > a$  nulový.
- Řád GL kvadratury, kterou jsem počítal komponenty matic:  $m = 12$ .
- Hranice gridu je rovna poloměru potenciálové jámy  $a$ . Poloměr potenciálové jámy jsem zvolil  $a = 1$ .

Pro dané parametry jsem aplikoval postup z kapitoly 2.2 a získal hodnoty R-matice  $R(E)$ . Nejprve jsem pro hodnotu potenciálu  $U_0 = 11.4 a^{-2}$  vypočetl dle vzorce (1.73) fázový posuv  $\delta_0(p)$  pro  $p \in [0,10]$  s krokem  $\Delta p = 0.01$ . Numerické hodnoty závislosti jsem porovnal s grafem fázového posuvu z obrázku 1.1, kde je posuv počítán dle analytického vztahu pro  $\tan(B/A)$ , viz (1.23). Při vykreslení fázového posuvu numerické hodnoty splývají s analytickou funkcí, jak je ukázáno na obrázku 3.1.



Obrázek 3.1: Fázový posuv  $\delta_0(p)$  (levá osa  $y$ ). Porovnání numericky počítaných hodnot s analytickým řešením. Relativní chyba  $\Delta(p)$  numerického fázového posuvu (pravá osa  $y$ ).

Pro lepší kontrolu jsem dále počítal hodnotu relativní chyby  $\Delta(p)$  numerické hodnoty, kterou počítám dle vzorce

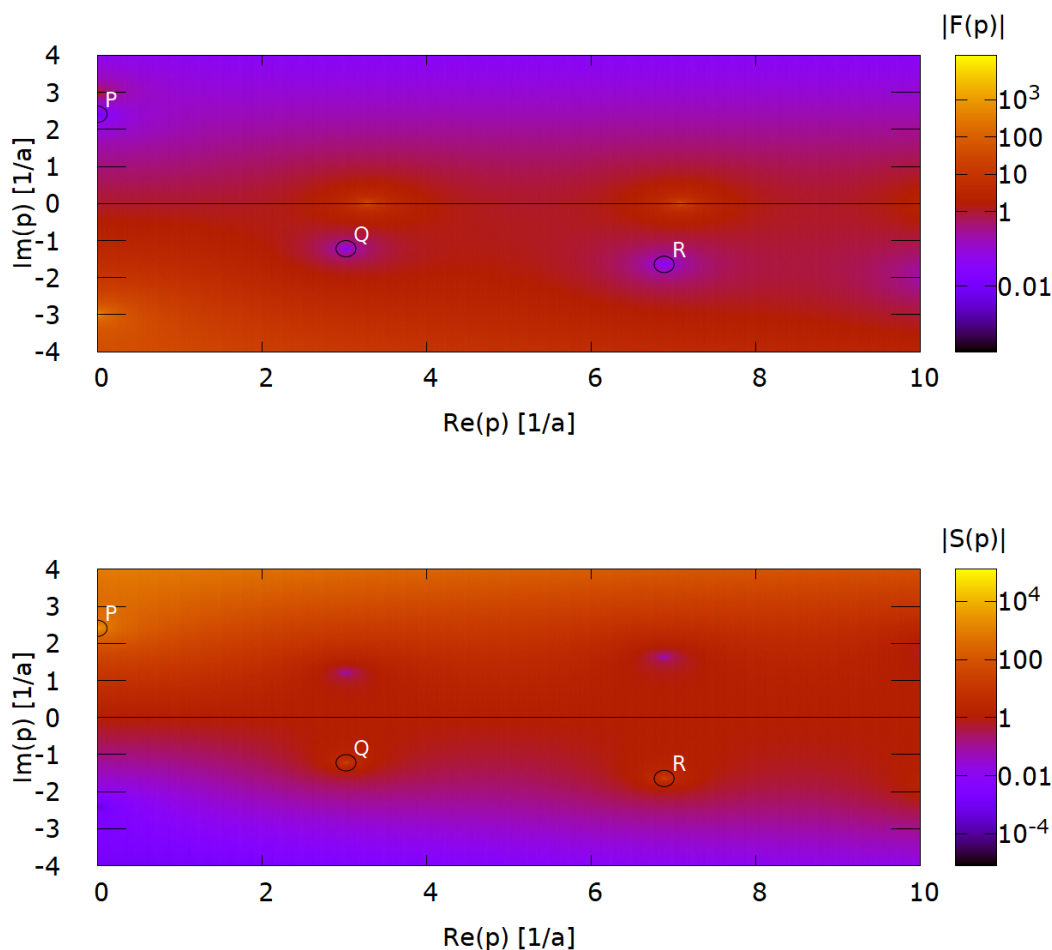
$$\Delta(p) = \left| \frac{\delta_A - \delta_N}{\delta_A} \right|, \quad (3.1)$$

kde je výrazem  $\delta_A$  myšlen analyticky získaný fázový posuv a výrazem  $\delta_N$  numericky spočtený fázový posuv. Takto vypočtená chyba je vynesena v obrázku 3.1 a nepřekročila hodnotu  $3 \cdot 10^{-5}$ , jak je z obrázku patrné. Tedy numerický výpočet je dostatečně přesný v celém zvoleném rozsahu hybností.

### 3.2.1 Moment hybnosti $l=0$

V této části jsou výsledky hledání pólů S-matice v komplexní rovině za pomoci numerických výsledků pro moment hybnosti  $l = 0$ . Pro tento moment hybnosti a potenciál  $U_0 = 11.4 a^{-2}$  jsem hledal komplexní póly  $p$  v komplexní rovině hledáním nulových bodů funkce  $F(p)$  z (1.75), resp. pólů funkce  $S(p)$  z (1.72). Amplitudy  $|F(p)|$  a  $|S(p)|$  jsou vykresleny na obrázku 3.2.

V grafech jsou označena minima  $|F(p)|$ , resp. maxima  $|S(p)|$ . Z těchto grafů jsem získal přibližnou polohu pólů, kolem každého jsem vybral malý čtverec a vy-



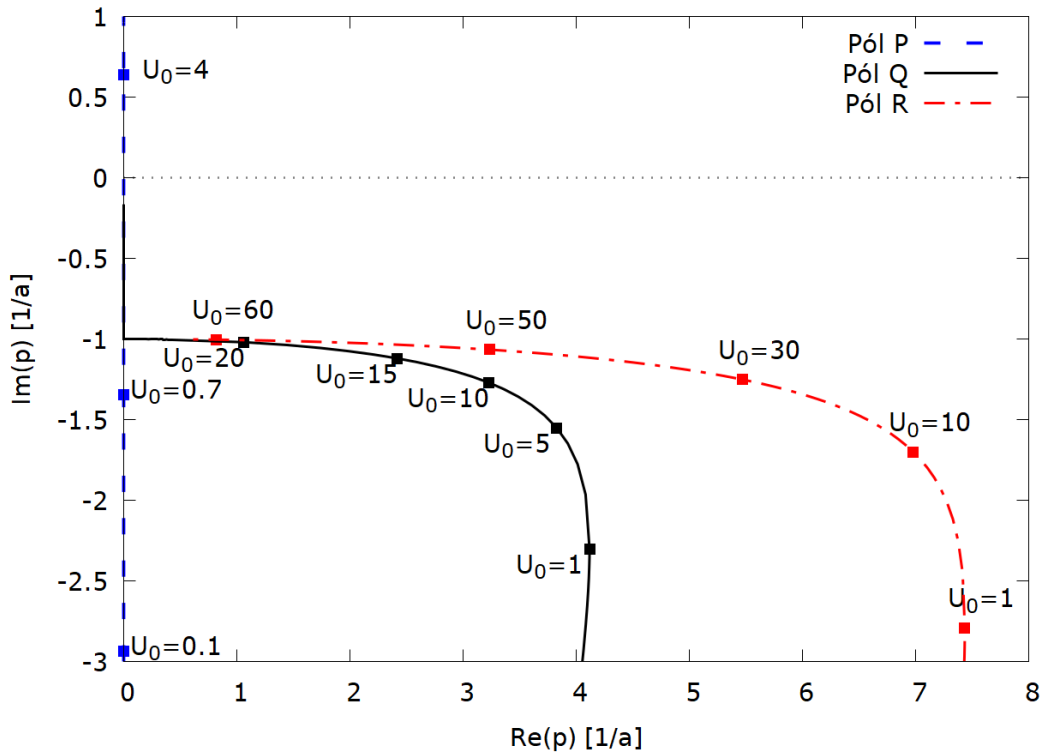
Obrázek 3.2: Horní obrázek: Amplituda implicitní funkce  $|F(p)|$  vykreslená v komplexní rovině, zakroužkována minima funkce. Dolní obrázek: Amplituda S-matice  $|S(p)|$  v komplexní rovině, zakroužkována maxima funkce. Velikost amplitudy je vynesena na barevnou osu v logaritmické škále. Funkce jsou vykresleny pro moment hybnosti  $l = 0$  hodnotu potenciálu  $U_0 = 11.4 a^{-2}$ .

početl jsem ve fortranovém programu numerické hodnoty funkce (s danou jemností v hybnosti) a hledal jsem jejich minimum, resp. pak maximum. Takto jsem přímým hledáním minima, resp. maxima (oběma metodami jsem získal stejný výsledek) dané funkce ve fortranovém programu našel konkrétní hodnoty tří pólů:

- pól **P**:  $p_P = 2.41i \frac{1}{a}$
- pól **Q**:  $p_Q = (3.03 - 1.22i) \frac{1}{a}$
- pól **R**:  $p_R = (6.89, -1.64i) \frac{1}{a}$

V grafu fázového posuvu  $\delta_0$  (obrázek 3.1 nebo 1.1) pozorujeme v okolí reálné části pólů **Q** a **R** lokální maxima  $\delta_l(p)$ . Stejně tak i největší chybu  $\Delta(p)$  v obrázku 3.1 pozorujeme v blízkosti reálné části pólů.

Výsledky jsem zde zaokrouhlil na dvě desetinná místa. Správnost této metody jsem ověřil porovnáním s výsledky hledání pólů S-matice v kapitole 1.2 jako kořenů rovnice (1.56), kde jsem dosáhl přesnosti na pět desetinných míst. Vlastnosti pólů zkoumám sledováním pohybu těchto tří pólů po komplexní rovině v závislosti na potenciálu – tento pohyb je ukázán na obrázku 3.3.



Obrázek 3.3: Pohyb pólů **P**, **Q** a **R** po komplexní rovině pro  $l = 0$  v závislosti na potenciálu  $U_0$ . V grafu jsou pro přehlednost označeny některé body hodnotami potenciálu  $U_0$ .

Na obrázku 3.2 představuje pól **P** vázaný stav a póly **Q** a **R** komplexní póly. Z [8] víme, že pro  $l = 0$  existuje jeden pól S-matice pohybující se pouze po imaginární ose a přecházející z virtuálního stavu na vázaný, jak to pozorujeme u pólu **P** na obrázku 3.3. Dále víme, že v komplexní rovině existuje nekonečně mnoho

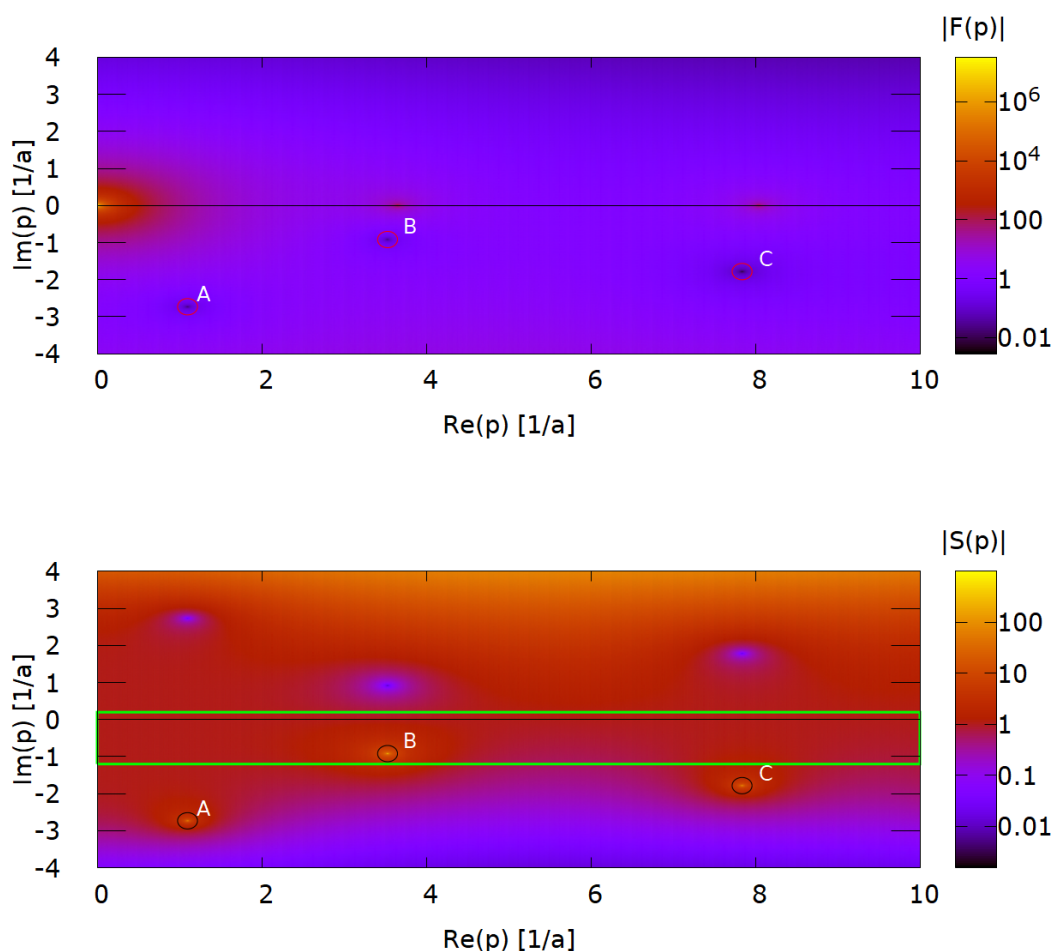


komplexních (ale nerezonančních) pólů, které rostoucí potenciál přechází na virtuální stav v bodě  $-i$  a posléze na vázaný. Toto potvrzuje pohyb komplexních pólů na obrázku 3.3.

### 3.2.2 Moment hybnosti $l=3$

Stejnou jsme zkoumali póly v komplexní rovině i pro moment hybnosti  $l = 3$  a hodnotu potenciálu  $U_0 = 11.4 a^{-2}$ . Amplitudy  $|F(p)|$  a  $|S(p)|$  jsou vykresleny v komplexní rovině na obrázku 3.4.

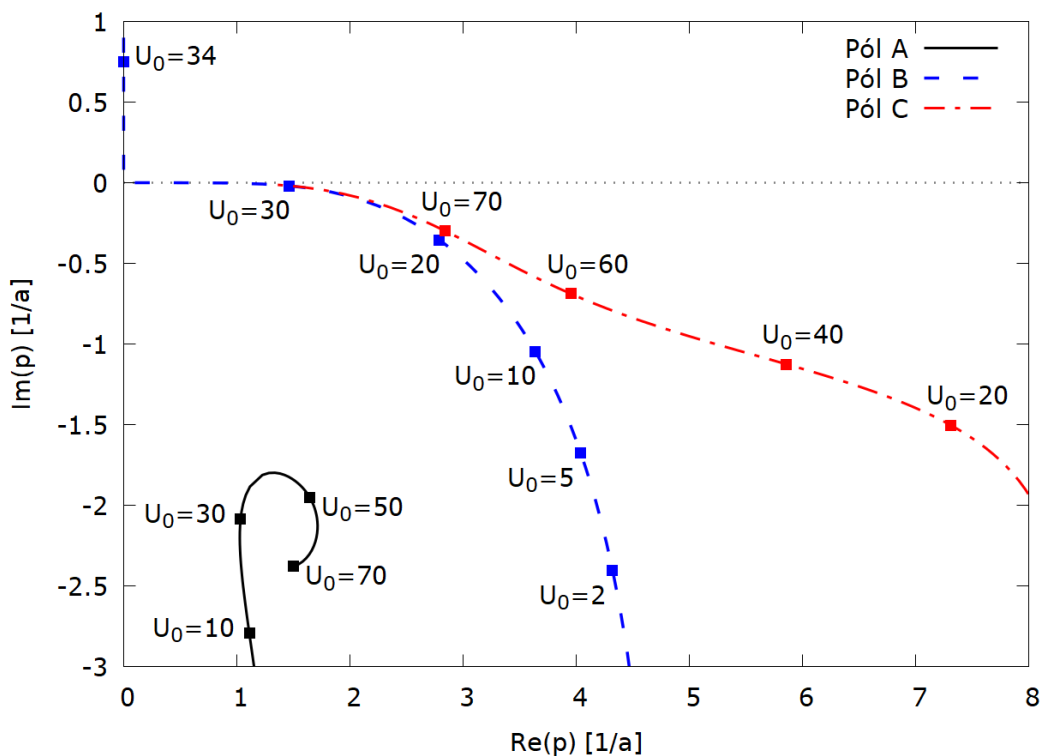
V grafech jsou opět označena minima  $|F(p)|$ , resp. maxima  $|S(p)|$ . Stejným způsobem jako v předešlé kapitole jsem získal jejich hodnoty a ověřil jejich přesnost s výsledky hledání pólů v kapitole 1.2. Získal jsem tři póly:



Obrázek 3.4: Horní obrázek: Amplituda implicitní funkce  $|F(p)|$  v komplexní rovině, červeně jsou zakroužkovány minima funkce. Dolní obrázek: Amplituda S-maticy  $|S(p)|$  v komplexní rovině, černě zakroužkována maxima funkce. Velikost amplitudy je vynesena na barevnou osu v logaritmické škále. Funkce jsou vykresleny pro moment hybnosti  $l = 3$  a hodnotu potenciálu  $U_0 = 11.4 a^{-2}$ . Zelený obdélník na dolním obrázku označuje integrační křivku při použití Cauchyova vzorce, viz část 3.3.

- pól **A**:  $p_A = (1.1 - 2.73i) \frac{1}{a}$
- pól **B**:  $p_B = (3.53 - 0.92i) \frac{1}{a}$
- pól **C**:  $p_C = (7.84 - 1.78i) \frac{1}{a}$

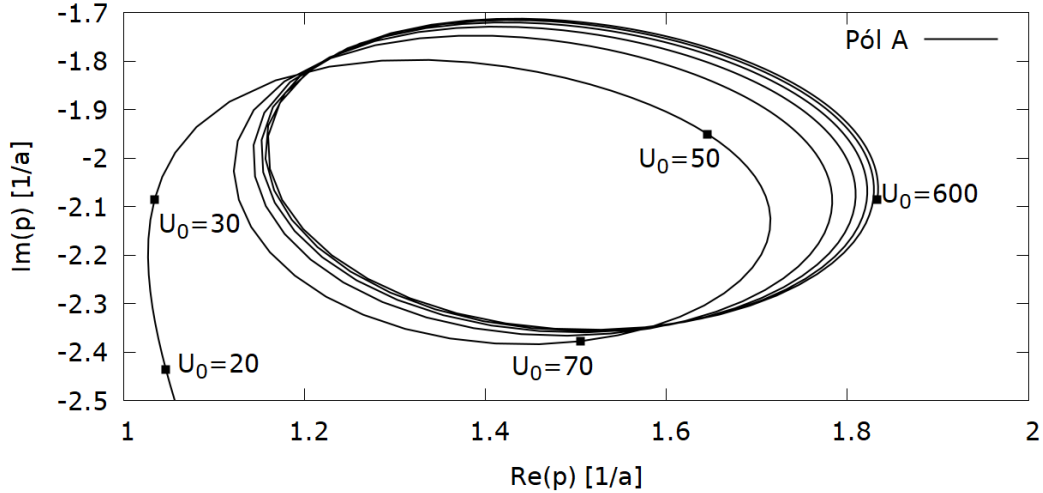
Vlastnosti pólů opět zkoumám sledováním jejich pohybu po komplexní rovině v závislosti na potenciálu – tento pohyb je ukázán na obrázku 3.5. Pól **B** je zřejmě rezonanční (jak už víme z analýzy grafu na obrázku 1.2) a oba póly **B** a **C** se pohybují komplexní rovinou po křivce do počátku, kde pak přechází na vázané stavy (pro přehlednost ukázáno pouze pro **B**). Trajektorie bodu **B** se shoduje s trajektorií rezonančního stavu na obrázku 1.3 získanou analytickými metodami.



Obrázek 3.5: Pohyb pólů **A**, **B** a **C** po komplexní rovině. V grafu jsou pro přehlednost označeny některé body příslušným hodnotami potenciálu  $U_0$ .

Komplexní pól **A** není rezonanční, jak je patrné z grafu účinného průřezu 1.2. Pozorujeme, že pól **A** se nejdříve blíží počátku, ale následně se otáčí – jedná se o typ pólu, jenž zůstává v pravém dolním kvadrantu komplexní roviny. Detailní pohyb bodu **A** (až do potenciálu  $U_0 = 600 a^{-2}$ ) ukazujeme na obrázku 3.6. Je zřejmé, že pól opravdu koná cyklický pohyb.

Porovnejme pohyb pólů na obrázku 3.5 s obrázkem 1.3, kde zřejmě pozorujeme pohyb rezonančního pólu **B**. Při tvorbě obrázku 1.3 jsem se spoléhal pouze na výsledky Mathematicy, což je problematické, neboť nemůžeme vědět, ke kterému z pólů funkce **FindRoot** zkonverguje. Při konstrukci trajektorií na obrázcích 3.5 a 3.3 se spoléhám především na hledání pólů pomocí implicitní funkce na obrázku 3.4. Tímto způsobem jsem získal póly pouze pro několik vybraných potenciálů a části mezi nimi vyplnil body počítanými Mathematicou, abych získal



Obrázek 3.6: Pohyb pólu **A** (potenciál v rozmezí  $U_0 \in (18; 600) a^{-2}$ ) po komplexní rovině. V grafu jsou označeny některé body příslušnými hodnotami potenciálu  $U_0$ .

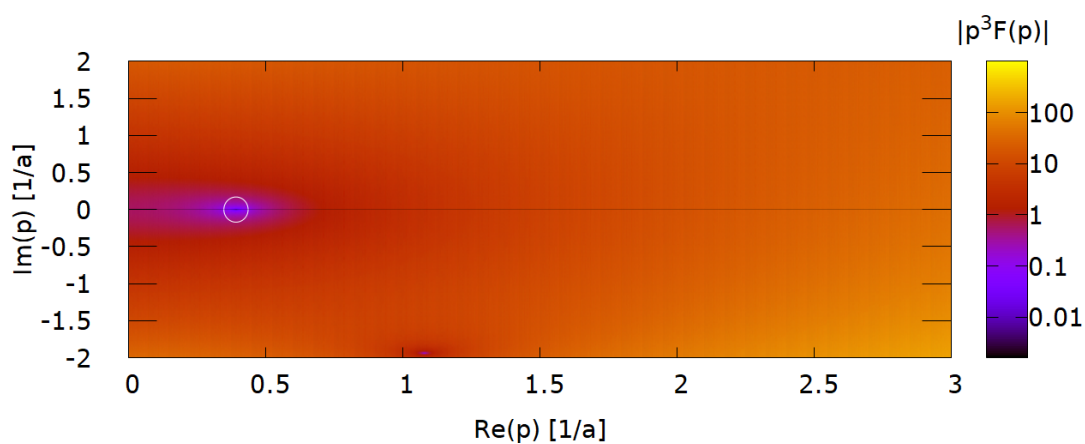
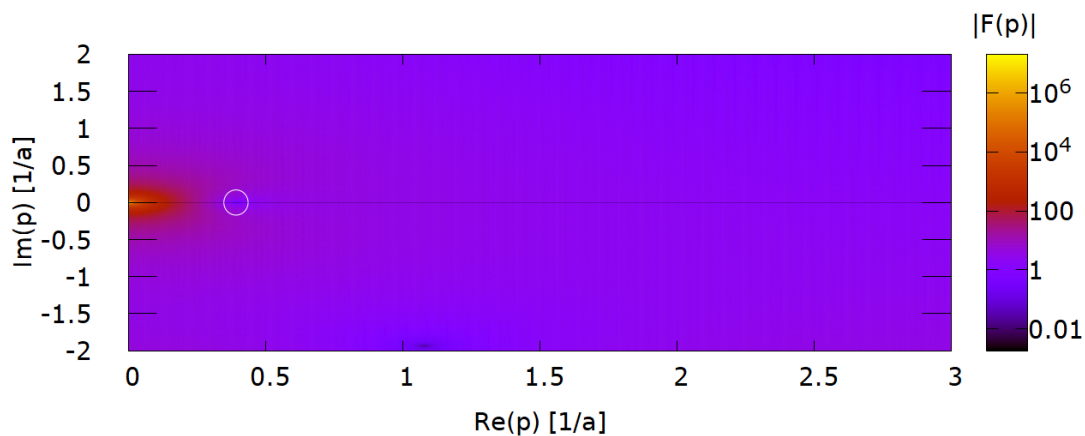
spojitý průběh. Tento způsob kombinující oba způsoby výpočtu se mi jeví jako velmi přesný a efektivní zároveň, neboť hledání pomocí Mathematicy je podstatně rychlejší.

U obrázku 1.3 bylo patrné, že nejsme schopni přesně zachytit přechod rezonančního pólu na vázaný a vázané stavy pro nižší potenciál. Tento problém částečně řeší použití grafů amplitudy implicitní funkce  $|F(p)|$  jako na obrázku 3.4, neboť nám ukazují, kde přesně máme póly hledat. I v tomto případě je pro  $l = 3$  náročnější rozeznat existenci minima  $|F(p)|$  v blízkosti počátku, neboť funkce  $F(p)$  pro  $p \rightarrow 0$  a  $l > 0$  diverguje. Problém lze vyřešit přechodem k implicitní funkci  $p^l F(p)$ , kde  $l$  je moment hybnosti. Díky znalosti explicitního vztahu pro  $F(p)$  můžeme samozřejmě vzorec přímo upravit, pro názornost uvádím případ pro  $l = 1$

$$pF(p) = R(E)\left(p^2 - \frac{1}{a^2} + \frac{ip}{a}\right)e^{ipa} + \left(ip - \frac{1}{a}\right)e^{ipa}. \quad (3.2)$$

Případ  $l = 0$  je samozřejmě triviální, jak vidíme i na obrázku 3.2, kde pro  $F(p)$  v počátku žádnou divergenci nepozorujeme. Tedy vynásobením funkce  $F(p)$  členem  $p^l$  odstraníme divergenci funkce  $\hat{h}_l(p)$  ze vzorce (1.75).

Na obrázku 3.7 porovnáváme výsledek hledání pólu blízkého počátku (pól **B** pro  $U_0 = 33 a^{-2}$ ) pro použití funkce  $F(p)$  na horním grafu a  $p^3 F(p)$  na grafu dolním. Na dolním grafu je pól jasně patrný, čili použití funkce  $p^3 F(p)$  je vhodné pro hledání pólů v blízkosti počátku. Amplituda této funkce s rostoucí velikostí  $p$  velmi rychle roste, tudíž nemusí být vhodná ke hledání pólů daleko od počátku. S využitím této funkce jsem mohl snáze nalézt póly blízké počátku a popsat tak například přechod pólu **B** z komplexního na vázaný stav v grafu na obrázku 3.5.

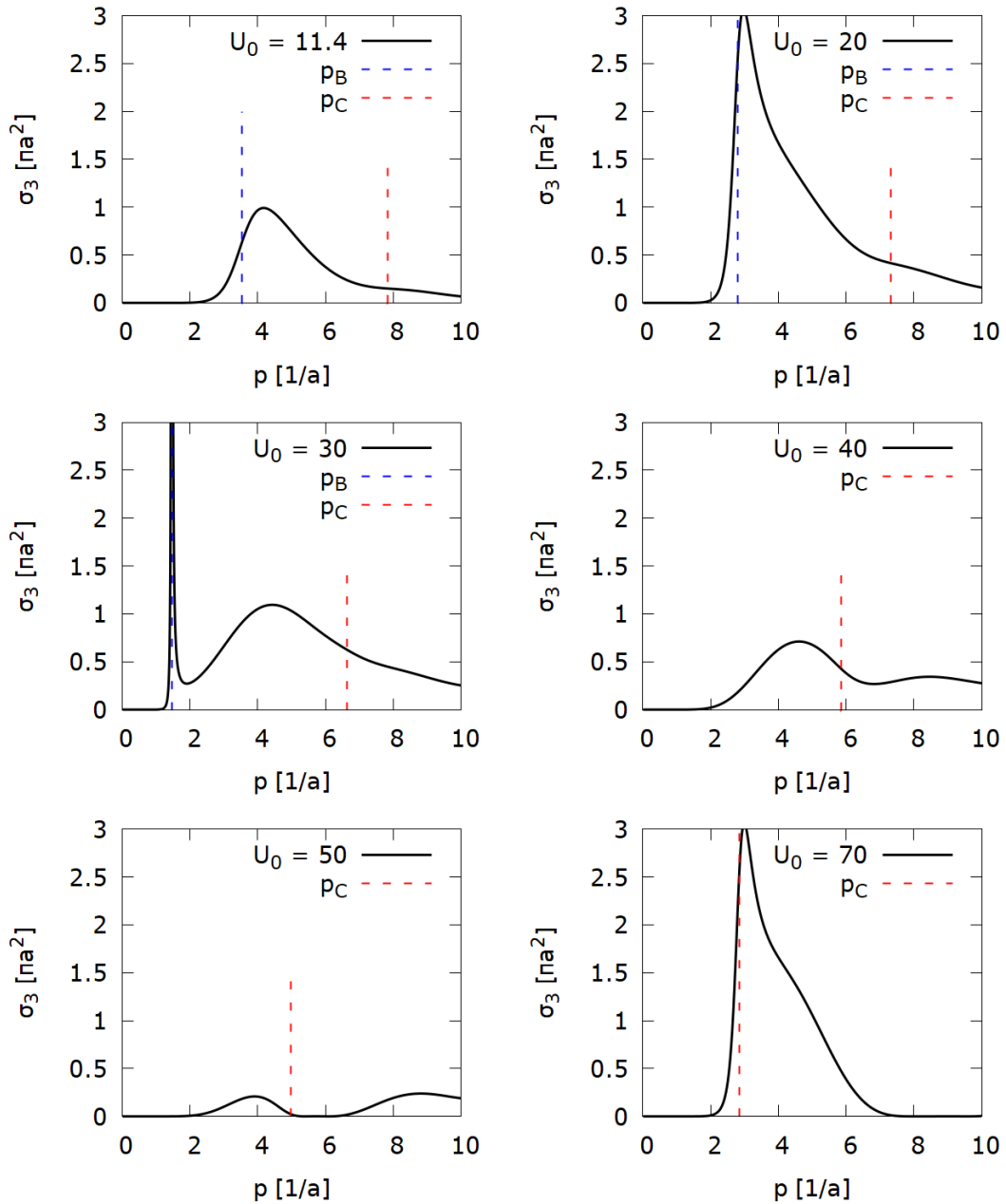


Obrázek 3.7: Porovnání amplitudy implicitní funkce  $|F(p)|$  (na horním obrázku) a amplitudy implicitní funkce  $|p^3 F(p)|$  zbavené divergence v  $p = 0$  pro  $l = 3$  a  $U_0 = 33 a^{-2}$ . V obou grafech je zakroužkován rezonanční pól.

### 3.2.3 Účinný průřez v závislosti na potenciálu

V této podkapitole rozebíráme tvar účinného průřezu  $\sigma_l$  v závislosti na potenciálu a jeho souvislost s pohybem jednotlivých komplexních pólů po komplexní rovině.

Nejprve jsem numerickým výpočtem S-matice  $S(p)$  získal účinný průřez  $\sigma_3$  dle vzorce (1.46), kde bereme pouze hodnoty S-matice pro reálná  $p$ . Účinný průřez jsem stejně jako u fázového posuvu porovnal s výsledkem analytického řešení a získal jsem obdobnou shodu jako v případě fázového posuvu na obrázku 3.1. Následující grafy lze tedy vygenerovat jak použitím analytického vztahu (viz grafy



Obrázek 3.8: Průběhy účinného průřezu  $\sigma_3(p)$  pro vybrané hodnoty potenciálu  $U_0 \in \{11.4, 20, 30, 40, 50, 70\} a^{-2}$ , v grafech jsou svislými čarami označeny reálné části rezonančních pólů **B** a **C**.

na obrázku 1.2), tak použitím numerické metody. Výhodou numerické metody je samozřejmě její aplikovatelnost na složitější potenciály, než je potenciálová jáma, pro které nemáme analytické řešení.

Pro další výsledky je důležité zkoumat chování účinného průřezu v závislosti na potenciálu  $U_0$ . Na obrázku 3.8 porovnááme pro případ  $l = 3$  průběhy účinného průřezu  $\sigma_3(p)$  pro vybrané potenciály. Vyznačujeme též polohu pólů **B** a **C** (resp. jejich reálné části). V prvních třech grafech je patrný nárůst rezonančního příspěvku pocházejícího od pólu **B**, který pro vyšší potenciály přechází na vázaný stav. Na posledním obrázku je zřejmý rezonanční peak pro pól **C** - vidíme tedy i z účinného průřezu, že pól **C** je také rezonanční. Zajímavé jsou grafy pro  $U_0 = 30 a^{-2}$ ,  $40 a^{-2}$ ,  $50 a^{-2}$ , kde na okolí hybnosti  $p = 4 a^{-1}$  pozorujeme růst účinného průřezu, který nesouvisí ani s jedním pólem. Jedná se patrně o chování účinného průřezu, které nesouvisí s rezonančními jevy, jak budeme ověřovat v další části. Ukážeme dále, že tento jev je výhodné zkoumat skrze odebrání příspěvků jednotlivých pólů z S-matice.

### 3.3 Odebírání pólů S-matice

V této části použijeme dvě metody manipulace s póly S-matice. To nám umožní identifikovat rezonanční a nerezonanční příspěvky k účinnému průřezu.

#### 3.3.1 Použití Cauchyova vzorce

Abychom mohli studovat póly S-matice, musíme mírně obměnit způsob jejího výpočtu. Využíváme zde matematickou teorii komplexních funkcí (konkrétně Cauchyův vzorec a Laurentův rozvoj) popsanou v [16]. Póly S-matice jsou jednonásobné [2], a pro krátkodosahové potenciály je S-matice analytická funkce hybnosti. Pól funkce  $S(p)$  v bodě  $p_0$  charakterizujeme pomocí rezidua  $\text{Res}_{p_0} S(p)$ :

$$\text{Res}_{p_0} S(p) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C S(p) dp = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} S(p_0 + \varepsilon e^{i\phi}) \varepsilon e^{i\phi} d\phi, \quad (3.3)$$

kde první integrál je přes libovolnou uzavřenou kladně orientovanou křivku  $C$  uzavírající pouze pól  $p_0$  a druhý integrál je přes kružnici o poloměru  $\varepsilon$ , čili body kružnice jsou vyjádřeny vztahem  $p = p_0 + \varepsilon e^{i\phi}$  pro  $\phi \in (0, 2\pi)$ . Integrál jsem pak počítal opět GL kvadraturou – pro  $\varepsilon = 0.01 a^{-1}$  hodnota rezidua konverguje s přesností na 14 desetinných míst pro řád kvadratury  $m = 12$ .

Hodnoty S-matice  $S(p)$  pak vyjadřuji Cauchyovým vzorcem

$$S(p) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{S(z)}{z - p} dz + \sum_{j=1}^N \frac{\text{Res}_{p_j} S(p)}{p - p_j}, \quad (3.4)$$

kde  $C$  je libovolná uzavřená kladně orientovaná křivka, jež uzavírá všechny póly  $\{p_j\}_{j=1}^N$ , a  $\text{Res}_{p_j} S(p)$  je residuum funkce  $S(p)$  v bodě  $p_j$ . Tato metoda byla zkoumána dříve v práci [4].

V případě že integrační křivka nezahrnuje žádný pól S-matice, suma v (3.4) nepřispívá. Pro tento případ jsem vypočetl účinný průřez dle vzorce (1.46) při dosazení za  $S(p)$  ze vzorce (3.4). Integrační křivkou byla stejně jako u výpočtu rezidua kružnice, na které platí  $z = p + \varepsilon e^{i\phi}$  pro  $\varepsilon$  dostatečně malé. Graf účinného průřezu se opět shodoval s výsledkem analytického řešení.

Dále jsem za integrační křivku vzal obdélník zahrnující pól  $B$ , jenž je zeleně vyznačen na obrázku 3.4. Zde už je při použití vzorce (3.4) třeba odečíst člen s residuem příslušným pólu  $p_B$ . Obdélník zahrnuje reálnou osu, takže jsem opět mohl vypočíst účinný průřez pro kontrolu s analytickým řešením. Je samozřejmě možné použít dle potřeby větší či menší obdélník (pro který není nutné odečítat reziduální členy), tedy příklad na obrázku 3.4 je pouze ilustrativní.

Zde je důležité poznamenat, že obdélník je mnohem větší než předtím použité kružnice a bylo třeba zpřesnit integraci. V tomto případě je efektivnější namísto pouhého zvýšení řádu  $m$  GL kvadratury, rozdělit křivky, přes které integruji, na několik menších. Strany obdélníku jsem tedy rozdělil na menší stejně dlouhé úsečky (strany rovnoběžné s reálnou osou na 10, strany rovnoběžné s imaginární osou na 5 úseček) a na ně jsem aplikoval GL kvadraturu s řádem  $m = 12$ . Při použití této metody se výsledný účinný průřez shodoval s výsledkem analytického řešení. V případě, že se ale strana obdélníka (případně body kružnic) blížila pólu  $p_B$ , začínal účinný průřez i pro větší  $m$  oscilovat (především pro hodnoty  $p$

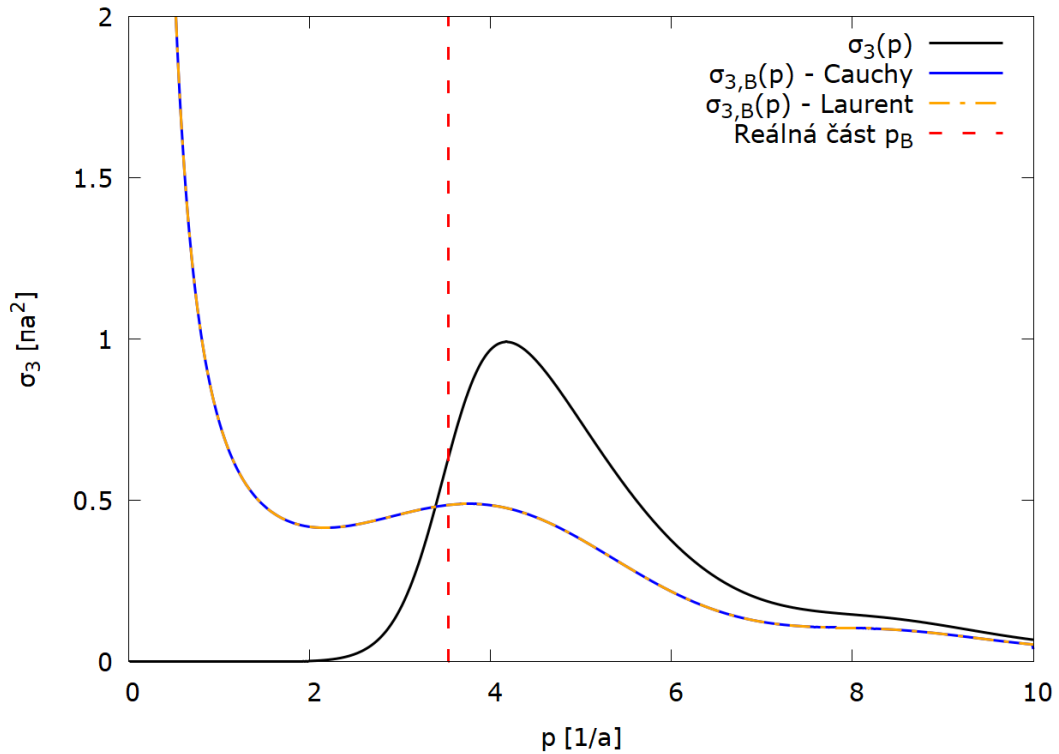
blízké reálné části pólu  $p_A$ ). Toto je zřejmě způsobeno velkými příspěvky v blízkosti divergence S-matice a následnou ztrátou přesnosti při jejich odčítání v GL kvadratuře.

### 3.3.2 Odebrání pólu Cauchyovým vzorcem

Zkoumejme dále tvar účinného průřezu po odebrání pólu  $p_B$ . Vypočteme hodnoty S-matice na reálné ose Cauchyovým vzorcem při integraci přes obdélník z obrázku 3.4, jenž zahrnuje pól  $p_B$ . Ve vzorci (3.4) ale neodečteme příslušné reziduum, čili počítáme pouze

$$S^B(p) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{S(z)}{z-p} dz. \quad (3.5)$$

Pro S-matici počítanou dle (3.5) jsem spočetl nový účinný průřez po odečtení pólu  $p_B$ , ozn.  $\sigma_{3,B}(p)$ . Tuto funkci porovnávám s původním účinným průřezem  $\sigma_3(p)$  v grafu na obrázku 3.9. Na obrázku je patrné snížení maxima v  $\Re(p_B)$ , které ztrácí rezonanční tvar, zároveň však zcela nemizí. Účinný průřez pro  $p \rightarrow 0$  diverguje, což je zřejmě způsobeno členem  $\frac{1}{p^2}$  ve vzorci (1.46).



Obrázek 3.9: Porovnání původního účinného průřezu  $\sigma_3(p)$  a účinného průřezu  $\sigma_{3,B}(p)$  po odečtení pólu v  $p_B$ . Křivka pro  $\sigma_{3,B}(p)$  počítaná z Cauchyova vzorce a z odečtení členu z Laurentova rozvoje se shodují. V grafu je svislou přerušovanou čarou označena reálná část rezonančního pólu  $p_B$ .

### 3.3.3 Přímé odečtení pólu

Druhá možnost je odebrat pól  $p_B$  S-matice bez použití Cauchyova vzorce, a to pouhým odečtením členu s reziduem od přímo počítaných hodnot  $S(p)$  na reálné



ose, tj. odečtením příslušného členu Laurentova rozvoje okolo daného pólu. Nový výraz pro S-matici tak počítáme jako

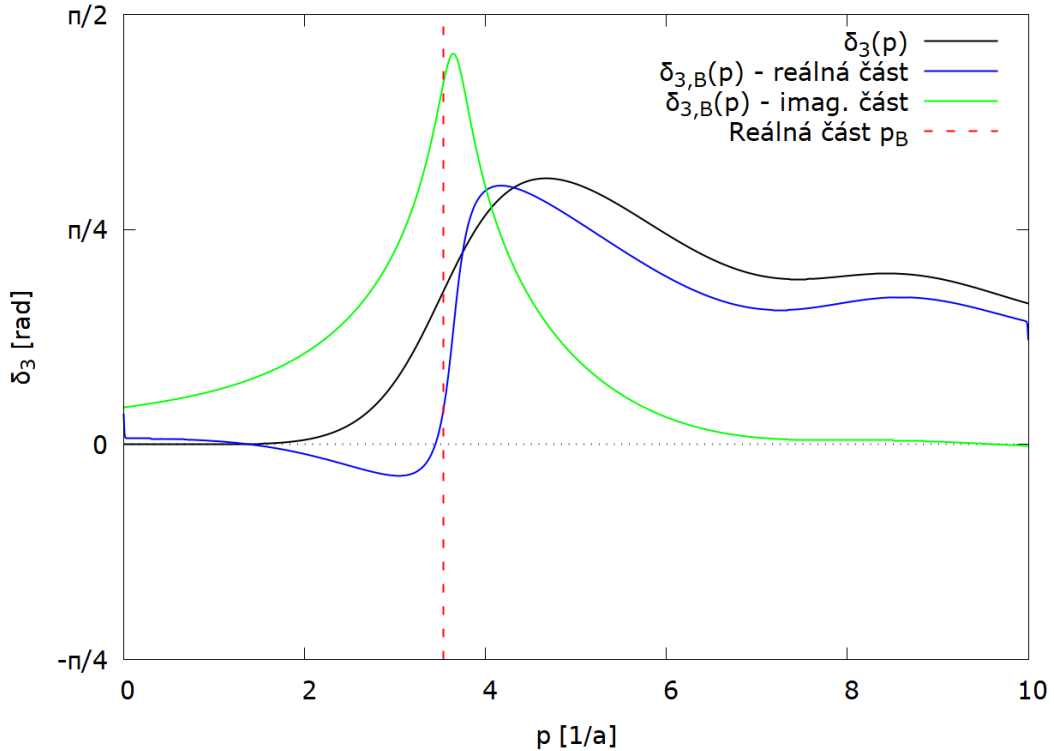
$$S^B(p) = S(p) - \frac{\text{Res}_{p_i} S(p)}{p - p_B}. \quad (3.6)$$

Tento výpočet vyžaduje přesné zjištění polohy pólu  $p_B$ , je ale výrazně rychlejší než výpočet vzorcem (3.5). Na obrázku 3.9 porovnávané obě metody výpočtu S-maticy, resp. účinného průřezu. Z grafu vidíme, že výsledky se pro oba výpočty shodují a pro odečtení pólu tak můžeme používat méně výpočetně náročnou metodu ze vzorce (3.6). Ke stejnému výsledku jsem došel při odečítání obou rezonančních pólů  $\mathbf{B}$  a  $\mathbf{C}$ , viz níže.

Stejným způsobem lze spočíst z S-maticy s odebraným pólem fázový posuv  $\delta_{l,B}(p)$  jako komplexní logaritmus

$$\delta_{l,B}(p) = \frac{1}{2i} \ln S(p). \quad (3.7)$$

Tento výraz má na rozdíl od původního reálného fázového posuvu nenulovou imaginární část. Na obrázku 3.10 porovnávané původní posuv  $\delta_3(p)$  s reálnou a imaginární částí fázového posuvu po odebrání pólu  $\delta_{3,B}(p)$ . Vidíme, že imaginární část má maximum v blízkosti pólu.

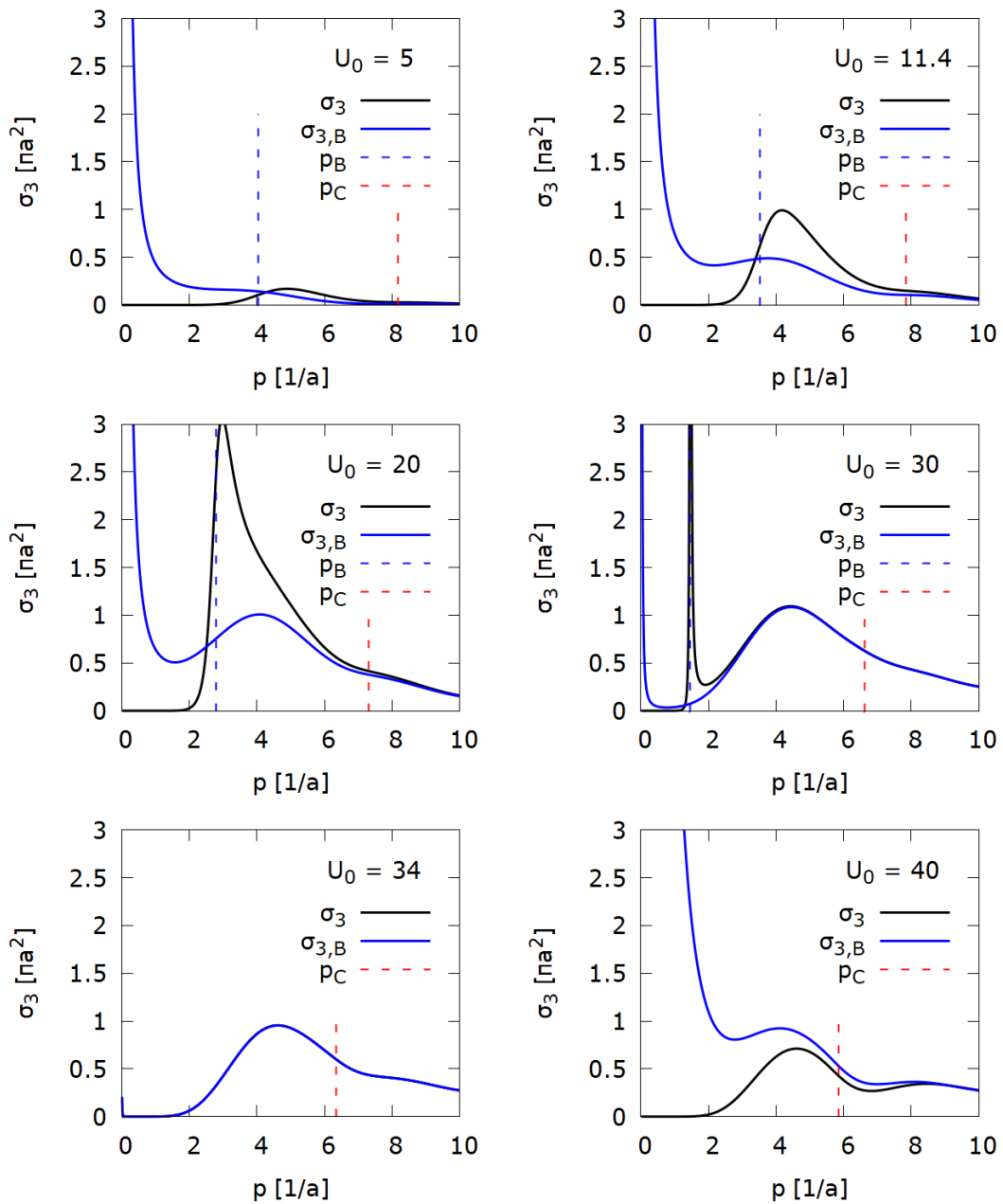


Obrázek 3.10: Porovnání původního fázového posuvu  $\delta_3(p)$  s reálnou a imaginární částí fázového posuvu  $\delta_{3,B}(p)$  po odečtení pólu v  $p_B$ . V grafu je svislou přerušovanou čarou označena reálná část rezonančního pólu  $p_B$ .

### 3.3.4 Účinný průřez v závislosti na potenciálu

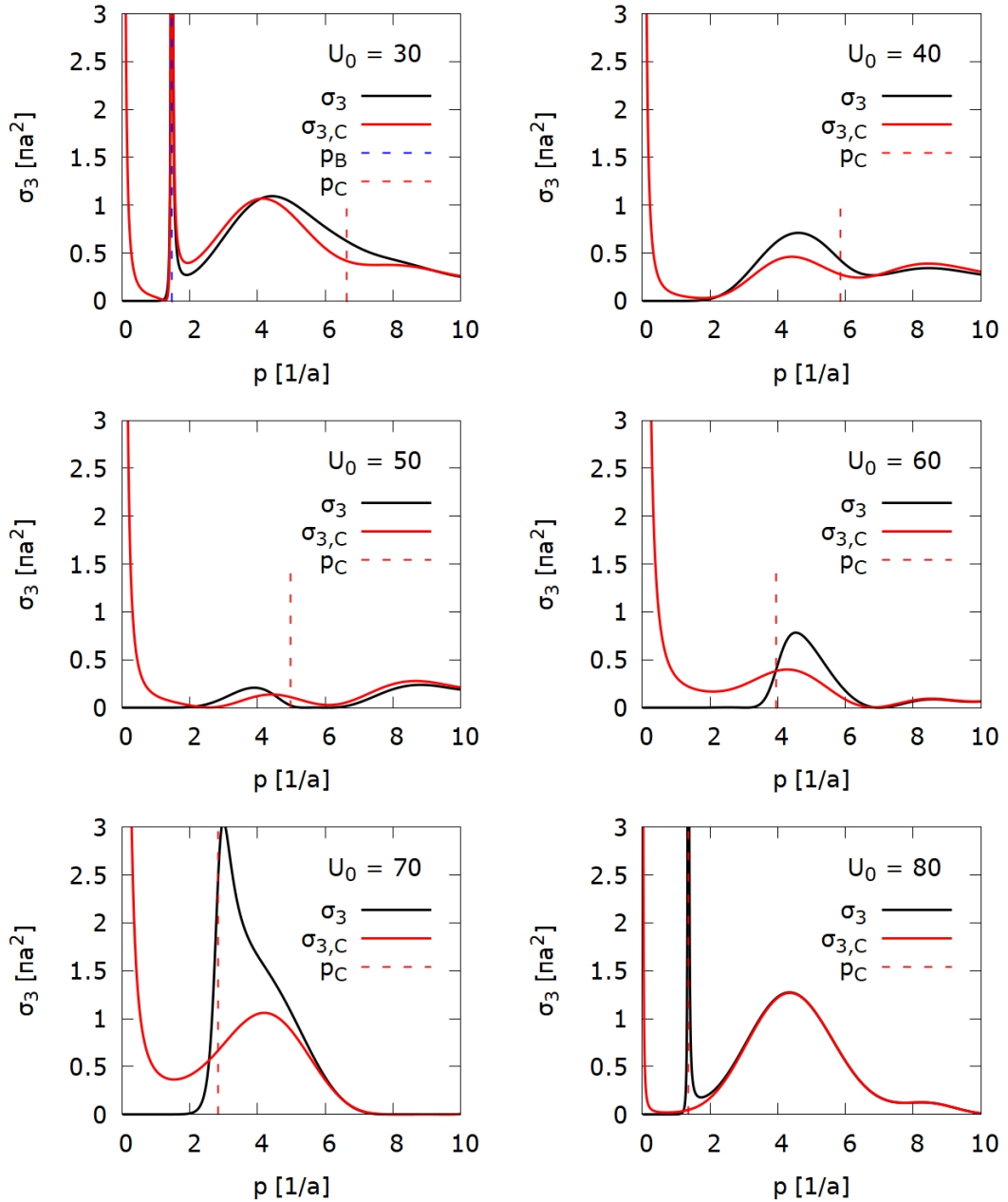
V této části opakujeme postup z kapitoly 3.2.3 a porovnáваме chování účinného průřezu po odebrání příslušného pólu pro různé potenciály. Jak jsme již viděli u obrázků 3.9 a 3.10, účinný průřez po odebrání pólu diverguje pro hodnoty  $p$  blízké nule,  $p$  blízké nule, pro větší  $p$  by měl ale konvergovat k původnímu účinnému průřezu. Předmětem zkoumání jsou především změny v rezonančních strukturách, které u účinného průřezu pozorujeme. Chceme také určit, které části účinného průřezu nejsou důsledkem rezonancí.

Nejprve jsem zkoumal chování účinného průřezu při odebrání jednoho z pólů



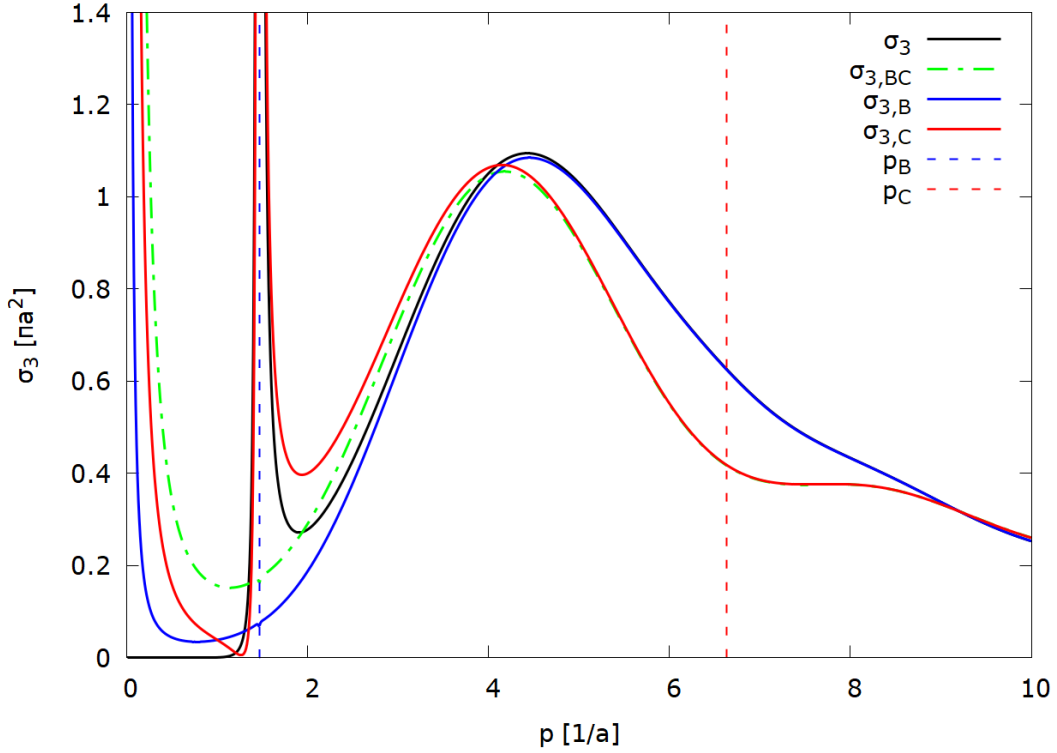
Obrázek 3.11: Průběhy účinného průřezu  $\sigma_3(p)$  a  $\sigma_{3,B}(p)$  po odebrání pólu **B** pro vybrané hodnoty potenciálu  $U_0 \in \{5, 11.4, 20, 30, 34, 40\} a^{-2}$ . V grafech jsou označeny reálné části rezonančních pólů **B** a **C**.

**B** a **C**. Výsledné grafy jsou na obrázcích 3.11 a 3.12. Z grafů je zřejmé, že zejména pro výrazné rezonance (tj. pro pól blízký reálné ose) je mimo okolí daného pólu účinný průřez po odebrání pólu podobný původní funkci  $\sigma_l(p)$  v širokém rozsahu hybností, s výjimkou okolí rezonance, neboť odstraněním pólu je odstraněn i příslušný rezonanční peak (jasně patrné pro  $U_0 = 30 a^{-2}$  na obrázku 3.11 a pro  $U_0 = 80 a^{-2}$  na obrázku 3.12). Opravdu tedy získáváme tvar účinného průřezu zbaveného rezonance. U pólu *B* zkoumáme také tvar účinného průřezu při odebrání vázaného stavu. Pro vázaný stav blízký počátku (potenciál  $U_0 = 34$ ) jsou obě funkce téměř shodné, ani pro vzdálenější vázaný stav nepozorujeme výraznější změnu tvaru křivky, pouze výrazný růst pro  $p \rightarrow 0$ .



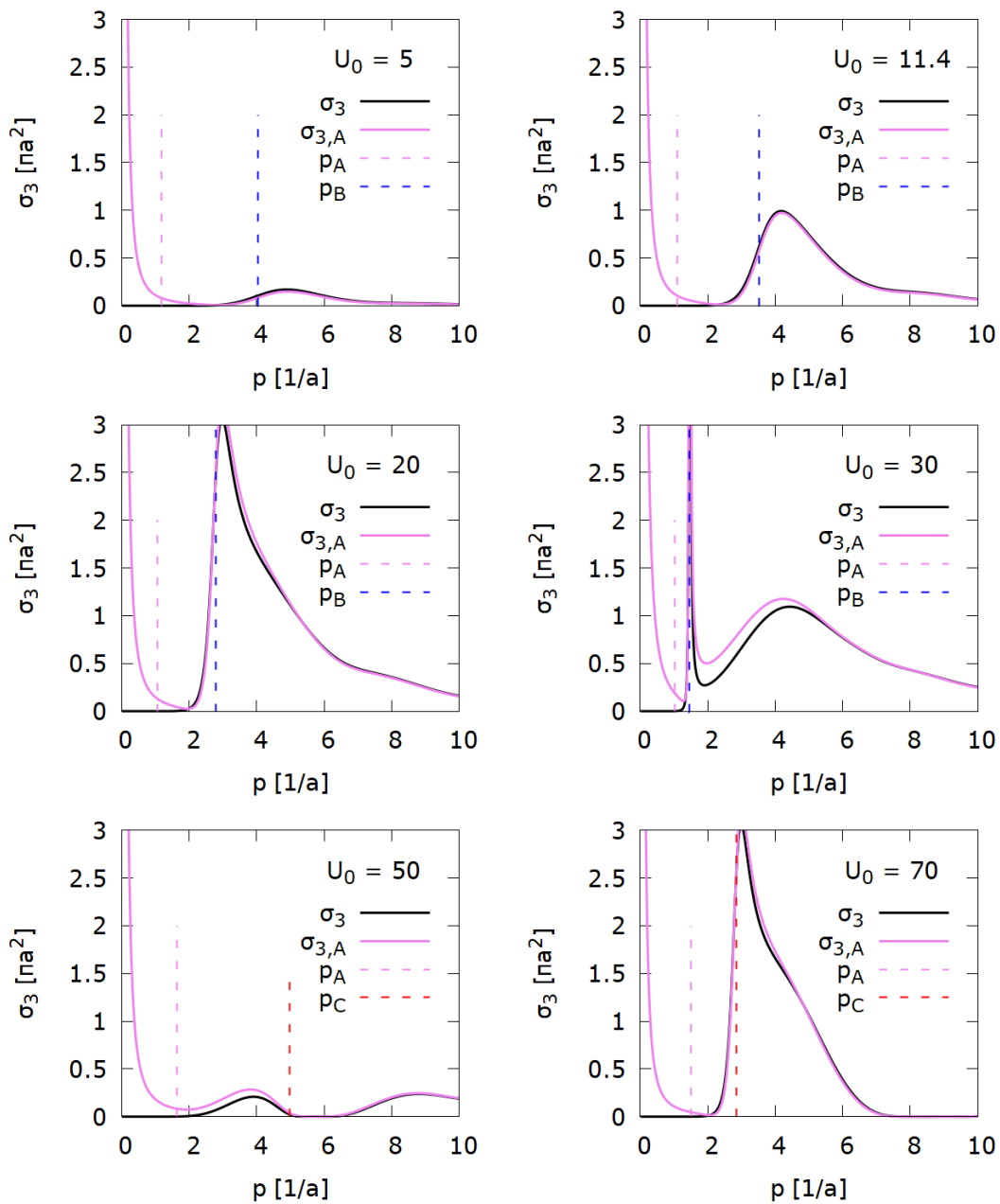
Obrázek 3.12: Průběhy účinného průřezu  $\sigma_3(p)$  a  $\sigma_{3,C}(p)$  po odebrání pólu **C** pro vybrané hodnoty potenciálu  $U_0 \in \{30, 40, 50, 60, 70, 80\} a^{-2}$ . V grafech jsou označeny reálné části rezonančních pólů **B** a **C**.

Zkoušel jsem dále odečíst oba dva póly **B** a **C**. Obrázek 3.13 ukazuje porovnání pro potenciál  $U_0 = 30 a^{-2}$ , tedy pro potenciál s výrazným rezonančním peakem odpovídajícím pólu **B**. Z obrázku 3.13 vidíme, že pól **C** má značný vliv na účinný průřez v širokém intervalu hybností od cca  $4 a^{-1}$  do  $9 a^{-1}$ , tento interval se pro rostoucí potenciál a zvyšující se rezonanční peak zužuje, jak vidíme na obrázku 3.12.



Obrázek 3.13: Účinné průřezy  $\sigma_3(p)$ ,  $\sigma_{3,B}(p)$  po odebrání pólu **B**,  $\sigma_{3,C}(p)$  po odebrání pólu **C** a  $\sigma_{3,BC}(p)$  po odebrání obou pólů pro hodnotu potenciálu  $U_0 = 30 a^{-2}$ . V grafech jsou označeny reálné části rezonančních pólů **B** a **C**.

Jak už je nadneseno v kapitole 3.2.3, lze v okolí hybnosti  $p = 4 a^{-1}$  pozorovat nerezonanční růst. Tuto domněnku jasně potvrzují grafy na obrázcích 3.11 a 3.12, kde je vidět, že i po odebrání příslušného pólu zůstává tento nerezonanční peak na svém místě. Otázkou je, zda se nejedná o strukturu způsobenou nerezonančním komplexním pólem **A**. Vykreslil jsem proto i účinný průřez  $\sigma_{3,A}(p)$  po odebrání pólu **A** a porovnal ho pro vybrané potenciály na obrázku 3.14 s původním  $\sigma_l(p)$ . V grafech je patrné, že i odebrání pólu **A** má na pozorovaný nerezonanční peak minimální vliv, stejně tak na celý průběh účinného průřezu mimo hodnoty blízké nule. Pouze pro  $U_0 = 30 a^{-2}$ ,  $50 a^{-2}$  se zdá být vliv pólu **A** výraznější. Toto je pravděpodobně způsobeno přiblížením se pólu **A** reálné ose, viz obrázek 3.6.



Obrázek 3.14: Průběhy účinného průřezu  $\sigma_3(p)$  a  $\sigma_{3,A}(p)$  po odebrání pólu **A** pro vybrané hodnoty potenciálu  $U_0 \in \{5, 11.4, 20, 30, 50, 70\} a^{-2}$ . V grafech jsou označeny reálné části rezonančních pólů **A** a **B**.

# 4. Diskuze

## 4.1 Hledání vázaných a Siegertových stavů

V první části práce využíváme analytického vztahu (1.56) ke spočtení Siegertových stavů v tabulkách 1.1 a 1.2, tyto výsledky nám v pozdější části práce posloužili k ověření výsledků numerické metody. Díky použití B-spline báze a její kombinací s metodou R-matice jsme získali dvě nové metody nalezení vázaných stavů: přímou diagonalizací matice hamiltoniánu a pak přímým hledáním minima funkce  $F(p)$  na obrázcích 3.2 a 3.4.

První metoda je méně přesná, jak je zřejmé z výsledků v tabulkách 3.1 a 3.4. Pro coulombický potenciál jsem dosáhl podobné přesnosti jako v [7], naopak pro potenciálovou jámu jsem dosáhl konvergence pouze na pět desetinných míst a časová náročnost byla navíc ze všech metod největší. Diagonalizace hamiltoniánu ale slouží jako dobré ověření správnosti numerické metody. Pro složitější potenciály, pro které neumíme získat analytický vztah typu (1.56), nám pak mohou výsledky diagonalizace sloužit jako první odhad vázaných stavů před aplikací metody R-matice.

Při zkoumání pohybu pólů po komplexní rovině se mi podařilo potvrdit analytické výsledky v [8]. Získaný pohyb pólů byl velmi důležitý pro znázornění závislosti účinného průřezu v závislosti na potenciálu. Předmětem dalšího bádání je existence nerezonančních pólů podobných pólu  $\mathbf{A}$ , jejichž vliv na účinný průřez je oproti rezonančním pólům minimální. Je možné, že pro větší moment hybnosti  $l$  existuje více takových pólů. Je dále možné zkoumat periodu cyklického pohybu pólu  $\mathbf{A}$  a hledat možnou závislost účinného průřezu na tomto pohybu. Jistou pravidelnost lze vyzorovat v grafech účinného průřezu  $\sigma_{3,A}(p)$  na obrázku 3.14. Pro potenciály  $U_0 = 20$  a  $U_0 = 70$  pozorujeme podobné rezonanční peaky od pólu  $\mathbf{B}$  a  $\mathbf{C}$ , pól  $\mathbf{A}$  má (viz obrázek 3.6) pro tytéž potenciály přibližně stejnou imaginární část a vliv jeho odstranění se také jeví podobným.

## 4.2 Fázový posuvy a účinné průřezy s odečteným pólem

Fázovému posuvu  $\delta_{3,B}$  z obrázku 3.10 nepřisuzuji fyzikální význam. Můžeme na něm však ilustrovat matematické vlastnosti S-matice a účinného průřezu po odebrání pólu a zdůvodnit divergenci  $\sigma_{3,B}(p)$  v počátku. Fázový posuv  $\delta_{3,B}$  má nenulovou imaginární složku a je nenulový v  $p = 0$ , tudíž S-matice nemůže být unitární a neplatí  $S^B(0) = 1$ . Účinný průřez tedy musí pro  $p \rightarrow 0$  divergovat, jak vidíme na obrázku 3.9. Viděli jsme též, že imaginární část  $\delta_{3,B}$  pro vysoké hodnoty hybností daleko od pólu konverguje k nule a reálná část se blíží původnímu fázovému posuvu. Analogicky konverguje účinný průřez  $\sigma_{3,B}(p)$  k původní funkci  $\sigma_3(p)$ .

Divergence účinného průřezu  $\sigma_{3,B}(p)$  pro  $p \rightarrow 0$  je způsobena členem  $\frac{1}{p^2}$  ve vzorci (1.46). Podstatné je pro nás chování účinného průřezu na okolí rezonancí. V našem případě nám divergentní chování nebránilo porovnat jednotlivé průřezy ani pro rezonance blízké počátku (např. případ  $U_0 = 80 a^{-2}$  obrázku 3.12). Pro

široké rezonance v blízkosti počátku ale může být divergence rušivá.

Otázkou je, zda lze toto divergentní chování plně odstranit a zbavit se jeho rušivého efektu. Možným způsobem by bylo rozšíření vzorce (3.6) na vztah

$$S^B(p) = S(p) - \frac{\text{Res}_{p_i} S(p)}{p - p_B} - \frac{\text{Res}_{p_i} S(p)}{p_B}, \quad (4.1)$$

čímž bychom dosáhli konvergence

$$S^B(p) \xrightarrow{p \rightarrow 0} 0. \quad (4.2)$$

Tato metoda má ale nulové matematické a fyzikální opodstatnění, navíc nezískáme pomocí ní unitární S-matici, pouze funkci uměle upravenou tak, aby v  $p = 0$  konvergovala k nule.

V práci jsem tak nedošel k účinnému způsobu odstranění divergence v  $p = 0$ . Otázka, zda je možné či smysluplné ji odstranit, může být rozhodně předmětem dalšího bádání.

### 4.3 Porovnání odečtení jednoho a dvou pólů

Stěžejní částí výsledků je porovnání účinných průřezů  $\sigma_{3,BC}$ ,  $\sigma_{3,B}$ ,  $\sigma_{3,C}$  a  $\sigma_3$  na obrázku 3.13. Funkce  $\sigma_{3,BC}(p)$  zjevně kombinuje efekty odebrání jednotlivých pólů  $B$  a  $C$ . Nevýhodu odebrání více pólů vidím v rychlejším růstu  $\sigma_{3,BC}(p)$  pro malé  $p \rightarrow 0$ , než pozorujeme u jednotlivých funkcí  $\sigma_{3,B}(p)$  nebo  $\sigma_{3,C}(p)$ . To nevadí, pokud zkoumáme struktury účinného průřezu pro větší  $p$ . Pokud ale chceme porovnat tvar účinného průřezu blíže nule (zde cca pro  $p < 2 a^{-1}$ ), je lepší odečítat vždy pouze jeden pól. Možnost odečítání více pólů je jedním z důvodů, proč by bylo užitečné odstranit divergenci v  $p = 0$ .

### 4.4 Analýza rezonančních struktur

Výsledky odebírání rezonančních pólů v grafech účinného průřezu na obrázcích 3.14 a 3.12 ukazují možné použití této práce pro oddělení rezonančních struktur při interakcích podobně jako [4]. Je patrné, že touto manipulací s póly S-matice lze odhalit nerezonanční struktury účinného průřezu. Hypotézu, že zdrojem těchto struktur je nerezonanční pól  $\mathbf{A}$ , vyvrací grafy  $\sigma_{3,A}(p)$  na obrázku 3.14. Otázkou je, zda není pozorovaný peak, který zbyl po pólech  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{C}$  důsledkem existence vzdálenějších komplexních pólů. Problém je, že při odečtení většího množství pólů se zvětší divergence účinného průřezu v  $p = 0$ . Vysvětlení tohoto jevu může být předmětem dalšího zkoumání. Zajímavé jsou i výsledky odečtení vázaného stavu  $\mathbf{B}$  pro  $U_0 = 34a^{-2}$ ,  $40 a^{-2}$ , neboť se zdá, že na rozdíl od rezonančních pólů nemění odečtení vázaného pólu tvar účinného průřezu vyjma divergence způsobené členem  $\frac{1}{p^2}$  ve vztahu (1.46).

# Závěr

V této práci jsem zkoumal srážkové procesy ve sféricky symetrickém potenciálu pro nerelativistickou částici bez spinu. Zaměřil jsem se speciálně na analýzu pomocí tzv. Siegertových stavů a zkoumal jsem jejich vliv na pozorovatelné veličiny reprezentované účinným průřezem interakce.

Problém jsem nejprve řešil analyticky pro sférickou konstantní potenciálovou jámu. Na tomto příkladu jsem vysvětlil pojem S-matice a Siegertových stavů jako pólů S-matice. Výsledkem analytického řešení byly grafy parciálního účinného průřezu interakce a analytickým vztahem nalezené Siegertovy stavy.

Hlavním cílem práce bylo otestovat numerickou metodu pro hledání Siegertových stavů a manipulaci pólů S-matice. K tomu jsme implementovali metodu R-matice v kombinaci s reprezentací vlnové funkce v bázi B-spline funkcí. Numerické výpočty jsem prováděl v programovacím jazyce Fortran. Metodu jsem verifikoval ověřením numerických výsledků pro sféricky symetrickou konstantní potenciálovou jámu s výsledky analytického řešení.

Základní výstupy práce ohledně chování pólů S-matice pro sféricky symetrický potenciál jsou grafy zaznamenávající trajektorii pólů po komplexní rovině v závislosti na potenciálu a grafy účinného průřezu v závislosti na potenciálu a tedy na pohybu pólů. Dále grafy zkoumající odebrání pólů S-matice, jež porovnávají účinný průřez v závislosti na potenciálu po odebrání jednotlivých pólů a oddělení jim příslušících (rezonančních) struktur. Na základě těchto výsledků jsme jednoznačně ukázali, že některé struktury v účinných průřezech (široké peaky) nemají původ v rezonančních pólech S-matice.

Naše výsledky rozšiřují článek [8], kde byly přesně nalezeny pouze Siegertovy stavy s  $l = 0$  a  $l = 1$ . Naše metoda umožňuje nalézt Siegertovy stavy numericky libovolně přesně pro jakýkoliv moment hybnosti a libovolný sféricky symetrický interakční potenciál. Námi použitá numerická metoda nám dále umožňuje vypočítat i účinný průřez po odebrání vázaných stavů. Tím naše práce doplňuje výsledky v [4], jelikož tam použitá numerická metoda není aplikovatelná na odebrání vázaných stavů. Při analýze účinného průřezu je výhodné, že se na rozdíl od [4] zabýváme jednodušším problémem a mohli jsme jednoduše oddělit rezonanční peaky v grafu účinného průřezu a nalézt tak struktury, jejichž zdrojem nejsou póly S-matice blízké reálné ose.

Metodu R-matice ve spojení s bázi B-spline funkcí lze rozšířit na dlouhodobé potenciály, např. [10], a vícekanálové systémy, např. [4], což bude předmětem další práce.



# Seznam použité literatury

- [1] Harald Friedrich. *Scattering theory*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2016.
- [2] John R. Taylor. *Scattering theory: The quantum theory of nonrelativistic collisions*. John Wiley Sons, Inc., New York, 1972.
- [3] V. I. Kukulin, Jiří Horáček, and V. M. Krasnopol'skij. *Theory of Resonances: principles and applications*. Academia, Praha, 1989.
- [4] Rakityansky S. A. and N. Elander. Analyzing the contribution of individual resonance poles of the S-matrix to two-channel scattering. *Journal of Quantum Chemistry*, 106:25, 2005.
- [5] P. Descouvemont and D. Baye. The R-matrix theory. *Reports on Progress in Physics*, 73(036301), feb 2010.
- [6] Philip George Burke. *R-Matrix Theory of Atomic Collisions*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2011.
- [7] H. Bachau, E. Cormier, P. Decleva, J. E. Hansen, and F. Martín. Applications of B-splines in atomic and molecular physics. *Reports on Progress in Physics*, 64(12):1815–1943, nov 2001.
- [8] H. M. Nussenzveig. The poles of the S-matrix of a rectangular potential well of barrier. *Nuclear Physics*, 11:499 – 521, 1959.
- [9] B. Belchev, S.G. Neale, and M.A. Walton. Flow of S-matrix poles for elementary quantum potentials. *Canadian Journal of Physics*, 89(11):1127–1140, Nov 2011.
- [10] H. Estrada and W. Domcke. Analytic properties of the S-matrix for a simple model of fixed-nuclei electron-polar-molecule scattering. *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. (1968-1987)*, 17:279, 1984.
- [11] J. Zamastil and J. Benda. *Kvantová mechanika a elektrodynamika*. Praha: Univerzita Karlova v Praze, nakladatelství Karolinum, 2016.
- [12] Z. Mašín. *Resonance formation in electron collisions with pyrimidine-like targets*. PhD thesis, The Open University Department of Physical Sciences, 2012.
- [13] T. S. Chihara. *An Introduction to Orthogonal Polynomials*. Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1978.
- [14] Steven E. Koonin. *Computational Physics*. The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., Menlo Park, California, 1986.
- [15] John Burkardt. URL: <https://people.sc.fsu.edu/~jburkardt>, Jul 2020. Accessed: 2021-01-20.
- [16] Jiří Kopáček. *Matematická analýza nejen pro fyziky (IV)*. Matfyzpress, 2010.

# Seznam obrázků

1.1	Průběh fázového posuvu $\delta_l(p)$ pro $l = 0$ a $l = 3$ v případě potenciálové jámy s $U_0 = 11.4 a^{-2}$ . Svislá čára v grafu značí existenci rezonančního pólu S-matice pro $l = 3$ s reálnou částí hybnosti $\Re(p) \doteq 3.53 a^{-1}$ . . . . .	10
1.2	Průběh účinného průřezu $\sigma_l(p)$ pro $l = 0$ a $l = 3$ v případě potenciálové jámy s $U_0 = 11.4 a^{-2}$ . Svislá přerušovaná čára v grafu značí existenci rezonančního pólu S-matice pro $l = 3$ s reálnou částí hybnosti $\Re(p) \doteq 3.53 a^{-1}$ . . . . .	10
1.3	Trajektorie pólu S-matice pro $l = 3$ v komplexní rovině hybností v závislosti na potenciálu $U_0$ ; vybrané body jsou označeny hodnotami potenciálu. . . . .	14
2.1	Kompletní báze B-spline funkcí řádu $k = 4$ na ekvidistantní sekvenci bodů $\{0,1,2,3,4,5\}$ . Svislé červené čáry oddělují jednotlivé intervaly, na kterých je každá B-spline funkce polynomem. . . . .	19
3.1	Fázový posuv $\delta_0(p)$ (levá osa $y$ ). Porovnání numericky počítaných hodnot s analytickým řešením. Relativní chyba $\Delta(p)$ numerického fázového posuvu (pravá osa $y$ ). . . . .	26
3.2	Horní obrázek: Amplituda implicitní funkce $ F(p) $ vykreslená v komplexní rovině, zakroužkována minima funkce. Dolní obrázek: Amplituda S-matice $ S(p) $ v komplexní rovině, zakroužkována maxima funkce. Velikost amplitudy je vynesena na barevnou osu v logaritmické škále. Funkce jsou vykresleny pro moment hybnosti $l = 0$ hodnotu potenciálu $U_0 = 11.4 a^{-2}$ . . . . .	27
3.3	Pohyb pólů <b>P</b> , <b>Q</b> a <b>R</b> po komplexní rovině pro $l = 0$ v závislosti na potenciálu $U_0$ . V grafu jsou pro přehlednost označeny některé body hodnotami potenciálu $U_0$ . . . . .	28
3.4	Horní obrázek: Amplituda implicitní funkce $ F(p) $ v komplexní rovině, červeně jsou zakroužkovány minima funkce. Dolní obrázek: Amplituda S-matice $ S(p) $ v komplexní rovině, černě zakroužkována maxima funkce. Velikost amplitudy je vynesena na barevnou osu v logaritmické škále. Funkce jsou vykresleny pro moment hybnosti $l = 3$ a hodnotu potenciálu $U_0 = 11.4 a^{-2}$ . Zelený obdélník na dolním obrázku označuje integrační křivku při použití Cauchyova vzorce, viz část 3.3. . . . .	29
3.5	Pohyb pólů <b>A</b> , <b>B</b> a <b>C</b> po komplexní rovině. V grafu jsou pro přehlednost označeny některé body příslušným hodnotami potenciálu $U_0$ . . . . .	30
3.6	Pohyb pólu <b>A</b> (potenciál v rozmezí $U_0 \in (18; 600) a^{-2}$ ) po komplexní rovině. V grafu jsou označeny některé body příslušnými hodnotami potenciálu $U_0$ . . . . .	31

3.7	Porovnání amplitudy implicitní funkce $ F(p) $ (na horním obrázku) a amplitudy implicitní funkce $ p^3 F(p) $ zbavené divergence v $p = 0$ pro $l = 3$ a $U_0 = 33 a^{-2}$ . V obou grafech je zakroužkován rezonanční pól. . . . .	32
3.8	Průběhy účinného průřezu $\sigma_3(p)$ pro vybrané hodnoty potenciálu $U_0 \in \{11.4, 20, 30, 40, 50, 70\} a^{-2}$ , v grafech jsou svislými čarami označeny reálné části rezonančních pólů <b>B</b> a <b>C</b> . . . . .	33
3.9	Porovnání původního účinného průřezu $\sigma_3(p)$ a účinného průřezu $\sigma_{3,B}(p)$ po odečtení pólu v $p_B$ . Křivka pro $\sigma_{3,B}(p)$ počítaná z Cauchyova vzorce a z odečtení členu z Laurentova rozvoje se shodují. V grafu je svislou přerušovanou čarou označena reálná část rezonančního pólu $p_B$ . . . . .	36
3.10	Porovnání původního fázového posuvu $\delta_3(p)$ s reálnou a imaginární částí fázového posuvu $\delta_{3,B}(p)$ po odečtení pólu v $p_B$ , V grafu je svislou přerušovanou čarou označena reálná část rezonančního pólu $p_B$ . . . . .	37
3.11	Průběhy účinného průřezu $\sigma_3(p)$ a $\sigma_{3,B}(p)$ po odebrání pólu <b>B</b> pro vybrané hodnoty potenciálu $U_0 \in \{5, 11.4, 20, 30, 34, 40\} a^{-2}$ . V grafech jsou označeny reálné části rezonančních pólů <b>B</b> a <b>C</b> . . . . .	38
3.12	Průběhy účinného průřezu $\sigma_3(p)$ a $\sigma_{3,C}(p)$ po odebrání pólu <b>C</b> pro vybrané hodnoty potenciálu $U_0 \in \{30, 40, 50, 60, 70, 80\} a^{-2}$ . V grafech jsou označeny reálné části rezonančních pólů <b>B</b> a <b>C</b> . . . . .	39
3.13	Účinné průřezy $\sigma_3(p)$ , $\sigma_{3,B}(p)$ po odebrání pólu <b>B</b> , $\sigma_{3,C}(p)$ po odebrání pólu <b>C</b> a $\sigma_{3,BC}(p)$ po odebrání obou pólů pro hodnotu potenciálu $U_0 = 30 a^{-2}$ . V grafech jsou označeny reálné části rezonančních pólů <b>B</b> a <b>C</b> . . . . .	40
3.14	Průběhy účinného průřezu $\sigma_3(p)$ a $\sigma_{3,A}(p)$ po odebrání pólu <b>A</b> pro vybrané hodnoty potenciálu $U_0 \in \{5, 11.4, 20, 30, 50, 70\} a^{-2}$ . V grafech jsou označeny reálné části rezonančních pólů <b>A</b> a <b>B</b> . . . . .	41

# Seznam tabulek

1.1	Závislost polohy virtuálního, resp. vázaného pólu S-matice na potenciálu $U_0$ pro $l = 0$ . Tyto póly leží na imaginární ose hybnosti $p$ . . . . .	13
1.2	Závislost polohy komplexního rezonančního, resp. vázaného pólu S-matice na potenciálu $U_0$ pro $l = 3$ . Rezonanční póly leží v dolní polorovině komplexní hybnosti $p$ , vázané póly na kladné části imaginární osy hybnosti $p$ . V poslední řádce jsou rezonanční póly $\mathbf{B}$ a $\mathbf{C}$ (viz kapitola 3.2) pro potenciál $U_0 = 11.4 a^{-2}$ . Tento potenciál odpovídá grafům na obrázcích 1.1 a 1.2. . . . .	13
3.1	Výsledky výpočtu $\mathfrak{S}(p) [\frac{1}{a}]$ vázaných stavů z vlastních hodnot matice hamiltoniánu v B-spline bázi v závislosti na parametrech báze; horní hranici gridu $R$ a počtu uzlů $n + 1$ , resp. hustoty uzlů $h = \frac{n}{R}$ na jednotku délky $a$ , kterou je poloměr potenciálové jámy. Počítáno pro řád polynomů $k = 5$ , ekvidistantní sekvenci uzlů a redukovaný sférický potenciál $U = 17.9 a^{-2}$ , pro nějž jsem z rovnice (1.56) vypočetl referenční hodnotu $\mathfrak{S}(\mathbf{p}) = \mathbf{3,407863 a^{-1}}$ . Počet desetinných míst u každého čísla je dán počtem platných desetinných míst vytištěných Mathematicou. . . . .	23
3.2	Výsledky výpočtu $\mathfrak{S}(p) [\frac{1}{a}]$ vázaných stavů z vlastních hodnot matice hamiltoniánu v B-spline bázi v závislosti na řádu $k$ polynomů B-spline funkcí. Počítáno pro hranici gridu $R = 5 a$ , ekvidistantní sekvenci a hustotu uzlů $h = 16 \frac{1}{a}$ a redukovaný sférický potenciál $U = 17.9 \frac{1}{a^2}$ , pro nějž jsem z rovnice (1.56) výše vypočetl referenční hodnotu $\mathfrak{S}(\mathbf{p}) = \mathbf{3,407863 \frac{1}{a}}$ . . . . .	24
3.3	Energie $E_k$ vlastních stavů atomu vodíku, porovnání s výsledky z [7] a přesnými hodnotami $E_k^{exact} = -1/2k^2$ (hodnoty zaokrouhleny na šest desetinných míst). Absolutní chyba určení vlastních energií $E_k$ v mých výsledcích, resp. $E_k^{Bachau}$ z [7] vypočtená jako $\Delta E =  E_k - E_k^{exact} $ . Počítáno pro řád $k = 5$ , exponenciální sekvenci uzlů B-spline báze s parametrem $\gamma = 5$ , horní hranici gridu $R = 100 au$ a $n = 100$ . . . . .	24
3.4	Energie $E_k$ vlastních stavů atomu vodíku porovnané s přesnými hodnotami $E_k^{exact} = -1/2k^2$ a absolutní chyba energie $\Delta E =  E_k - E_k^{exact} $ . Počítáno pro řád $k = 5$ , exponenciální sekvenci uzlů báze s parametrem $\gamma = 5$ , horní hranici gridu $R = 200 au$ a $n = 200$ . . . . .	25