



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Marek Fürst

Rozptylové řešení stacionární Schrodingerovy rovnice - srovnání numerických metod

Ústav teoretické fyziky

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

Studijní program: Fyzika

Praha 2024

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Chtěl bych poděkovat svému vedoucímu docentu Čížkovi za jeho rady, konzultace, připomínky, poznámky a veškerou další pomoc, kterou mi poskytoval během vypracování mé bakalářské práce.

Název práce: Rozptylové řešení stacionární Schrodingerovy rovnice - srovnání numerických metod

Autor: Marek Fürst

ústav: Ústav teoretické fyziky

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

Abstrakt: Tato práce se zabývá rozptylovou úlohou v modelovém 2D potenciálu se symetrií danou grupou C_{3v} . Zvolený potenciál je odvozen od Henon-Heilesova potenciálu, který je v klasické fyzice známý výskytem deterministického chaosu. To se odráží v tom, že při řešení klasického rozptylu bylo pozorováno chaotické fraktální chování. Základem této práce, je ale kvantový případ. Pro jeho řešení byly použity dvě numerické metody. První numerická metoda je založena na rozvoji vlnové funkce do Fourierovy řady a numerickém řešení radiální rovnice na gridu. Druhou metodou je metoda R -matice. Poté byly ještě studovány některé fyzikální vlastnosti získaných řešení: účinný průřez a fázové sumy. Rovněž byly studovány rezonance vyskytující se v modelu. Na závěr byly porovnány výsledky získané oběma numerickými metodami.

Klíčová slova: rozptyl, grupa C_{3v} , numerické řešení rozvojem do Fourierovy řady, R -matice, rezonance

Title: Scattering solutions of stationary Schrodinger equation - comparison of numerical methods

Author: Marek Fürst

institute: Institute of theoretical physics

Supervisor: doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D., Institute of theoretical physics

Abstract: The topic of this thesis is scattering in the model 2D potential with symmetry given by the C_{3v} group. Used potential is based on the Henon-Heiles potential, which is known as a typical example of a potential with chaotic classical dynamics. This fact caused, that there were observed a chaotic (fractal) behaviour in the classical solution of the scattering problem. In spite of it, this thesis primary focuses on the quantum case. There were used two numerical methods for solving it. The first method was based on an expansion of the wave function in the Fourier series and solving the radial equations on grid. The second method was the R -matrix method. After that, there were studied some physical properties of the solutions: cross-section and the eigenphase sum. The resonances in the model were also studied. The results computed by both methods were compared at the end.

Keywords: scattering, group C_{3v} , numerical solution using Fourier series, R -matrix, resonances

Obsah

Úvod	6
1 Klasické chování	9
1.1 Klasické trajektorie a numerická metoda jejich počítání	9
1.2 Numerické experimenty a vlastnosti klasických rozptylových trajek- torí	11
1.2.1 Analýza chaotického chování na hranici oblastí	15
2 Metoda Fourierovy řady a numerického řešení radiální rovnice	19
2.1 Diskretizace a numerické řešení	22
2.2 Formulace pomocí parciálních vln	25
3 Metoda <i>R</i>-matice	29
3.1 Teoretický základ <i>R</i> -maticové metody	29
3.2 Aplikace <i>R</i> -maticového postupu na rozptyl v modelovém potenciálu	31
4 Fyzikální vlastnosti získaných řešení a srovnání metod	35
4.1 Účinný průřez	35
4.2 Fázová posunutí	37
4.3 Rezonance	41
4.4 Srovnání numerických metod	43
Závěr	45
Literatura	46

Úvod

Rozptylová úloha je jednou ze základních úloh (nejen) kvantové mechaniky. Tato práce se zabývá rozptylovou úlohou pro částici v modelovém potenciálu s tříčetnou osou symetrie, z pohledu teorie grup se jedná o potenciál, jehož symetrie odpovídají grupě C_{3v} . To znamená, že studovaný potenciál není sféricky symetrický. To má za následek například skutečnost, že nelze očekávat, že S -matice bude diagonální v bázi vlastních stavů momentu hybnosti. Tato skutečnost má za následek, že není realistické doufat v to, že by úlohu bylo možné vyřešit analyticky. Úloha je formulována a řešena ve 2 prostorových dimenzích, což v přírodě může odpovídat například rozptylu na povrchu nějakých pevných látek, případně se může jednat o rozptylu na nějaké velmi dlouhé lineární molekule, jako jsou třeba polymerové řetízky. Rozptyl ve dvou dimenzích si zaslouží pozornost také proto, že se jedná o mnohem méně prozkoumaný problém než rozptyl ve třech dimenzích.

Cílem této práce je rozptylovou úlohu pro zkoumaný modelový potenciál numericky vyřešit a zkoumat některé vybrané vlastnosti získaného numerického řešení. Co se týká numerického řešení, tak byly použity dvě různé numerické metody a to zaprvé rozvoj řešení do Fourierovy báze v úhlové proměnné spojený s řešením radiální rovnice numericky na gridu. Druhou použitou numerickou metodou byla metoda R -matice, která je založena na tom, že se problém uzavře do koule (ve 2D do kruhu) a předepíše se okrajová podmínka na hranici koule odpovídající tomu, že mimo koule se částice chová jako volná částice. Následně se zdiagonalizuje příslušný Hamiltonián ve vhodné zvolené bázi, čímž se získá odhad vlastních stavů systému a poté se vhodné řešení se nalezne pomocí napojování na řešení volné částice na hranici R -maticové koule.

Co se týče analýzy fyzikálních vlastností získaného řešení, tak jednou z klíčových veličin u rozptylových úloh je účinný průřez a to jak diferenciální účinný průřez v závislosti na úhlu odchýlení částice (respektive předané hybnosti) tak i totální (integrální) účinný průřez. Další významnou veličinou jsou v případě přístupu pomocí metody parciálních vln fázová posunutí. Zde je vhodné připomenout, že zkoumaný potenciál není sféricky symetrický, což má za následek to, že nelze jednoznačně přiřadit jednotlivá fázová posunutí k jednotlivým parciálním vlnám. Ukazuje se dokonce, že lepší význam než jednotlivá fázová posunutí má v případě potenciálu, který není sféricky symetrický, součet všech fázových posunutí zvaný fázová suma (anglicky eigenphase sum). S fázovými posunutími pak úzce souvisí časová zpoždění, jenže opět v důsledku toho, že potenciál není sféricky symetrický, je zavedení časových zpoždění o něco obtížnější. Existují dva přístupy jak zavést časová zpoždění pro potenciál bez sférické symetrie a to sice takzvané partial time delays a proper time delays. Podrobné zavedení obou přístupů, k časovým zpožděním a diskuze rozdílů mezi nimi lze nalézt (v 1D případě) v práci Saalmanna a Rosta [1].

Dalším fenoménem, který hraje v teorii rozptylu významnou roli je možný výskyt rezonancí, které souvisejí s případným výskytem metastabilních kvazivázaných stavů v potenciálu. Existuje mnoho metod hledání rezonancí jako například lze uvést využití toho, že rezonance odpovídají peakům v totálním účinném průřezu, nebo skutečnost, že na energii odpovídající rezonance dochází ke skoku o π u fázového posunutí. Jedním z cílů této práce je právě hledání rezonancí pro případ

zkoumaného modelového potenciálu a stanovení jejich fyzikálních parametrů jako je energetická šířka rezonancí.

Vzhledem k tomu, že zvolený potenciál se navíc vyznačoval chaotickou klasickou dynamikou, tak by mohlo být zajímavé rovněž i studovat klasickou rozptylovou úlohu. Pro ni lze očekávat přítomnost deterministického chaosu a tím pádem by se jednalo o chaotický klasický rozptyl. To je téma, které není příliš hluboce prozkoumáno, věnuje se mu pak například publikace [2]. Dále by pak mohlo být zajímavé diskutovat kvantově klasickou korespondenci, či zdali se klasický chaos odrazí v přítomnosti kvantového chaosu. Tímto projevem chaosu by možná mohlo být něco jako kvantové jizvy v případě rezonancí spojených s metastabilními stavy.

Potenciál

Zcela klíčovou roli v rozptylové úloze hraje potenciál na němž probíhá rozptyl. Cílem této práce je studovat chování v potenciálu s tříčetnou osou symetrie (grupa C_{3v}). Typickým příkladem potenciálu se symetrií danou právě grupou C_{3v} je Henon-Heilesův potenciál, který byl původně objeven v astrofyzice. Henon-Heilesův potenciál vypadá takto

$$V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \lambda \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right) + K, \quad (1)$$

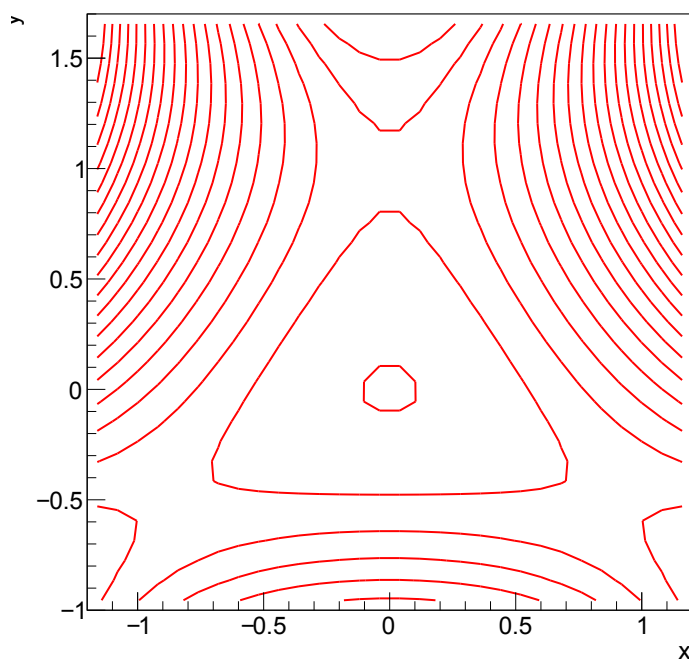
kde λ a K jsou nějaké reálné konstanty, přičemž je dobré poznamenat, že konstanta K nemá reálný fyzikální význam a odpovídá jen integrační konstantě. Potenciál závisí na dvou prostorových proměnných x a y , tudíž se celá práce bude zabývat dvourozměrným problémem. Henon-Heilesův potenciál je schematicky zobrazen na obrázku 1. Henon-Heilesův potenciál jde slovně popsat následovně: na třech přímkách, které tvoří rovnostranný trojúhelník je hodnota potenciálu konstantní, uvnitř trojúhelníku je údolí (nižší hodnota potenciálu než na trojúhelníku). Vně trojúhelníka si lze potenciál pomocí těchto přímek rozdělit na 6 oblastí, přičemž v oblastech hraničících s trojúhelníkem skrze celou stranu jsou kopce a ve zbylých třech oblastech hraničících s trojúhelníkem jen ve vrcholu jsou údolí. Henon-Heilesův potenciál je obecně známý tím, že klasická dynamika v něm vykazuje vysokou míru chaotického chování. Chaotická dynamika Henon-Heilesova potenciálu byla studována v mnoha publikacích, jako příklad je možné uvést učebnici [3]. Přítomnost deterministického chaosu u klasických trajektorií je rovněž jedním z důvodů, proč by mohlo být zajímavé studovat rozptyl v tomto potenciálu.

Takto zvolený potenciál má ale několik vad. První avšak spíše estetickou vadou je to, že se v něm vyskytuje více méně zbytečně aditivní konstanta K . Protože nejdůležitějším prvkem Henon-Heilesova potenciálu je trojúhelník na němž je potenciál konstantní, dává smysl provést volbu konstanty K tak aby hodnota potenciálu na trojúhelníku byla 0, neboli volit

$$K = -\frac{1}{6\lambda^2}. \quad (2)$$

Zadruhé vhodný potenciál pro rozptylovou úlohu musí být takový, že v asymptotice pro vzdálenost od středu (respektive rozptylového centra) jdoucí k nekonečnu potenciál vymizí nebo přesněji řečeno jde asymptoticky k nule. Tato vlastnost

Henon-Heilesuv potencial



Obrázek 1 Schématické zobrazení ekvipotenciál Henon-Heilesova potenciálu

odpovídá tomu, že rozptylový potenciál je v jistém smyslu krátkodosahový, neboli rozptylové centrum přestává ovlivňovat (jeho vliv se stává zanedbatelným) chování částice je-li částice od něj dosti daleko. Henon-Heilesův potenciál bohužel tuto vlastnost nespĺňuje, a proto musel být pro potřeby studia rozptylové úlohy vhodným způsobem upraven. Tato úprava by měla splňovat následující dvě vlastnosti: zaprvé zřídí vhodnou asymptotiku V jde k nule pro vzdálenost od středu (bodou $x = y = 0$) jdoucí k nekonečnu a zadruhé co nejméně ovlivní tvar potenciálu na okolí středu. Jako vhodné zhlazení potenciálu bylo zvoleno přenásobením potenciálu dvourozměrnou Gaussovou funkcí

$$f = e^{-\frac{x^2+y^2}{\sigma^2}}, \quad (3)$$

kde σ je parametr udávající rychlost zhlazení.

Výsledný potenciál má tím pádem tvar

$$V(x, y) = \left(\frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \lambda \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right) + K \right) e^{-\frac{x^2+y^2}{\sigma^2}}. \quad (4)$$

Toto je modelový potenciál, kterým se práce dále zabývá. Je vhodné poznamenat, že zhlazení nikterak nepoškodilo symetrie potenciálu a modelový potenciál má i nadále symetrie odpovídající grupě C_{3v} . Rovněž je dobré si uvědomit, že v důsledku zhlazení přenásobením funkcí f přestává být konstanta K pouhou aditivní konstantou a získává reálný fyzikální význam. Tím pádem již volba konstanty K není lhostejná a výsledky již závisí na konkrétní hodnotě K . V celé další práci je implicitně předpokládáno, že konstanta K je volena tak aby na trojúhelníku byla hodnota potenciálu nulová, neboli platí

$$K = -\frac{1}{6\lambda^2}. \quad (5)$$

1 Klasické chování

Nejprve byl studován klasický případ - rozptyl klasické částice v modelovém potenciálu. Důvodem proč je zajímavé se zabývat klasickým případem je to, že se potenciál v okolí středu chová dost podobně jako Henon-Heilesův potenciál, který je známý svým chaotickým chováním. Tato skutečnost naznačuje, že lze doufat v to, že i pro rozptylovou úlohu zde bude chování, které jde označit jako deterministický chaos. Dalším důvodem, proč studovat klasický případ, je to, že klasický svět je limitou kvantového světa pro případ $\hbar \rightarrow 0$, což odpovídá limitě $M \rightarrow \infty$. Díky tomuto může být přínosné diskutovat souvislost mezi klasickým a kvantovým případem, je-li hmotnost částice M dost vysoká, aby to dávalo smysl.

1.1 Klasické trajektorie a numerická metoda jejich počítání

Pro klasickou částici má smysl hovořit o klasických trajektoriích pohybu. Tyto trajektorie jde nejlépe nalézt v hamiltonovském formalismu řešením Hamiltonových kanonických rovnic

$$\frac{dq_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad (1.1)$$

$$\frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \quad (1.2)$$

kde j může být buďto x nebo y . Hamiltonián klasické částice o hmotnosti M v modelovém potenciálu vypadá takto

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2M} + V = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2M} + \left(\frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \lambda \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right) + K \right) e^{-\frac{x^2 + y^2}{\sigma^2}}. \quad (1.3)$$

Dosazením tohoto Hamiltoniánu do Hamiltonových kanonických rovnic vyjdou následující rovnice

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p_x}{M} \quad (1.4)$$

$$\frac{dy}{dt} = \frac{p_y}{M} \quad (1.5)$$

$$\frac{dp_x}{dt} = -e^{-\frac{x^2 + y^2}{\sigma^2}} \left(x + 2\lambda xy - \left(\frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \lambda \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right) + K \right) \frac{2x}{\sigma^2} \right) \quad (1.6)$$

$$\frac{dp_y}{dt} = -e^{-\frac{x^2 + y^2}{\sigma^2}} \left(y + \lambda x^2 - \lambda y^2 - \left(\frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \lambda \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right) + K \right) \frac{2y}{\sigma^2} \right). \quad (1.7)$$

Tyto rovnice je pak zapotřebí numericky vyřešit.

Ještě před řešením rovnic je dobré si uvědomit, že Hamiltonián nezávisí na čase a proto je hodnota Hamiltoniánu integrálem pohybu (zachovává se energie). Jelikož je Hamiltonián integrálem pohybu je obzvláště vhodné zvolit si pro řešení takovou numerickou metodu, která tuto skutečnost reflektuje. To znamená, že

vhodnou numerickou metodou je použití symplektického integrátoru, který je speciálně adaptovaný na řešení Hamiltonových rovnic. Pro řešení byl pak vybrán symplektický integrátor třetího řádu. Ten odpovídá následujícímu tříkrokovému postupu s časovým krokem h

$$q_j \left(t + \frac{h}{3} \right) = q_j(t) + c_1 \frac{\partial H}{\partial p_j}(t) h \quad (1.8)$$

$$p_j \left(t + \frac{h}{3} \right) = p_j(t) - d_1 \frac{\partial H}{\partial q_j}(t) h \quad (1.9)$$

$$q_j \left(t + \frac{2h}{3} \right) = q_j \left(t + \frac{h}{3} \right) + c_2 \frac{\partial H}{\partial p_j} \left(t + \frac{h}{3} \right) h \quad (1.10)$$

$$p_j \left(t + \frac{2h}{3} \right) = p_j \left(t + \frac{h}{3} \right) - d_2 \frac{\partial H}{\partial q_j} \left(t + \frac{h}{3} \right) h \quad (1.11)$$

$$q_j(t+h) = q_j \left(t + \frac{2h}{3} \right) + c_3 \frac{\partial H}{\partial p_j} \left(t + \frac{2h}{3} \right) h \quad (1.12)$$

$$p_j(t+h) = p_j \left(t + \frac{2h}{3} \right) - d_3 \frac{\partial H}{\partial q_j} \left(t + \frac{2h}{3} \right) h, \quad (1.13)$$

kam se za Hamiltonián dosadí hamiltonián zkoumaného systému z rovnice 1.3. V těchto rovnicích se vyskytuje 6 konstantních koeficientů $c_1, c_2, c_3, d_1, d_2, d_3$, které musí být vhodně zvoleny, aby se skutečně jednalo o symplektický integrátor. Jako první se symplektickým integrátorem třetího řádu zabýval Ruth ve své práci [4], v níž zveřejnil tento tříkrokový postup. V této práci rovněž objevil pravidla, jak volit příslušné koeficienty c a d aby se skutečně jednalo o symplektický integrátor třetího řádu. Jednu z možných voleb koeficientů c a d uvádí přímo Ruth ve své již zmíněné práci [4] a jedná se o případ

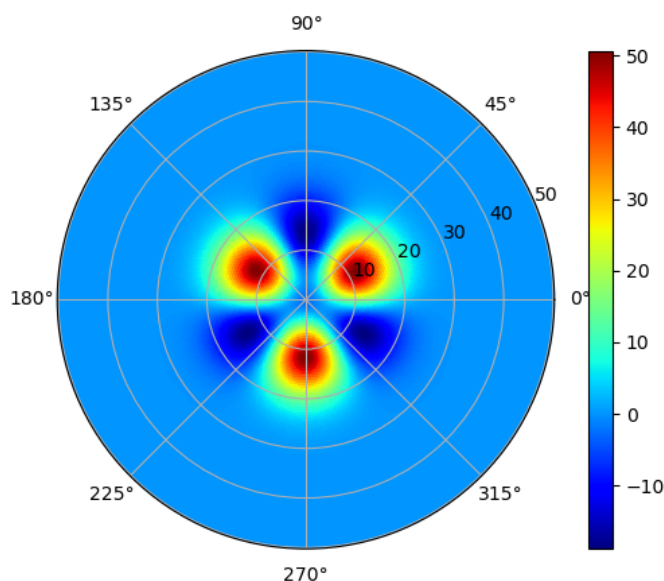
$$c_1 = \frac{2}{3} \quad c_2 = -\frac{2}{3} \quad c_3 = 1 \quad d_1 = \frac{7}{24} \quad d_2 = \frac{3}{4} \quad d_3 = -\frac{1}{24}. \quad (1.14)$$

Tato volba koeficientů c a d byla použita i v této práci.

Poslední otázkou pro numerické řešení zůstává volba počáteční podmínky, která byla provedena tak, aby to odpovídalo rozptylové úloze. To znamená, že jako počáteční podmínka byla volena částice, jejíž poloha byla dosti daleko od středu potenciálu, tak aby potenciál v místě počáteční polohy částice již byl zcela zanedbatelný. Je vhodné volit počáteční polohu částice tak, aby částice přilétala směrem k rozptylovému centru přes "údolí" a nikoliv přes "kopec", neboť v opačném případě by se částice pouze odrazila od kopce a už by se nedostala k rozptylovému centru a dovnitř trojúhelníku, kde lze očekávat zajímavé a možná dokonce i chaotické chování. Z tohoto důvodu byla vzhledem k tvaru potenciálu zvolena možnost, že částice přilétá seshora (z poloh s vysokou kladnou hodnotou souřadnice y) a na počátku má zápornou y -ovou komponentu hybnosti. Pro zjednodušení byly uvažovány jen případy, kdy je počáteční x -ová komponenta hybnosti nulová. Počáteční hodnota souřadnice x byla volena okolo hodnoty 0, která navíc splňuje podmínku, že rozptylovaná částice projde do oblasti trojúhelníku.

parametr	hodnota
λ	1
M	1
σ	10
$p_x(t = 0)$	0
$y(t = 0)$	49

Tabulka 1.1 Použité hodnoty parametrů pro simulace klasických trajektorií. Potenciál odpovídající těmto parametrům je na obrázku 1.1.



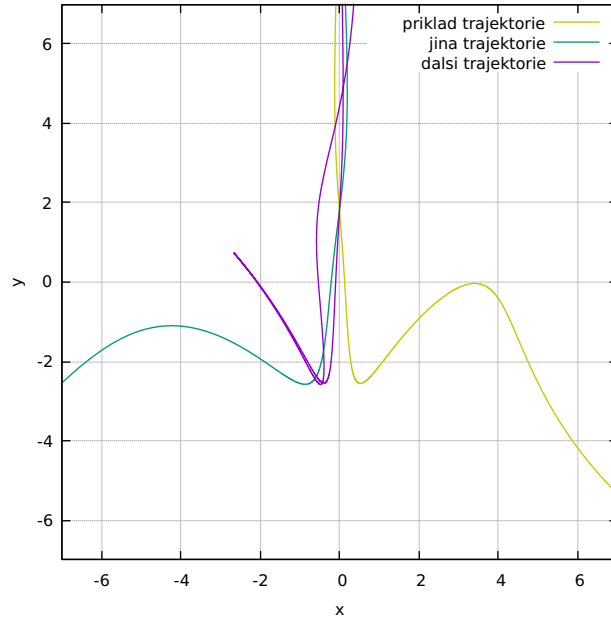
Obrázek 1.1 Potenciál odpovídající parametrům v tabulce 1.1.

1.2 Numerické experimenty a vlastnosti klasických rozptylových trajektorií

Pomocí této metody byla provedena série numerických experimentů. Parametry modelu byly zvoleny tak jak je uvedeno v tabulce 1.1. Časový krok se kterým pracoval numerický řešič byl zvolen jako $h = 0.001$. Jako alespoň přibližná kontrola bylo ověřeno, že se v průběhu výpočtu zachovává energie. Samotný výpočet probíhal v 8bytové přesnosti, nicméně pro zjednodušení a úsporu paměti byly vypočtené hodnoty souřadnic a hybností v průběhu simulace ukládány do souboru se 4bytovou přesností. Energie byla kontrolně počítána z těchto uložených hodnot a v rámci této 4bytové přesnosti nebyla pozorována žádná odchylka. Jakožto koncová podmínka simulace byla zvolena situace, kdy je poprvé splněna následující podmínka

$$x^2 + y^2 > 50^2 \quad (1.15)$$

odpovídající tomu, že částice je již velmi vzdálená od rozptylového centra, takže potenciál je už zcela zanedbatelný. Zbývající dva parametry $x(0)$ a $p_y(0)$ byly v průběhu numerických experimentů měněny a byla zkoumána závislost výsledného chování na konkrétní volbě těchto dvou parametrů. Typické trajektorie jsou pak k



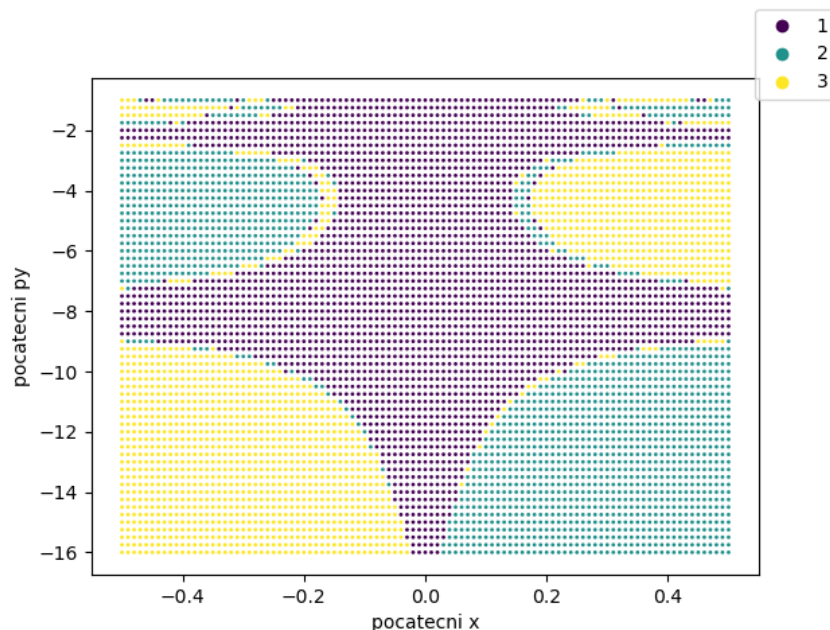
Obrázek 1.2 Zobrazení klasické trajektorie v okolí rozptylového centra. Počáteční parametry simulovaných trajektorií byly $x(0) = 0.23$ u žluté, $x(0) = -0.37$ u zelené a $x(0) = 0.173$ u fialové a pro všechny platilo, že $p_y(0) = -4$. Částice přilétá shora a odlétá doprava dolů. Jedná se pouze o detail trajektorie v okolí rozptylového centra. Mimo tento detail trajektorie se trajektorie pohybuje příslušnými "údolími" potenciálu, aniž by vykazovala nějaké divočejší chování.

vidění na obrázku 1.2. Přesněji řečeno je na obrázku vidět jen detail trajektorie v okolí rozptylového centra, přičemž dále od rozptylového centra se trajektorie už nechová příliš divoce, tj. moc se neliší od přímky, což už není tak zajímavé.

Klíčovou roli v teorii rozptylu ale nehrají konkrétní trajektorie v blízkosti rozptylového centra. V teorii rozptylu je nejdůležitější otázkou kterým směrem bude částice vylétávat po interakci s potenciálem v okolí rozptylového centra. V případě modelového potenciálu může klasická částice vylétávat pouze jedním ze tří "údolí" (nemá dostatečnou energii aby vylétávala přes "kopec"). Dává proto smysl ptát se na otázku kterým údolím bude částice vylétávat pro zvolené počáteční hodnoty $x(0)$ a $p_y(0)$. Pro účely analýzy byla jednotlivá "údolí" očíslována dle následujícího klíče: číslo 1 odpovídá údolí nahoře (vysoké kladné hodnoty y , x okolo nuly), číslo 2 odpovídá údolí vlevo dole (x a y záporná) a konečně číslo 3 odpovídá údolí vpravo dole (x kladná, y záporná). Například částice pohybující se po trajektorii na obrázku 1.2 nalétává k rozptylovému centru údolím 1 a odlétává pryč údolím 3.

Pro různé počáteční hodnoty $x(0)$ a $p_y(0)$ byly pomocí symplektického integrátoru třetího řádu, popsáném v předchozí podkapitole, simulovány klasické trajektorie a u každé trajektorie bylo vyhodnoceno jakým "údolím" částice vylétává. Z výsledků této analýzy byla sestavena mapa, popisující z jakých oblastí v prostoru počátečních podmínek, klasická částice vylétává kterým "údolím". Tuto mapu si lze prohlédnout na obrázku 1.3.

Na této mapě si lze všimnout dvou zajímavých věcí. Zaprvé na místech kde se stýkají dvě oblasti odpovídající dvěma různým údolím jimiž částice vylétává se tvoří komplikovanější struktura vyznačující se tím, že se zde tvoří menší



Obrázek 1.3 Mapa popisující jakým "údolím" klasická částice vylétává po interakci s potenciálem v okolí rozptylového centra v závislosti na počátečních hodnotách $x(0)$ a $p_y(0)$. Číslo 1 odpovídá údolí nahoře (návrat zpět), číslo 2 údolí vlevo dole (odchýlení o úhel přibližně 300° (alias -60°) v kladném směru otáčení od původního směru letu částice), číslo 3 odpovídá údolí vpravo dole (odchýlení o úhel přibližně 60° v kladném směru otáčení od původního směru).

oblasti odpovídající jiným údolím. Takovéto chování nápaditě připomíná chování některých fraktálních objektů jako je Newtonův fraktál, což je určitě dosti zajímavé chování na to, aby bylo hlouběji studováno. Hlubšímu studiu oblastí dotyku dvou oblastí se věnuje příští podkapitola, která se zabývá otázkou, zdali se skutečně jedná o fraktální chování. Zadruhé pro jisté rozsahy počátečních hybností např. okolo hodnoty $p_y(0) = -8$ částice vždy vylétává údolím 1 neboli se vrací zpět stejným údolím jako nalétávala. Tvoří se zde jisté zakázané hybnostní pásy pro něž platí, že je-li $p_y(0)$ v tomto pásu tak se částice vždy vrací zpět nezávisle na volbě $x(0)$. Mimo tyto pásy platí, že pro hodnoty $x(0)$ dostatečně se lišící od nuly se částice odchyluje a vylétává buďto údolím 2 nebo údolím 3. Je zajímavé si všimnout, že vždycky při přechodu $p_y(0)$ přes zakázaný pás se prohodí oblasti odpovídající údolím 2 a 3. Například pro dost velká kladná $x(0)$ platí, že pro velká $p_y(0)$ částice vylétává údolím 2. Po přechodu prvního zakázaného pásu okolo $p_y(0) = -8$ částice s kladným $x(0)$ vylétává údolím 3 (došlo ke změně z 2 na 3). Po přechodu druhého zakázaného pásu okolo $p_y(0) = -2$ částice s kladným $x(0)$ vylétává údolím 2 (došlo zas ke změně tentokrát z 3 na 2).

Vysvětlení vzniku zakázaných pásů je následující. Trajektorie částice začíná v bodě s velmi velkou kladnou hodnotou souřadnice y a s malou avšak obecně nenulovou hodnotou souřadnice x . Částice pak po relativně dlouhý čas putuje skrze údolí číslo 1 modelového potenciálu než dorazí do středu k rozptylovému centru. Potenciál je symetrický vůči osové souměrnosti dle osy y a pro kladná y se (tam kde je údolí 1) nachází minimum potenciálu na křivce konstantního y právě na ose y , tj. pro $x = 0$. To znamená, že lze provést následující rozvoj potenciálu

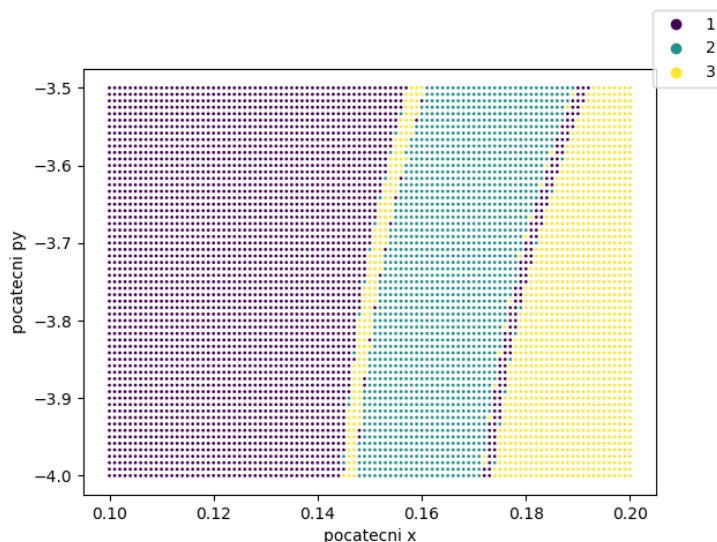
kolem roviny $x = 0$

$$\begin{aligned}
 V(x, y) &= \left(\frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \lambda \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right) + K \right) e^{-\frac{x^2 + y^2}{\sigma^2}} = \\
 &= \left(\frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \lambda \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right) + K \right) e^{-\frac{y^2}{\sigma^2}} \left(1 - \frac{x^2}{2\sigma^2} \right) + \mathcal{O}(x^4) = \\
 &= \left(\frac{1}{2}y^2 - \lambda \frac{y^3}{3} + K \right) e^{-\frac{y^2}{\sigma^2}} + \left(\frac{1}{2} - \frac{y^2}{4\sigma^2} + \lambda y + \lambda \frac{y^3}{6\sigma^2} - K \frac{1}{2\sigma^2} \right) e^{-\frac{y^2}{\sigma^2}} x^2 + \mathcal{O}(x^4).
 \end{aligned} \tag{1.16}$$

Z tohoto rozvoje vyplývá, že se potenciál v okolí osy $x = 0$ chová v proměnné x jako harmonický oscilátor, jehož vlastní frekvence však závisí na konkrétní hodnotě souřadnice y . Jelikož je to harmonický oscilátor v každém bodě, tak s přesností odpovídající přesnosti LHO aproximace frekvence nezávisí na velikosti výchylky. Z toho jde odhadnout, že chování během nalétávání částice k rozptylovému centru údolím číslo 1 je následující. Dominantní roli hraje pohyb ve směru osy y , s nímž je spojena velká záporná hybnost p_y . Krom tohoto pohybu zde budou ještě oscilace kolem osy y , při němž hodnoty souřadnice x oscilují kolem nuly. Takovéto trajektorie nalétávání odpovídající přesně představě pohybu po přímce porušené drobnými oscilacemi okolo osy $x = 0$ byly skutečně v simulacích pozorovány. Je dobré poznamenat, že pro ne příliš velké výchylky by díky LHO přiblížení v potenciálu charakter oscilací neměl záviset na počáteční hodnotě $x(0)$ jinak než přenásobením polohy částice x v každém bodě vhodnou konstantou. Takovéto chování bylo u simulovaných trajektorií rovněž pozorováno.

Tyto oscilace pak hrají klíčovou roli při vzniku zakázaných pásů. Zde platí následující úvaha, čím větší je počáteční y -ová komponenta hybnosti (v absolutní hodnotě) tím rychleji částice proletí během nalétávání údolím 1 a tím méně času budou trvat oscilace, takže poloha souřadnice x do níž se posune částice během nalétávání výrazně závisí na počáteční hybnosti $p_y(0)$. To znamená, že zde budou počáteční hybnosti $p_y(0)$ pro něž se poloha x částice při vstupu do oblasti trojúhelníku dostane díky oscilacím během nalétávání velmi blízko hodnotě $x = 0$, tj. dojde k oscilaci o čtvrt periody, tři čtvrtě periody atd. Ze simulací pak vycházelo, že těmto případům odpovídají zakázané pásy. Dá se to kvalitativně nahlédnout takto: pokud částice nalétává téměř po ose $x = 0$ do oblasti trojúhelníka, pak vyrazí téměř přímo proti protějšímu kopci. Vzhledem k tomu, že proti němu vyrazí téměř kolmo, tak se od něj odrazí téměř přesně zpět a tím pádem se vrací zpět opět údolím 1 a tím pádem dochází k návratu zpět stejným údolím. Zakázané pásy tím pádem odpovídají takovým počátečním hybnostem pro něž se poloha x částice po průchodu údolím 1 během nalétávání dostane díky oscilacím blízko nule.

Tyto oscilace umí kvalitativně vysvětlit i prohození oblastí odpovídajících údolím 2 a 3 při přechodu přes zakázaný pás. Vysvětlení je prosté, při průchodu přes zakázaný pás se změní souřadnice x částice při vstupu do oblasti trojúhelníka ze záporné na kladnou nebo naopak. Odpovídá to tomu, že proběhne přibližně o půl periody oscilací více. Částice díky tomu nalétává do oblasti trojúhelníku s výchylkou od osy $x = 0$ mířící opačným směrem což způsobí, že se ve výsledku odchýlí druhým z odchýlených stupňů, tj. dojde k odchýlení o úhel cca 120° v opačném směru. Toto kvalitativní vysvětlení skutečně odpovídá chování které bylo reálně pozorováno u simulovaných trajektorií.



Obrázek 1.4 Detail mapy popisující jakým "údolím" klasická částice vylétává po interakci s potenciálem v okolí rozptylového centra v závislosti na počátečních hodnotách $x(0)$ a $p_y(0)$. Detail je v oblasti rozhraní oblastí odpovídajících údolím číslo 1 a 3. Číslování oblastí je stejné jako u obrázku 1.3

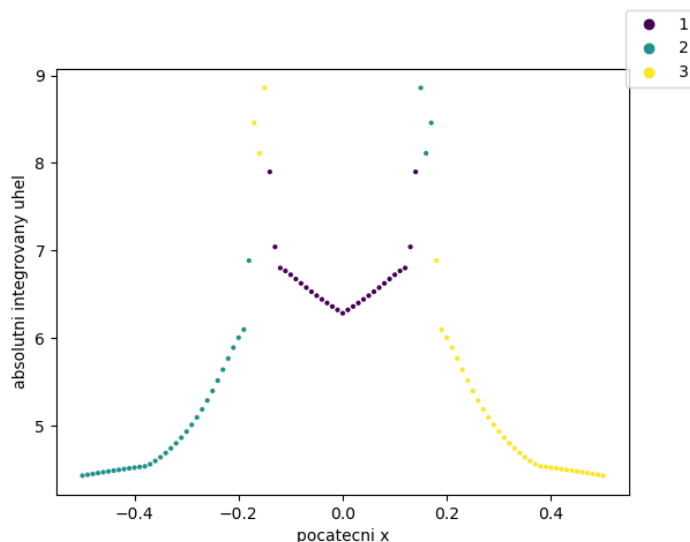
1.2.1 Analýza chaotického chování na hranici oblastí

Na obrázku 1.3 si lze všimnout zajímavého chování na hranici jednotlivých oblastí odpovídajícím rozptylu do rozdílných příslušných oblastí. Lze si všimnout, že zde vzniká úzká pásová oblast odpovídající třetímu údolí. Možná lépe je to vidět na detailu z té velké mapy, který je zachycen na obrázku 1.4. Na tomto detailu je vidět, že původně úzký pás odpovídající oblasti 2 je v důsledku přiblížení již výrazně širší. Zároveň se na jeho rozhraní s oblastí 1 se nachází pás odpovídající oblasti 3 a na rozhraní s oblastí 3 pás oblasti 1. Zde lze tušit zárodek vzniku fraktální struktury pásů ne zcela nepodobné Newtonovu fraktálu.

Složitá až fraktální struktura pásů by nebyla až tak překvapivá, neboť modelový potenciál je ve středu velmi podobný Henon-Heilesovu potenciálu, který je obecně známý jako systém v němž se vyskytuje deterministický chaos. Lze zformulovat následující hypotézu: složitost pásové struktury je dána tím, že pro velmi přesně zvolené počáteční podmínky bude trajektorie pohybu částice velmi blízká některé z periodických orbit v Henon-Heilesově potenciálu a částice bude tím pádem velmi dlouho obíhat v oblasti trojúhelníku a jeho bezprostředního okolí, než nějakým údolím tuto oblast opustí a bude zaevidována jako rozptýlená částice. Touto myšlenka se objevuje již v článku [2]. Tento článek rovněž posloužil jako inspirace k dalšímu studiu chaosu a fraktální struktury mapy oblastí příslušejících rozptylu do jednotlivých údolím.

V již zmíněném článku [2] je jakožto vhodná veličina pro test hypotézy týkající se dlouhého obíhání v okolí středu potenciálu voleno časové zpoždění. V této práci byla namísto časového zpoždění volena veličina nazvaná absolutní integrovaný úhel. Absolutní integrovaný úhel je definován následujícím způsobem. V prostoru popsaném kartézskými souřadnicemi x , y jsou zavedeny polární souřadnice r , ϑ . S úhlovou souřadnicí lze asociovat úhlová rychlost

$$\omega = \frac{d\vartheta}{dt} \quad (1.17)$$



Obrázek 1.5 Závislost absolutního integrovaného úhlu na počáteční souřadnici $x(0)$. Počáteční hybnost fixována jako $p_y(0) = -4$. V obrázku je rovněž barevně poznačeno do kterého údolí se částice rozptyluje, přičemž čísla údolí a jim odpovídající barvy jsou stejné jako u obrázku 1.3

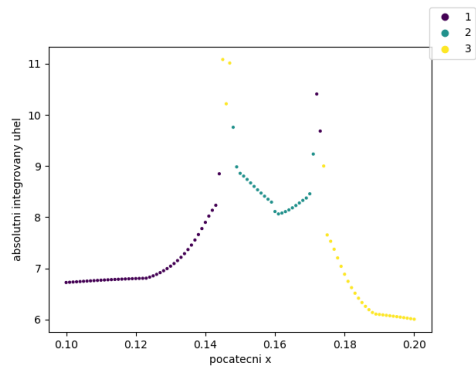
a absolutní integrovaný úhel ϕ je definován takto

$$\phi = \int_0^{t_{konec\ simulace}} |\omega| dt = \phi = \int_0^{t_{konec\ simulace}} \left| \frac{d\vartheta}{dt} \right| dt. \quad (1.18)$$

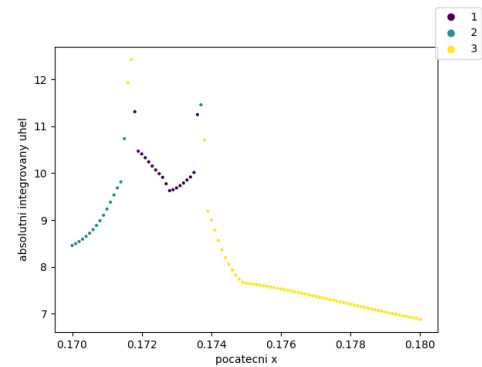
Takto definovaný integrovaný absolutní úhel dává dobrý odhad toho jak dlouho se částice pohybovala v okolí středu potenciálu.

Pro zafixovanou hodnotu počáteční y-ové komponenty hybnosti $p_y(0) = -4$ byla následně zkoumána závislost absolutního integrovaného úhlu na počáteční souřadnici $x(0)$. Výsledky této analýzy jsou k vidění na obrázku 1.5. Na tomto obrázku si lze všimnout, že pásy na rozhraní dvou oblastí odpovídají lokálním maximům absolutního integrovaného úhlu. Opět je zajímavé se podívat na detail těch pásů, které vznikají na rozhraní dvou oblastí. Tento detail a následně detail nově objeveného pásu na hranici původního pásu a jedné z oblastí a ještě dva hlubší detaily jsou k vidění na obrázku 1.6. Na tomto obrázku si lze všimnout, že maximum integrovaného absolutního úhlu vždy koresponduje s jinak zbarvenými body a tím pádem to odpovídá tomu, že se na rozhraní objevuje nový pás. To, že pásy odpovídají velmi ostrým maximům absolutního integrovaného úhlu je v souladu s hypotézou, že ty pásy odpovídají oblastem kdy se částice v potenciálu déle pohybuje kolem středu. Podobně byly analyzovány i vyšší úrovně přiblížení a to až do 9. úrovně přiblížení a ve všech studovaných úrovních přiblížení bylo pozorováno, že pásy na rozhraní dvou oblastí korespondují s maximy absolutního integrovaného úhlu. Rovněž byla ve všech studovaných úrovních přiblížení pozorována téměř stejná soběpodobná struktura jako lze vidět u prvních čtyř přiblížení na obrázku 1.6. To je pádným argumentem pro domnívat se, že se jedná o soběpodobný fraktální obrazec.

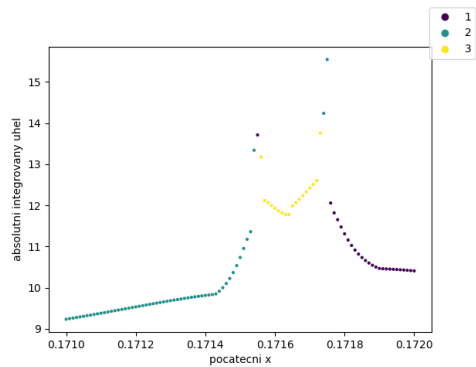
Ještě je zajímavé podívat se jak vypadá v okolí středu potenciálu trajektorie z pásu, který se stane běžnou oblastí při 9 úrovni přiblížení, tj. objeví při 8. úrovni přiblížení. Takováto trajektorie je zachycena na obrázku 1.7. Je vhodné



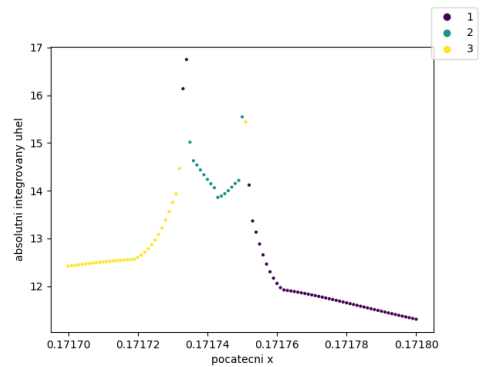
(a) 1. úroveň přiblížení



(b) 2. úroveň přiblížení

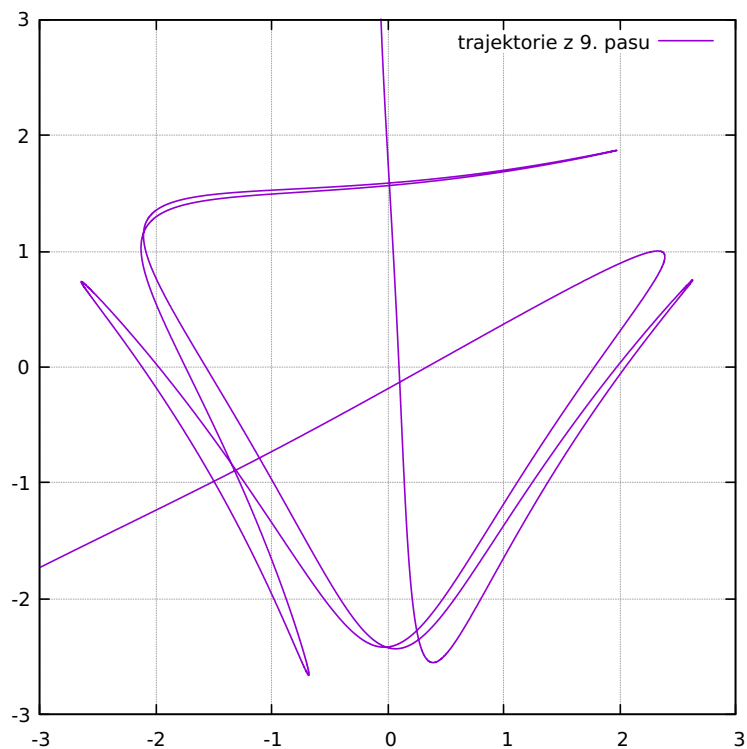


(c) 3. úroveň přiblížení



(d) 4. úroveň přiblížení

Obrázek 1.6 Detaily pásů na rozhraní dvou oblastí rozptylu do dvou různých údolí. Zobrazeny první čtyři úrovně přiblížení. Vždy zobrazena závislost absolutního integrovaného úhlu na počáteční hodnotě $x(0)$. Barvy a čísla oblastí odpovídají obrázku 1.3. Lze si všimnout toho, že závislost vypadá ve všech úrovních zvětšení téměř stejná - dává proto smysl hovořit o soběpodobnosti.



Obrázek 1.7 Trajektorie částice z pásu, který se stane běžnou oblastí při 9. úrovni přiblížení.

tuto trajektorii srovnat s běžnou trajektorií ležící v běžné oblasti a nikoliv v pásu na rozhraní, kterou lze nalézt na obrázku 1.2. Lze si všimnout, že trajektorie z pásu 9. úrovně přiblížení se mnohem déle pohybuje v okolí středu potenciálu.

Deterministickým chaosem v rozptylové úloze pro klasickou částici se hlouběji zabývá přehledový článek [2]. Naše práce zkoumá pouze základní charakter chaotického chování v modelovém potenciálu a cílem této podkapitoly bylo pouze ověřit zda se skutečně jedná o případ výskytu deterministického chaosu v rozptylové úloze. To se podařilo naplnit, neboť vše nasvědčuje tomu, že mapa popisující do kterého údolí se částice rozptyluje v závislosti na počátečních podmínkách $x(0)$ a $p_y(0)$ má fraktální strukturu.

2 Metoda Fourierovy řady a numerického řešení radiální rovnice

Kvantově mechanický přístup k rozptylové úloze je poněkud odlišný od klasického přístupu. Prvním krokem v kvantově mechanickém přístupu k rozptylu je převedení dynamické rozptylové úlohy na řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\psi = E\psi. \quad (2.1)$$

Asymptotika této vlnové funkce ψ pro vzdálenost od rozptylového centra r jdoucí k nekonečnu má tvar součtu rovinné a sférické (ve 2D případě kruhové) vlny, jak je uvedeno (přímo ve 2D případě) v knize Haralda Friedricha [5]

$$\psi(r, \vartheta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{-iky} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}, \quad (2.2)$$

kde r a ϑ jsou polární souřadnice a k je vlnové číslo související s energií dle následujícího vztahu

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2M}. \quad (2.3)$$

Symbol $f(\vartheta)$ značí libovolnou neznámou funkci úhlu ϑ . Rovněž byla provedena volba, že částice nalétává seshora jako u klasického případu, což se odráží v tom, že rovinná vlna má tvar e^{-iky} . Zmíněné převedení rozptylové úlohy na řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice s touto danou asymptotikou je standartním postupem v teorii rozptylu a je diskutováno např. v [6].

Cílem je tím pádem numericky vyřešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici s okrajovou podmínkou odpovídající tomu, že řešení půjde pro dost velké r napojit na asymptotický tvar. Jako výhodné se ukazuje použít následující ansatz pro vlnovou funkci

$$\psi(r, \vartheta) = e^{-iky} + \psi_{sc}(r, \vartheta), \quad (2.4)$$

čímž se problém převede na problém nalezení ψ_{sc} , které má mít asymptotiku

$$\psi_{sc}(r, \vartheta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}. \quad (2.5)$$

Po dosazením tohoto ansatzu do bezčasové Schrödingerovy rovnice vyjde

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(r, \vartheta) \right) (e^{-iky} + \psi_{sc}(r, \vartheta)) = E (e^{-iky} + \psi_{sc}(r, \vartheta)), \quad (2.6)$$

přičemž člen odpovídající operátoru kinetické energie působícímu na rovinnou vlnu je stejný jako E krát rovinná vlna. Po odečtení těchto dvou členů se předchozí rovnice zjednoduší na tvar

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} \right) + V(r, \vartheta) - E \right) \psi_{sc}(r, \vartheta) = -V(r, \vartheta) e^{-iky}, \quad (2.7)$$

kam bylo rovněž za Laplaceův operátor dosazeno jeho vyjádření v polárních souřadnicích.

Tuto parciální diferenciální rovnici je pak nutné vyřešit. Jednou z možností jak dále postupovat je rozvinout funkci ψ_{sc} do Fourierovy řady v proměnné ϑ . Příslušná Fourierova řada vypadá takto

$$\psi_{sc}(r, \vartheta) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \psi_m(r) e^{im\vartheta}, \quad (2.8)$$

kde funkce $\psi_m(r)$ hrají roli Fourierových koeficientů, které ale obecně závisí na radiální souřadnici r . Dosazením ψ_{sc} ve tvaru Fourierovy řady rovnice 2.7 přejde do tvaru

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} \right) + V(r, \vartheta) - E \right) \psi_m(r) e^{im\vartheta} = -V(r, \vartheta) e^{-iky}. \quad (2.9)$$

Člen s m^2 vznikl provedením druhé derivace podle ϑ . Dalším krokem je aplikování projekce rovnice na báзовou funkci $e^{im'\vartheta}$. Po jejím provedení vyjde

$$\begin{aligned} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m^2}{r^2} \right) - E \right) \psi_m(r) \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\vartheta} d\vartheta + \\ + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} V(r, \vartheta) e^{i(m-m')\vartheta} d\vartheta \psi_m(r) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} V(r, \vartheta) e^{-iky} e^{-im'\vartheta} d\vartheta. \end{aligned} \quad (2.10)$$

To lze zjednodušit pomocí následující identity

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\vartheta} d\vartheta = \delta_{m,m'} \quad (2.11)$$

a převodu kartézské souřadnice y do polárních souřadnic na tvar

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m'^2}{r^2} \right) - E \right) \psi_{m'}(r) + \\ + \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} V(r, \vartheta) e^{i(m-m')\vartheta} d\vartheta \psi_m(r) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} V(r, \vartheta) e^{-ikr \sin \vartheta} e^{-im'\vartheta} d\vartheta. \end{aligned} \quad (2.12)$$

To je soustava nekonečně mnoha obyčejných diferenciálních rovnic pro nekonečně mnoho neznámých funkcí $\psi_{m'}$ které jsou spolu navzájem provázané skrze člen s potenciálem na levé straně.

Jako další krok dává smysl dosadit konkrétní tvar modelového potenciálu a vypočítat jak vypadá ten člen s potenciálem na levé straně. Modelový potenciál vypadá takto

$$V(x, y) = \left(\frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \lambda \left(x^2 y - \frac{y^3}{3} \right) + K \right) e^{-\frac{x^2 + y^2}{\sigma^2}}. \quad (2.13)$$

Po převodu do polárních souřadnic bude mít tvar

$$\begin{aligned} V(r, \vartheta) &= \left(\frac{1}{2} r^2 + \lambda \frac{r^3 \sin(3\vartheta)}{3} + K \right) e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} = \\ &= \left(\frac{1}{2} r^2 + \lambda \frac{r^3}{6i} \left(e^{3i\vartheta} - e^{-3i\vartheta} \right) + K \right) e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Maticový element ve členu s potenciálem na levé straně rovnice 2.12 bude pak vypadat následovně

$$\begin{aligned} & \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} V(r, \vartheta) e^{i(m-m')\vartheta} d\vartheta = \\ & = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{1}{2}r^2 + \lambda \frac{r^3}{6i} (e^{3i\vartheta} - e^{-3i\vartheta}) + K \right) e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} e^{i(m-m')\vartheta} d\vartheta = \quad (2.15) \\ & = \left(\frac{1}{2}r^2 + K \right) e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} \delta_{m m'} + \lambda \frac{r^3}{6i} e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} (\delta_{m-m'-3} - \delta_{m-m'+3}). \end{aligned}$$

Dosazením tohoto vyjádření maticového elementu do rovnice 2.12 vyjde soustava

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{m'^2}{r^2} \right) - E \right) \psi_{m'}(r) + \left(\frac{1}{2}r^2 + K \right) e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} \psi_{m'}(r) + \\ & + \lambda \frac{r^3}{6i} e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} (\psi_{m'-3}(r) - \psi_{m'+3}(r)) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} V(r, \vartheta) e^{-ikr \sin \vartheta} e^{-im'\vartheta} d\vartheta. \quad (2.16) \end{aligned}$$

Toto je soustava nekonečně mnoha lineárních obyčejných diferenciálních rovnic s pravou stranou pro nekonečně mnoho neznámých funkcí $\psi_{m'}$. Rovnice jsou navzájem provázané skrze člen s $\psi_{m'+3}$ a člen s $\psi_{m'-3}$. Lze si nicméně všimnout, že se soustava rozpadá na tři podsoustavy a to sice na podsoustavu kde má m' zbytek po dělení 3 roven 0, na podsoustavu se zbytkem po dělení třemi 1 a na podsoustavu se zbytkem 2. Tyto tři podsoustavy už spolu nejsou nijak navzájem provázané, neboť veškeré vazby mezi rovnicemi závisejí jen na členech s $\psi_{m'+3}$ a $\psi_{m'-3}$ a tudíž vazby zůstávají jen uvnitř dané podsoustavy. Tato skutečnost, že se soustava rozpadá na tři podsoustavy podle zbytku po dělení m' třemi, má svou příčinu v tom, že potenciál má symetrie odpovídající grupě C_{3v} .

Ještě je nutné dodat příslušné okrajové podmínky pro funkce $\psi_{m'}$. Jako první budou popsány okrajové podmínky pro $r = 0$. Ze spojitosti vlnové funkce plyne, že pro všechna m' kromě speciálního případu $m' = 0$ musí platit Dirichletova podmínka

$$\psi_{m'}(0) = 0. \quad (2.17)$$

Pro speciální případ $m' = 0$ pak díky spojitosti parciálních derivací vlnové funkce musí platit Neumannova podmínka

$$\psi'_0 = 0. \quad (2.18)$$

Poněkud náročnější je případ $r \rightarrow \infty$. Nejjednodušší variantou by bylo pouze předepsat, že musí platit asymptotika

$$\psi_{sc}(r, \vartheta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}, \quad (2.19)$$

což po rozvoji do Fourierovy řady a příslušném zprojektování dává

$$\psi_{m'}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f_{m'} \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}, \quad (2.20)$$

kde $f_{m'}$ jsou Fourierovy koeficienty rozvoje neznámé funkce f do Fourierovy řady. Lepší možností je uvědomit si, že zkoumaný modelový potenciál jde díky

Gaussovskému zhlazovacímu členu považovat za dostatečně krátkodosahový. To znamená, že stačí nalézt vzdálenost r_{max} v níž bude potenciál možno považovat za zcela zanedbatelný a v této vzdálenosti požadovat napojení na řešení volné částice. Řešením volné částice ve 2D jsou Besselovy a Neumannovy funkce, případně Hankelovy funkce. Vhodným řešením volné částice, které se v asymptotice chová právě jako $\frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}$ je Hankelova funkce $H^{(1)}$, jak uvádí např. [5]. Okrajová podmínka pak vyžaduje možnost navázání vlnové funkce na řešení volné částice, tj. je třeba splnit dvě podmínky: podmínku pro hodnotu a podmínku pro 1. derivaci

$$\psi_{m'}(r_{max}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f_{m'} H_{|m'|}^{(1)}(kr_{max}) \quad (2.21)$$

a

$$\psi'_{m'}(r_{max}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} f_{m'} H_{|m'|}^{(1)'}(kr_{max})'. \quad (2.22)$$

Vydělením druhé podmínky první podmínkou vznikne podmínka, která už nezávisí na neznámém koeficientu f

$$\frac{\psi'_{m'}(r_{max})}{\psi_{m'}(r_{max})} = \frac{H_{|m'|}^{(1)'}(kr_{max})}{H_{|m'|}^{(1)}(kr_{max})}. \quad (2.23)$$

Pravou stranu okrajové podmínky jde ještě zjednodušit na tvar v němž se již nebude vyskytovat derivace Hankelovy funkce pomocí následující identity

$$H_{\nu}^{(1)'}(x) = -H_{\nu+1}^{(1)}(x) + \frac{\nu}{x} H_{\nu}^{(1)}(x). \quad (2.24)$$

Tato identita byla převzata z knihy [7] a konkrétně se jedná o identitu 10.6.2 z této knihy. Po použití této identity okrajová podmínka přejde do podoby

$$\frac{\psi'_{m'}(r_{max})}{\psi_{m'}(r_{max})} = \frac{|m'|}{r_{max}} - k \frac{H_{|m'|+1}^{(1)}(kr_{max})}{H_{|m'|}^{(1)}(kr_{max})}, \quad (2.25)$$

což je vhodná okrajová podmínka.

2.1 Diskretizace a numerické řešení

Soustava rovnic 2.16 je bohužel příliš složitá na to aby bylo možné doufat v to, že se jí podaří vyřešit analyticky. Cestou jak postupovat dále je tím pádem numerické řešení této soustavy. Numerické řešení zmíněné soustavy rovnic lze nalézt vícero metodami, v této práci byl konkrétně použit postup založený na diskretizaci radiální proměnné r pomocí ekvidistantní sítě. Funkce $\psi_{m'}(r)$ byly nahrazeny posloupnostmi komplexních čísel $\psi_{m' n}$, kde n je index číslující pozici bodu na síti. Index n pak může nabývat hodnot od 0 do N . Zvolená síť byla ekvidistantní se vzdáleností bodů h . To znamená, že platí následující korespondence

$$\psi_{m'}(r) \rightarrow \psi_{m' n}, \quad (2.26)$$

odpovídající podmínce $r = nh$.

Dále je zapotřebí zdiskretizovat všechny derivace vyskytující se v soustavě rovnic 2.16. V této soustavě se vyskytují první a druhé derivace podle r . Je

pak dobré jednotlivé derivace zdiskretizovat tak aby všechny diskretizace měly stejný odhad chyby a konkrétně byla provedena volba, že všechny derivace budou zdiskretizovány s chybou řádu $\mathcal{O}(h^2)$. Diskretizace druhé derivace s chybou $\mathcal{O}(h^2)$ vypadá takto

$$\frac{d^2\psi_{m'}(r)}{dr^2} \rightarrow \frac{\psi_{m' n-1} - 2\psi_{m' n} + \psi_{m' n+1}}{h^2} \quad (2.27)$$

a diskretizace první derivace s chybou $\mathcal{O}(h^2)$ vypadá takto

$$\frac{d\psi_{m'}(r)}{dr} \rightarrow \frac{-\psi_{m' n-1} + \psi_{m' n+1}}{2h}. \quad (2.28)$$

Dosazením těchto diskretizací do rovnice 2.16 vznikne následující soustava algebraických rovnic

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\psi_{m' n-1} - 2\psi_{m' n} + \psi_{m' n+1}}{h^2} + \frac{1}{r} \frac{-\psi_{m' n-1} + \psi_{m' n+1}}{2h} - \frac{m'^2}{r^2} \psi_{m' n} \right) - \\ -E\psi_{m' n} + \left(\frac{1}{2}r^2 + K \right) e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} \psi_{m' n} + \lambda \frac{r^3}{6i} e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} (\psi_{m'-3 n} - \psi_{m'+3 n}) = \\ = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} V(r, \vartheta) e^{-ikr \sin \vartheta} e^{-im' \vartheta} d\vartheta, \end{aligned} \quad (2.29)$$

přičemž vztah mezi n a r je takovýto $r = nh$. Toto je soustava nekonečně mnoha lineárních rovnic o nekonečně mnoho neznámých, přičemž důvodem proč je rovnic nekonečně mnoho je to, že proměnná m' může nabývat libovolné celočíselné hodnoty. Tento problém se dá řešit oseknutím Fourierovy báze na konečný počet prvků. To znamená, že se uvažují pouze ty členy Fourierovy řady pro něž platí, že $|m| \leq m_{max}$ a příspěvek od zbylých členů Fourierovy řady se zanedbá. Díky tomu může m' nabývat pouze hodnot od $-m_{max}$ do m_{max} , což způsobí, že soustava rovnic 2.29 se stane soustavou konečného počtu lineárních rovnic.

Ještě zbývá zodpovědět na otázku o kolik rovnic se jedná a kolik je neznámých. Proměnná m' může nabývat celkem $2m_{max} + 1$ hodnot a proměnná n může nabývat celkem $N + 1$ hodnot. Celkem je tím pádem $(2m_{max} + 1)(N + 1)$ neznámých. V rovnicích 2.29 může proměnná m' nabývat všech hodnot od $-m_{max}$ do m_{max} (speciálně pokud by nastal případ $m' + 3 > m_{max}$ tak se uvažuje konvence $\psi_{m'+3 n} = 0$, neboť příspěvek od členu Fourierovy řady s $m + 3$ je nulový díky oseknutí úhlové báze, analogicky pro $m' - 3 < -m_{max}$), což je $2m_{max} + 1$ hodnot. Proměnná n může v rovnicích 2.29 nabývat hodnot od 1 do $N - 1$, protože pro $n = 0$ nelze říct co je $\psi_{m' n-1}$ a pro $n = N$ nelze říct co je $\psi_{m' n+1}$. Dohromady to dělá $(2m_{max} + 1)(N - 1)$ rovnic.

Aby bylo stejně rovnic jako neznámých je ještě třeba přidat dalších $2(2m_{max} + 1)$ rovnic. Tyto rovnice budou odpovídat okrajovým podmínkám. Okrajovou podmínkou pro $r = r_{max}$ je podmínka 2.25, která po zdiskretizování vypadá takto

$$\frac{-\psi_{m' N-2} + \psi_{m' N}}{\psi_{m' N-1}} = \frac{|m'|}{r_{max}} - k \frac{H_{|m'|+1}^{(1)}(kr_{max})}{H_{|m'|}^{(1)}(kr_{max})}. \quad (2.30)$$

Okrajová podmínka odpovídající navázání na volnou částici byla aplikována na $N - 1$ bodě sítě aby šlo dobře použít výše uvedený vzorec pro diskretizaci první

derivace. Platí tím pádem podmínka $r_{max} = (N - 1)h$ Toto je dalších $2m_{max} + 1$ rovnic. Okrajová podmínka v $r = 0$ odpovídající nulovosti vlnové funkce v počátku pro m' různé od 0 dává následující rovnice

$$\psi_{m' 0} = 0. \quad (2.31)$$

To je dalších $2m_{max}$ rovnic. A pro $m' = 0$ je okrajovou podmínkou nulová derivace vlnové funkce v počátku. Tuto derivaci je zapotřebí zdiskretizovat s chybou $o(h^2)$ a to nesymetricky tak aby se v diskretizaci vyskytovaly pouze hodnoty $\psi_{0 n}$ kde n je nezáporné. Vhodná diskretizace vypadá takto

$$\frac{-3\psi_{0 0} + 4\psi_{0 1} - \psi_{0 2}}{2h} = 0, \quad (2.32)$$

což je poslední rovnice.

Dohromady tvoří rovnice 2.29, 2.30, 2.31 a 2.32 soustavu $(2m_{max} + 1)(N + 1)$ lineárních rovnic o $(2m_{max} + 1)(N + 1)$ neznámých. Vyřešení této soustavy je už úlohou z lineární algebry. Tato soustava pak byla numericky vyřešena příslušnými metodami z knihovny LAPACK. Při řešení bylo využito toho, že díky symetrii potenciálu dané grupou C_{3v} se soustava rozpadá na tři nezávislé podsoustavy a každá podsoustava byla řešena zvlášť. Zmíněná soustava respektive podsoustavy se dají uspořádat tak, že mají pásovou strukturu, díky čemuž byl pro urychlení výpočtu v některých případech používán pásový řešič. Integrály vyskytující se na pravé straně rovnic 2.29 byly počítány numericky obdélníkovým pravidlem.

Pro konkrétní výpočet byly použity hodnoty parametrů uvedené v tabulce 2.1. Korektnost volby $m_{max} = 40$ jde zdůvodnit na základě rozvoje do parciálních vln, kdy tato podmínka odpovídá zanedbání parciálních vln s $m > m_{max}$. První zanedbané parciální vlně odpovídá radiální funkce $J_{41}(kr)$, která má asymptotiku jako $\frac{1}{41!} \left(\frac{kr}{2}\right)^{41}$ pro malá r . Konkrétně pro nejvyšší uvažovanou energii $E = 2.5$ platí, že 41 Besselova funkce je na zkoumané oblasti menší než přibližně 0.0108. To je na samé hraně přípustnosti zanedbání této parciální vlny, nicméně typické energie rozptylované částice byly menší nebo přibližně rovny hodnotě $E = 1$. Pro tuto hodnotu pak je 41 Besselova funkce na zkoumané oblasti menší než $1.5 \cdot 10^{-8}$, tudíž pro tuto energii je zanedbání parciálních vln s $m > m_{max}$ zcela korektní aproximací. Velikost chyby vzniklé v důsledku diskretizace (související s volbou h) byla odhadnuta následující metodou. Výpočet byl proveden pro více možných hodnot h , přičemž byl držen konstantní součin Nh a energie byla $E = 1$. Pro každou použitou hodnotu h byl spočten integrální účinný průřez podle postupu uvedeného ve čtvrté kapitole. Závislost integrálního účinného průřezu na parametru h byla následně proložena funkcí

$$\sigma = ax^2 + b, \quad (2.33)$$

přičemž parametry a a b byly nalezeny metodou nejmenších čtverců. Kvadratická funkce je volena protože užitá numerická metoda je druhého řádu přesnosti v parametru h . Parametr b má význam nejlepšího možného odhadu přesné hodnoty účinného průřezu. Následně byla pro každou hodnotu účinného průřezu stanovena chyba jako rozdíl vypočtené hodnoty a parametru b . Závislost chyby účinného průřezu byla následně vynesena do grafu v logaritmickém měřítku, kde byla fitována funkcí

$$\ln(\sigma - b) = 2 \ln(h) + p, \quad (2.34)$$

parametr	hodnota
\hbar	1
M	1
λ	0.25
σ	4
m_{max}	40
N	100
h	0.16
$r_{max} = (N - 1)h$	15.84

Tabulka 2.1 Použité hodnoty parametrů pro numerické řešení. Potenciál odpovídající těmto parametrům je zobrazen na obrázku 2.1.

přičemž parametr p byl nalezen regresí. Koefficient 2 je v závislosti, protože byla použita numerická metoda druhého řádu v h . Graf na němž je vidět tato regrese si lze prohlédnout na obrázku 2.2, na němž se jde přesvědčit, že fitovaná přímka odpovídá napočítaným hodnotám, což ověřuje, že použitá metoda byla skutečně druhého řádu v h . Konkrétně pro hodnotu $h = 0.16$, která byla užívána pro další výpočty vyšla chyba účinného průřezu přibližně 0.2. To je dobré srovnat s tím, že vypočtená hodnota účinného průřezu byla zhruba $\sigma = 86$. To znamená že relativní chyba účinného průřezu je menší než čtvrt procenta, což je odhad chyby vzniklé v důsledku diskretizace radiální rovnice.

Jak vypadá výsledná vlnová funkce $\psi(r, \vartheta)$ (rovinná vlna + ψ_{sc}) lze alespň nějak nahlédnout na obrázku 2.3. Vzhledem k tomu, že vlnová funkce je komplexní funkce, tak je velmi obtížné ji nějak graficky znázornit. Nicméně nějakou představu lze získat alespoň znázorněním hustoty pravděpodobnosti výskytu částice, která je definována jako

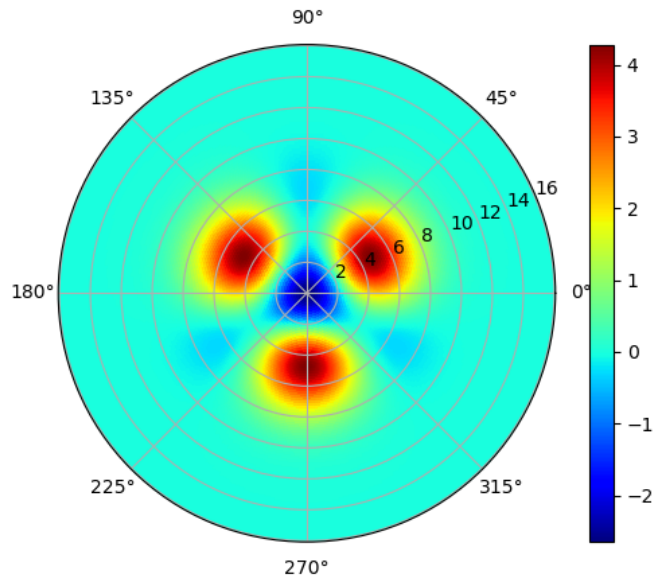
$$\rho(r, \vartheta) = |\psi(r, \vartheta)|^2. \quad (2.35)$$

To co je zobrazeno na obrázku 2.3 je ve skutečnosti hustota pravděpodobnosti. Ještě je vhodné poznamenat, že se jedná o stav spojeného spektra a hustotu pravděpodobnosti proto nelze dobře normalizovat ve smyslu normalizace v L^2 , takže to co je zobrazeno na obrázku 2.3 není nikterak normalizováno. Lze si všimnout, že tmavě modré oblasti na obrázku 2.3 odpovídající velmi nízké hustotě pravděpodobnosti odpovídají místům kde nabývá modelový potenciál V vysokých hodnot. Rovněž si lze všimnout, že pro vyšší energii pronikne větší část hustoty pravděpodobnosti dovnitř trojúhelníka.

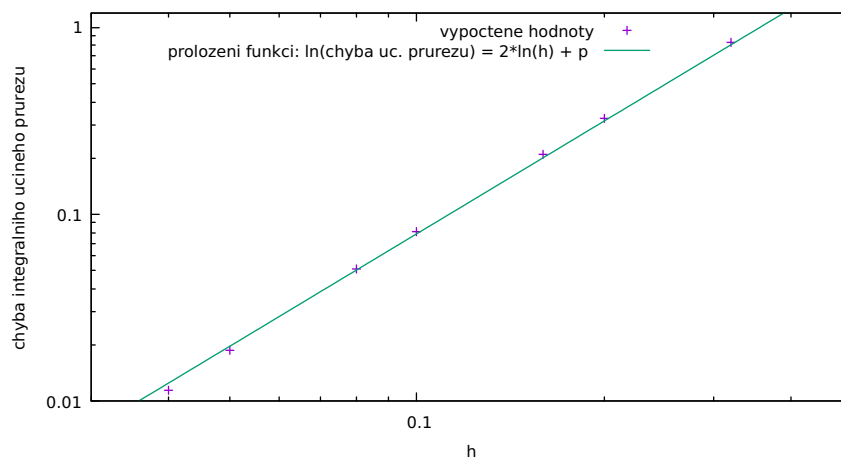
2.2 Formulace pomocí parciálních vln

Pro studium některých fyzikálních vlastností získaného řešení jako jsou např. fázová posunutí je obzvláště výhodné provést rozvoj vlnové funkce do parciálních vln. Myšlenka rozvoje do parciálních vln je založená na tom, že rovinnou vlnu odpovídající nalétávající částici lze rozvinout do sférických harmonických funkcí, což jsou ve 2D případě jen funkce typu $e^{im\vartheta}$. Vzorec, odpovídající tomuto rozvoji, uvádí ve své knize [5] Harald Friedrich a ten vzorec vypadá takto

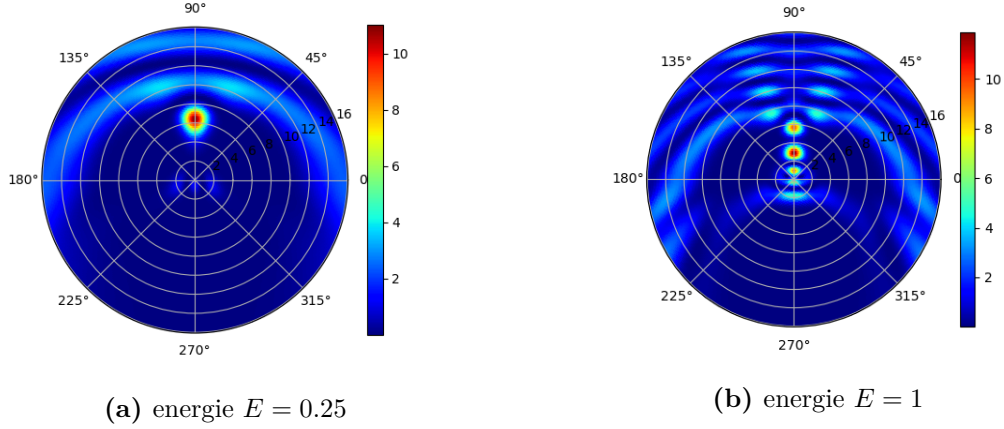
$$e^{ikx} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^{|m|} J_{|m|}(kr) e^{im\vartheta}. \quad (2.36)$$



Obrázek 2.1 Potenciál odpovídající parametrům v tabulce 2.1. Potenciál je zobrazen jen na zkoumané oblasti, na níž je úloha numericky řešena. Mimo zkoumanou oblast (pro $r > r_{max}$), kde je řešení považováno za řešení volné částice, je potenciál zanedbatelný. Míru zanedbatelnosti jde kvantifikovat tak, že mimo zkoumanou oblast platí následující odhad na velikost potenciálu $|V| < 2 \cdot 10^{-4}$.



Obrázek 2.2 Závislost chyby integrálního účinného průřezu na parametru h . Na obou osách je použito logaritmické měřítko. Napočtené hodnoty jsou proloženy přímkou se směrnici 2.



Obrázek 2.3 Výsledná hustota pravděpodobnosti. Hodnoty ostatních parametrů jsou takové jak je uvedeno v tabulce 2.1. Částice nalétává seshora, tj. rovinná vlna je e^{-iky} .

Nyní se vyplatí na chvíli předpokládat, že částice nalétává ve směru osy x . Pravá strana rovnic 2.29 pak bude vypadat takto

$$-\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} V(r, \vartheta) e^{ikx} e^{-im'\vartheta} d\vartheta = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} V(r, \vartheta) \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^{|m|} J_{|m|}(kr) e^{im\vartheta} e^{-im'\vartheta} d\vartheta, \quad (2.37)$$

kde byl dosazen rozvoj nalétávající funkce do parciálních vln. Besselovu funkci a faktory $i^{|m|}$ lze vytknout před integrál, čímž zbyde přesně stejný integrál, který byl řešen ve vztahu 2.15. Po vyřešení integrace přejde předchozí výraz na tvar

$$-i^{|m'|} J_{|m'|}(kr) \left(\frac{1}{2} r^2 + K \right) e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} + \lambda \frac{r^3}{6i} e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} \left(i^{|m'+3|} J_{|m'+3|}(kr) - i^{|m'-3|} J_{|m'-3|}(kr) \right). \quad (2.38)$$

Dosazením tohoto tvaru do rovnice 2.29 vyjde

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\psi_{m' n-1} - 2\psi_{m' n} + \psi_{m' n+1}}{h^2} + \frac{1}{r} \frac{-\psi_{m' n-1} + \psi_{m' n+1}}{2h} - \frac{m'^2}{r^2} \psi_{m' n} \right) - \\ & -E\psi_{m' n} + \left(\frac{1}{2} r^2 + K \right) e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} \psi_{m' n} + \lambda \frac{r^3}{6i} e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} (\psi_{m'-3 n} - \psi_{m'+3 n}) = \\ & = -i^{|m'|} J_{|m'|}(kr) \left(\frac{1}{2} r^2 + K \right) e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} + \\ & + \lambda \frac{r^3}{6i} e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} \left(i^{|m'+3|} J_{|m'+3|}(kr) - i^{|m'-3|} J_{|m'-3|}(kr) \right). \end{aligned} \quad (2.39)$$

Tyto rovnice pak spolu s rovnicemi odpovídajícími okrajovým podmínkám, které zůstanou nezměněny, tvoří soustavu lineárních rovnic, kterou lze vyřešit. Obzvláště výhodné je vyřešit soustavu zvláště pro každou parciální vlnu. To znamená, že na pravé straně bude vždy pouze příspěvek od jedné jediné parciální vlny a místo příspěvku od ostatních parciálních vln tam bude nula. Celkové řešení se pak získá díky linearitě soustavy jako součet řešení od jednotlivých parciálních vln.

Výhoda přístupu pomocí parciálních vln je v tom, že po vyřešení rozptylové úlohy pomocí parciálních vln jde velmi snadno vyřešit rozptyl pro částici nalétávající z libovolného směru bez nutnosti znovu řešit soustavu rovnic. Trik, který

to umožňuje je následující: každou parciální vlnu je zapotřebí otočit o úhel φ odpovídající úhlu popisujícímu směr nalétávání. To znamená, že úhel ϑ se nahradí úhlem $\vartheta - \varphi$. Pravá strana řešené soustavy rovnice se bude u m té parciální vlny lišit pouze přenásobením faktorem $e^{-im\vartheta}$. Vzhledem k linearitě soustavy se pak řešení pro nalétávající vlnu ze směru daného úhlem ϑ dá získat jako součet řešení pro nalétávající vlnu ve směru osy x od jednotlivých parciálních vln, přičemž každé jednotlivé řešení je nutné ještě přenásobit faktorem $e^{-im\vartheta}$.

Další výhodou přístupu pomocí parciálních vln je možnost zavést různé fyzikální veličiny popisující vlastnosti rozptylu jako třeba fázová posunutí. Vzhledem k tomu byla numerická řešení obvykle hledána právě pomocí parciálních vln. Numerická řešení byla dále analyzována a byly zkoumány různé jejich fyzikální vlastnosti. Tomu se věnuje čtvrtá kapitola této práce.

3 Metoda R -matice

Tato kapitola se věnuje alternativnímu přístupu ke zkoumané úloze, kterým je R -maticová formulace. Metoda R -matice je jednou z běžně používaných metod pro studium rozptylu. Je založena na tom, že se problém uzavře do koule, následně se diagonalizací Hamiltoniánu uvnitř R -maticové koule najdou jeho vlastní stavy a vlastní energie. Hamiltonián má navíc na hranici R -maticové koule jednodušší (nezávislou na energii) okrajovou podmínku než původní rozptylová úloha. Z nalezených vlastních energií a vlastních stavů se následně sestaví R -matice, která obsahuje informace o chování rozptylované částice v oblasti R -maticové koule. Výsledná vlnová funkce nebo příslušná S -matice se nakonec získá napojováním na řešení volné částice na hranici R -maticové koule.

Jednou z hlavních výhod této metody je to, že numericky nejnáročnější kroky postupu, kterými jsou konstrukce Hamiltoniánu a jeho následná diagonalizace, jsou nezávislé na energii rozptylované částice a tím pádem je stačí provést pouze jednou. Zbylé kroky nutné k vyřešení úlohy, které již závisejí na energii, se sice už musí provádět pro každou energii zvlášť, ale naštěstí výpočetní náročnost těchto zbylých kroků je výrazně nižší než náročnost kroků nezávislejších na energii.

Cílem této kapitoly je aplikace R -maticového přístupu na řešení rozptylu v modelovém potenciálu. V příští kapitole je pak R -maticové řešení porovnáno s metodou Fourierovy řady, které se věnovala předchozí kapitola.

3.1 Teoretický základ R -maticové metody

Základní myšlenka R -maticového přístupu je, že se celý problém uzavře do koule (ve 2D do kruhu) o poloměru R nazývané R -maticová koule. Tato R -maticová koule by měla být tak velká, aby potenciál mimo ni byl zanedbatelný a řešení vně R -maticové koule bylo možné prohlásit za řešení volné částice. Zároveň by však R -maticová koule neměla být příliš velká, neboť výpočetní složitost roste s velikostí R -maticové koule.

Dalším krokem postupu je řešení stacionární Schrödingerovy rovnice uvnitř R -maticové koule s cílem nalézt vlastní stavy a vlastní energie Hamiltoniánu. Hamiltonián částice je dobré vyjádřit v nějaké bázi, proto dává smysl zavést zatím zcela obecnou bázi $|\chi_j\rangle$, které v souřadnicové reprezentaci odpovídají bázové funkce χ_j . V této bázi Hamiltonián vypadá takto

$$H_{jj'} = \langle \chi_j | \hat{H} | \chi_{j'} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2M} \int_{\Omega} \chi_j^* \Delta \chi_{j'} d\Omega, \quad (3.1)$$

kde Ω je oblast vnitřku R -maticové koule. Jenže tento Hamiltonián není hermitovský. Proto je nutné k tomuto Hamiltoniánu přidat ještě takzvaný Blochův člen

$$L_{jj'} = \frac{\hbar^2}{2M} \int_{\partial\Omega} \chi_j^* \frac{d}{d\nu} \chi_{j'} dS, \quad (3.2)$$

kde $\frac{d}{d\nu}$ je normálová derivace. Vznikne tak nový Hamiltonián

$$H_{Rjj'} = H_{jj'} + L_{jj'} = \frac{\hbar^2}{2M} \int_{\Omega} (\nabla \chi_j^*) \nabla \chi_{j'} d\Omega, \quad (3.3)$$

který už je hermitovský. Tento nový Hamiltonián se musí zdiagonalizovat, což odpovídá řešení vlastního problému

$$\hat{H}_R|\varphi_k\rangle = E_k|\varphi_k\rangle. \quad (3.4)$$

Vlastní vektory $|\varphi_k\rangle$ lze zapsat v bázi $|\chi_j\rangle$ následovně

$$|\varphi_k\rangle = \sum_{j'} c_{kj'}|\chi_{j'}\rangle, \quad (3.5)$$

díky čemuž vlastní problém po zprojektování na bázový bra vektor $\langle\chi_j|$ přejde do tvaru

$$\sum_{j'} \langle\chi_j|\hat{H}_R|\chi_{j'}\rangle c_{kj'} = E_k \sum_{j'} \langle\chi_j|\chi_{j'}\rangle c_{kj'}. \quad (3.6)$$

Zde se na levé straně objevuje maticový element Hamiltoniánu H_R a na pravé straně maticový element Grammovy matice G příslušející bázi $|\chi_j\rangle$. To znamená, že předchozí rovnici lze přepsat do tvaru

$$\sum_{j'} H_{Rjj'} c_{kj'} = \sum_{j'} E_k G_{jj'} c_{kj'}. \quad (3.7)$$

Vyřešením této zobecněné vlastní rovnice se získají vlastní energie E_k a koeficienty rozvoje vlastních stavů $c_{kj'}$ Hamiltoniánu H_R . Je dobré poznamenat, že celý postup je až doposud nezávislý na energii rozptylované částice.

Následně je zapotřebí ze získaných vlastních energií a vlastních stavů sestavit samotnou R -matici. R -matici lze sestavit podle vzorce

$$R = \frac{\hbar^2}{2M} \sum_k \frac{|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|}{E_k - E}. \quad (3.8)$$

Respektive v souřadnicové reprezentaci

$$R(\vec{r}', \vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2M} \sum_k \frac{\varphi_k^*(\vec{r}')\varphi_k(\vec{r})}{E_k - E}. \quad (3.9)$$

Vlnovou funkci lze pomocí R -matice dopočítat dle vzorce

$$\psi(\vec{r}') = \int_{\partial\Omega} R(\vec{r}', \vec{r}) \frac{d}{d\nu} \psi(\vec{r}) dS, \quad (3.10)$$

kde už vystupuje jen R -matice a normálová derivace vlnové funkce na hranici R -maticové koule. Tyto tři vztahy se dají odvodit pomocí inverze operátoru $H_R - E$ a toto odvození lze nalézt v knize P. Burkea [8] z níž byly tyto vztahy převzaty. Ještě je dobré si uvědomit, že R -matici lze pomocí stavů báze $|\chi_j\rangle$ zapsat rovněž takto

$$R_{jj'} = \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{kj'} \frac{c_{kj}^* c_{kj'} |\chi_{j'}\rangle\langle\chi_j|}{E_k - E}. \quad (3.11)$$

V souřadnicové reprezentaci předchozí vztah vypadá takto

$$R(\vec{r}', \vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{kj'} \frac{c_{kj}^* c_{kj'} \chi_{j'}(\vec{r}) \chi_j(\vec{r}')^*}{E_k - E}. \quad (3.12)$$

Posledním krokem postupu je napojování na řešení volné částice na okraji R -maticové koule. Pro účely analýzy a srovnání s předchozí metodou bude nejvýhodnější nalézt vzorec umožňující spočítat S -matici. S -matice se standartně hledá v bázi sférických harmonických funkcí, což jsou ve 2D případě pouze funkce $\frac{1}{\sqrt{2\pi R}}e^{im\vartheta}$. Proto se vyplatí převést si R -matici rovněž do báze sférických harmonických funkcí dle vztahu

$$R_{mm'} = \int_{\partial\Omega} \int_{\partial\Omega'} \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} e^{-im\vartheta'} R(\vec{r}', \vec{r}) \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} e^{im'\vartheta} dS dS'. \quad (3.13)$$

Řešení vně R -maticové koule odpovídá řešení volné částice a lze jej rozvinout do parciálních vln dle vzorce

$$\psi = \sum_m \left(-f_m + \sum_{m'} g_{m'} S_{m'm} \right) \alpha_m, \quad (3.14)$$

kde f_m a $g_{m'}$ jsou jednotlivé přicházející respektive odcházející parciální vlny a α_m jsou koeficienty rozvoje. Z předchozího vztahu a vztahu 3.10 jde vyjádřit následující vztah

$$S = \left(R^{-1}g - \frac{dg}{d\nu} \right)^{-1} \left(R^{-1}f - \frac{df}{d\nu} \right), \quad (3.15)$$

kde jsou všechny příslušné normálové derivace vyhodnocovány na hranici R -maticové koule. Funkci f v předchozím vztahu je nutné interpretovat jako diagonální matici, mající na diagonále maticové elementy odpovídající příslušným parciálním vlnám : $f_{mm} = f_m$, analogicky pro g . Uvedený vztah pro S -matici je diskutován (s jinou znaménkovou konvencí) v Burkeově knize [8] z níž byl převzat.

Tento oddíl věnující se teoretickému základu R -maticové metody slouží primárně jako přehled základních vzorců, na něž se bude odkazovat další oddíl věnující se konkrétní aplikaci R -maticové metody na rozptyl v modelovém potenciálu. Celý tento oddíl pak byl vypracován podle zdroje [8] v němž je teorie stojící za R -maticí vyložena mnohem podrobněji.

3.2 Aplikace R -maticového postupu na rozptyl v modelovém potenciálu

Po shrnutí základní teorie ohledně R -matice v předchozím oddílu, nastává čas zaměřit se na konkrétní aplikaci R -matice na zkoumaný rozptyl v modelovém potenciálu. Velká část rovnic v oddílu věnovaném teorii je formulována v blíže nespecifikované (libovolně zvolené) bázi $|\chi_j\rangle$. Proto je vhodné si nejprve ze všeho zvolit vhodnou bázi $|\chi_j\rangle$, v níž bude podstatná část výpočtů prováděna. Jedním z kroků postupu je převod R -matice do báze sférických harmonických funkcí, a proto je chytré volit takovou bázi, v níž tento převod půjde provést dosti jednoduše. Takovou bází je například báze 2D izotropního lineárního harmonického oscilátoru, která byla konkrétně použita. Tuto bázi jde charakterizovat 2 kvantovými čísly n a m , přičemž n může nabývat libovolné nezáporné celočíselné hodnoty a m může nabývat libovolné celočíselné hodnoty. Bázovému stavu $|n, m\rangle$ pak přísluší energie

$$E_{nm} = \hbar\omega(2n + |m| + 1), \quad (3.16)$$

kde ω je charakteristická frekvence oscilátoru. Vlnové funkce odpovídající bázovým stavům v souřadnicové reprezentaci vypadají v polárních souřadnicích takto

$$\psi_{nm} = \langle \vec{r} | n, m \rangle = N_{n|m|} \left(\frac{r}{\rho} \right)^{|m|} e^{-\frac{r^2}{2\rho^2}} L_n^{|m|} \left(\frac{r^2}{\rho^2} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\vartheta}, \quad (3.17)$$

kde $L_n^{|m|}$ je přidružený Laguerrův polynom a $\rho = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}$ je charakteristický rozměr oscilátoru. Normovací konstanta má tvar

$$N_{n|m|} = \sqrt{\frac{2n!}{\rho^2(n+|m|)!}}. \quad (3.18)$$

Podrobné odvození energetického spektra a tvaru bázových funkcí izotropního lineárního harmonického oscilátoru lze nalézt v přehledovém článku [9], z něhož byly jak spektrum tak tvar bázových funkcí převzaty. Pro numerické řešení pak byla báze oseknuť na energii $E_{max} = 41\hbar\omega$, jinými slovy byly uvažovány jen ty bázové funkce, jimž přísluší energie menší nebo rovna E_{max} . Tato hodnota byla zvolena, protože m pak může nabývat hodnot od -40 do 40, což odpovídá stejnému počtu parciálních vln, jaký byl použit u metody Fourierovy řady.

Prvním krokem postupu je uzavření problému do R -maticové koule. Touto koulí zde bude kruh o poloměru R . Dále je zapotřebí uvnitř tohoto kruhu zdiagonalizovat Hamiltonián s Blochovým členem, což odpovídá řešení rovnice 3.7. V této rovnici se vyskytují maticové elementy Grammovy matice a Hamiltoniánu H_R , tudíž se nejprve vyplatí si je předpočítat.

Maticové elementy Grammovy matice se spočtou snadno z definice

$$\begin{aligned} G_{nmn'm'} = \langle n, m | n', m' \rangle &= \int_0^R \int_0^{2\pi} N_{n|m|} \left(\frac{r}{\rho} \right)^{|m|} e^{-\frac{r^2}{2\rho^2}} L_n^{|m|} \left(\frac{r^2}{\rho^2} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\vartheta} \\ &\quad N_{n'|m'|} \left(\frac{r}{\rho} \right)^{|m'|} e^{-\frac{r^2}{2\rho^2}} L_{n'}^{|m'|} \left(\frac{r^2}{\rho^2} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im'\vartheta} r d\vartheta dr = \\ &= \int_0^R N_{n|m|} N_{n'|m'|} \left(\frac{r}{\rho} \right)^{|2m|} e^{-\frac{r^2}{\rho^2}} L_n^{|m|} \left(\frac{r^2}{\rho^2} \right) L_{n'}^{|m|} \left(\frac{r^2}{\rho^2} \right) \delta_{mm'} r dr \end{aligned} \quad (3.19)$$

a zbývající integrál přes radiální proměnnou byl dopočten numericky obdélníkovým pravidlem pro jednotlivé hodnoty kvantových čísel.

Maticové elementy Hamiltoniánu H_R se vyplatí počítat ve dvou krocích. Nejprve se zpracují maticové elementy kinetického plus Blochova členu

$$\langle n, m | \hat{T} + \hat{L} | n', m' \rangle = \frac{\hbar^2}{2M} \int_0^R \int_0^{2\pi} (\nabla \chi_{nm}^*) \nabla \chi_{n'm'} d\vartheta dr. \quad (3.20)$$

Ten gradient co tam vystupuje vypadá takto

$$\begin{aligned}
\nabla\psi_{nm} &= N_{n|m}|m|\frac{1}{r}\left(\frac{r}{\rho}\right)^{|m|}e^{-\frac{r^2}{2\rho^2}}L_n^{|m|}\left(\frac{r^2}{\rho^2}\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\vartheta}\vec{e}_r - \\
&\quad - N_{n|m}\left(\frac{r}{\rho}\right)^{|m|}\frac{r}{\rho^2}e^{-\frac{r^2}{2\rho^2}}L_n^{|m|}\left(\frac{r^2}{\rho^2}\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\vartheta}\vec{e}_r - \\
&\quad - N_{n|m}\left(\frac{r}{\rho}\right)^{|m|}e^{-\frac{r^2}{2\rho^2}}\frac{2r}{\rho^2}L_{n-1}^{|m|+1}\left(\frac{r^2}{\rho^2}\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\vartheta}\vec{e}_r + \\
&\quad + N_{n|m}\left(\frac{r}{\rho}\right)^{|m|}e^{-\frac{r^2}{2\rho^2}}L_n^{|m|}\left(\frac{r^2}{\rho^2}\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}ime^{im\vartheta}\frac{1}{r}\vec{e}_\vartheta,
\end{aligned} \tag{3.21}$$

kde Laguerrův polynom byl derivován dle relace

$$\frac{d}{dx}L_n^\alpha(x) = -L_{n-1}^{\alpha+1}(x), \tag{3.22}$$

což je vztah 18.9.23 z knihy [7]. Nyní již jde spočíst samotný maticový element kinetického plus Blochova členu, který vyjde takto

$$\begin{aligned}
\langle n, m | \hat{T} + \hat{L} | n', m' \rangle &= \frac{\hbar^2}{2M} N_{n|m} N_{n'|m'} \int_0^R \delta_{m m'} e^{-\frac{r^2}{\rho^2}} \frac{1}{\rho} \left(\frac{r}{\rho}\right)^{2|m|+1} \\
&\quad \left(|m| \frac{\rho}{r} L_n^{|m|} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) - \frac{r}{\rho} L_n^{|m|} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) - 2 \frac{r}{\rho} L_{n-1}^{|m|+1} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) \right) \\
&\quad \left(|m'| \frac{\rho}{r} L_{n'}^{|m'|} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) - \frac{r}{\rho} L_{n'}^{|m'|} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) - 2 \frac{r}{\rho} L_{n'-1}^{|m'|+1} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) \right) + \\
&\quad + \frac{1}{\rho} \left(\frac{r}{\rho}\right)^{2|m|-1} e^{-\frac{r^2}{\rho^2}} L_n^{|m|} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) L_{n'}^{|m'|} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) m^2 \delta_{m m'} dr
\end{aligned} \tag{3.23}$$

a tento integrál byl opět dopočten pro konkrétní kvantová čísla numericky obdélníkovým pravidlem. Potenciálový člen dá následující maticové elementy

$$\begin{aligned}
V_{nmn'm'} &= \int_0^R \int_0^{2\pi} N_{n|m} \left(\frac{r}{\rho}\right)^{|m|} e^{-\frac{r^2}{2\rho^2}} L_n^{|m|} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-im\vartheta} \\
&\quad V(r, \vartheta) N_{n'|m'} \left(\frac{r}{\rho}\right)^{|m'|} e^{-\frac{r^2}{2\rho^2}} L_{n'}^{|m'|} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im'\vartheta} r d\vartheta dr.
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Zde je dobré si vzpomenout, že integrace přes úhel vystupující v tomto vztahu už byla počítána v předchozí kapitole. Jedná se o vztah 2.15. Po užití tohoto vztahu vyjde

$$\begin{aligned}
V_{nmn'm'} &= \int_0^R N_{n|m} N_{n'|m'} \left(\frac{r}{\rho}\right)^{|m|+|m'|} e^{-\frac{r^2}{\rho^2}} L_n^{|m|} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) L_{n'}^{|m'|} \left(\frac{r^2}{\rho^2}\right) \\
&\quad \left(\left(\frac{1}{2} r^2 + K \right) e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} \delta_{m m'} + \lambda \frac{r^3}{6i} e^{-\frac{r^2}{\sigma^2}} (\delta_{m-m'}{}_3 - \delta_{m-m'}{}_{-3}) \right) r dr.
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Tento integrál byl rovněž dopočten pro potřebná kvantová čísla numericky obdélníkovým pravidlem. Maticové elementy Hamiltoniánu H_R jsou pak součtem

maticových elementů kinetického + Blochova členu s maticovými elementy potenciálového členu.

Nyní, když již jsou předpočteny maticové elementy Hamiltoniánu H_R a Grammovy matice G , jde přistoupit k samotnému řešení zobecněného vlastního problému

$$\sum_{n' m'} H_{R n m n' m'} c_{k n' m'} = \sum_{n' m'} E_k G_{n m n' m'} c_{k n' m'}. \quad (3.26)$$

Tato zobecněná diagonalizace byla provedena numericky pomocí příslušné metody knihovny LAPACK. Použitá numerická metoda pro zobecněnou diagonalizaci byla založena na Choleského dekompozici Grammovy matice a převedení úlohy na standartní úlohu vlastních čísel.

Poté, co byly numerickou diagonalizací nalezeny koeficienty c , byla zkonstruována R -matice. Vzhledem k tomu, že pro konstrukci S -matice je zapotřebí R -matice (na okraji R -maticové koule) vyjádřena v bázi sférických harmonických funkcí, tak byla R -matice rovnou konstruována v bázi sférických harmonických funkcí. Kombinací vztahů 3.12 a 3.13 vyjde ($\partial\Omega$ je obvod kruhu a dS je $Rd\vartheta$ a analogicky pro čárkované)

$$\begin{aligned} R_{m m'} &= \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} e^{-im\vartheta'} \frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k j j'} \frac{c_{k j}^* c_{k j'} \chi_{j'}(\vec{r}) \chi_j(\vec{r}')^*}{E_k - E} \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} e^{im'\vartheta} R^2 d\vartheta dS' = \\ &= \frac{\hbar^2}{2M} \sum N_{n|m|} N_{n'|m'|} \frac{c_{k n m}^* c_{k n' m'}}{E_k - E} \left(\frac{R}{\rho}\right)^{|m|+|m'|} e^{-\frac{R^2}{\rho^2}} L_n^{|m|} \left(\frac{R^2}{\rho^2}\right) L_{n'}^{|m'|} \left(\frac{R^2}{\rho^2}\right) R, \end{aligned} \quad (3.27)$$

což je vztah, pomocí něhož byly příslušné maticové elementy R -matice na sféře v bázi sférických harmonických funkcí počítány. Z těchto maticových elementů byla následně dopočtena S -matice podle vztahu 3.15. V tomto vztahu se vyskytují matice f a g odpovídající jednotlivým parciálním vlnám. Řešením volné částice je obyčejná rovinná vlna e^{ikx} a ta jde rozvinout do parciálních vln dle vzorce z knihy [5] jako

$$e^{ikx} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(kr) e^{im\vartheta} = \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m \left(H_m^{(1)}(kr) + H_m^{(2)}(kr) \right) e^{im\vartheta}. \quad (3.28)$$

Z tohoto rozvoje vyplývá, že funkce f_m a g_m jde volit takto (polovina a mociny i jsou zahrnuty v koeficientech α)

$$f_m = -H_m^{(2)}(kr) \quad g_m = H_m^{(1)}(kr). \quad (3.29)$$

Matice f je pak diagonální maticí mající na diagonále funkce f_m vyhodnocené v bodě $r = R$ a analogicky pro g .

Pro konkrétní výpočet byly použity stejné hodnoty \hbar , M a parametrů potenciálu jaku v případě metody Fourierovy řady. Tyto parametry lze nalézt v tabulce 2.1. Poloměr R -maticové koule byl $R = 16$ a z celé nekonečné báze 2D izotropního LHO byly uvažovány jen ty bazové funkce, kterým přísluší energie menší nebo rovna $E_{max} = 41\hbar\omega$. Charakteristický rozměr oscilátoru byl volen jako $\rho = 2$, přičemž bylo zkoušeno i několik dalších hodnot ρ (1, 3, 4, 8) a nebyly pozorovány žádné výrazné změny výsledků (křivky závislosti fázové sumy na energii nejsou v grafu odlišitelné pouhým okem) při změně ρ . Konkrétní výsledky jsou pak uvedeny v následující kapitole, kde jsou srovnány s výsledky získanými metodou Fourierovy řady.

4 Fyzikální vlastnosti získaných řešení a srovnání metod

Tato kapitola se zabývá studiem fyzikálních vlastností řešení rozptylové úlohy v modelovém potenciálu, které byly nalezeny pomocí numerických metod popsaných v předchozích dvou kapitolách. Zásadní veličinou v teorii rozptylu je účinný průřez a to jak diferenciální tak i integrální. Vzhledem k tomu, že v průběhu řešení byl použit přístup pomocí parciálních vln, tak lze již snadno určit S -matici a provádět fázovou analýzu. Fázovou analýzou je myšleno studium fázových posunutí respektive fázových sum. S fázovými posunutími pak bezprostředně souvisí časová zpoždění.

Dalším zajímavým jevem jsou rezonance vyskytující se v daném modelu. Rezonance jde hledat hned několika metodami. Jední z cílů této práce je studium těchto rezonancí. K jejich hledání a následné analýze jejich parametrů byly použity dvě metody, a to sice fitování závislosti integrálního účinného průřezu na energii Fanovou formulí a hledání skoků o π v závislosti fázové sumy na energii.

Jedním z cílů této práce je rovněž srovnání numerických metod Fourierovy řady a R -matice. Tomuto srovnání se věnuje poslední oddíl této kapitoly, kde jsou srovnávány závislosti fázové sumy na energii počítané jednotlivými metodami.

Parametry rozptylované částice a modelového potenciálu odpovídají hodnotám v tabulce 2.1. Všechny výsledky jsou není-li výslovně uvedeno jinak počítány metodou Fourierovy řady.

4.1 Účinný průřez

Účinný průřez je jednou z nejvýznamnějších veličin v teorii rozptylu, která udává četnost rozptylu v daném rozptylovém kanálu. V kvantové teorii se diferenciální účinný průřez pro úhel ϑ standardně (uvedeno např. v [5]) definuje jako

$$\frac{d\sigma}{d\vartheta}(\vartheta) = |f(\vartheta)|^2, \quad (4.1)$$

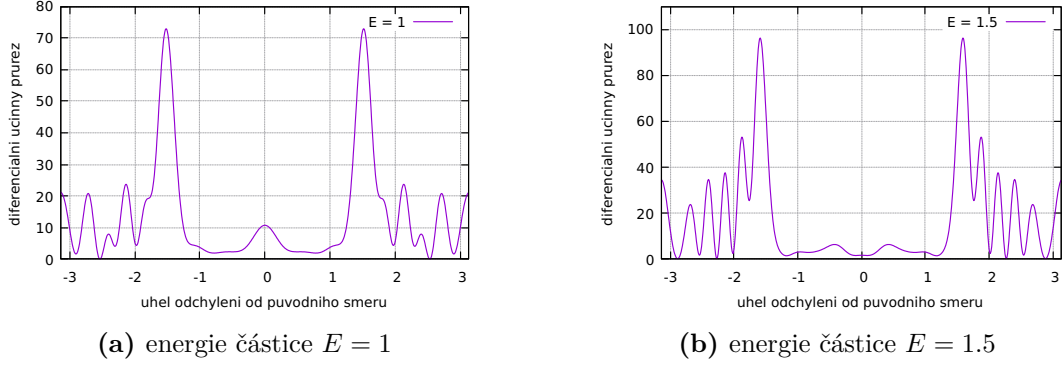
kde f je amplituda rozptylu ze vzorce pro asymptotické chování vlnové funkce

$$\psi(r, \vartheta) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{-iky} + f(\vartheta) \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}. \quad (4.2)$$

Tento přístup umožňuje stanovit diferenciální účinný průřez z asymptotiky vlnové funkce.

Při řešení rozptylové úlohy metodou Fourierovy řady byla jako okrajová podmínka využita asymptotika daná rovnicí 2.21. Okrajová podmínka byla realizována tak, že řešení bylo v $N - 1$ bodě sítě napojeno na asymptotické řešení. Zde je dobré připomenout, že $r_{max} = (N - 1)h$. To znamená, že koeficient rozvoje $f_{m'}$ funkce f jde spočítat jako

$$f_{m'} = \frac{\psi_{m' N-1}}{H_{m'}^{(1)}(kr_{max})}. \quad (4.3)$$



Obrázek 4.1 Diferenciální účinný průřez v závislosti na úhlu odchýlení od směru, kterým částice nalétává. Částice nalétávají proti směru osy y tj. shora. Parametry modelu odpovídají parametrům uvedeným v tabulce 2.1.

Při použití metody Fourierovy řady byl rovněž proveden rozvoj funkce f do Fourierovy řady

$$f(\vartheta) = \sum_m f_m e^{im\vartheta}, \quad (4.4)$$

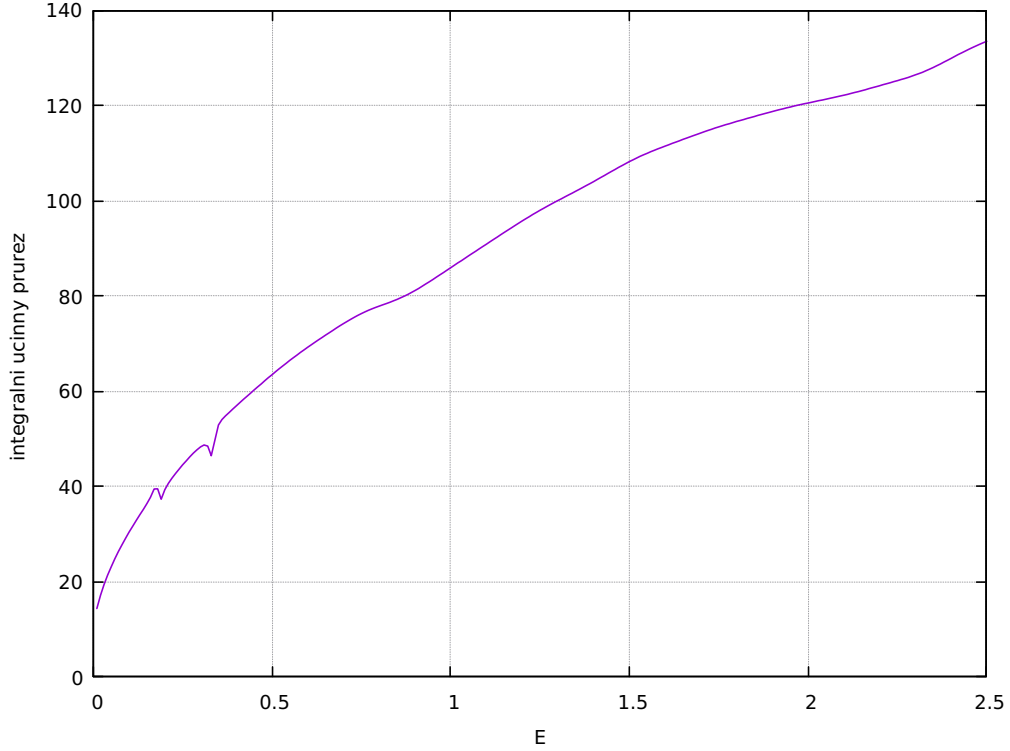
z čehož vyplývá, že diferenciální účinný průřez jde počítat dle vzorce

$$\frac{d\sigma}{d\vartheta}(\vartheta) = \left| \sum_m \frac{\psi_{mN-1}}{H_m^{(1)}(kr_{max})} e^{im\vartheta} \right|^2. \quad (4.5)$$

Toto je vhodný vzorec pro výpočet diferenciálního účinného průřezu, jelikož v něm vystupují již jen hodnoty ψ_{mN-1} , které již byly vypočteny při výpočtu vlnové funkce. Podle tohoto vzorce byl diferenciální účinný průřez konkrétně počítán.

Typické diferenciální účinné průřezy jsou zachyceny na obrázku 4.1. Zde je na místě připomenout, že rozptylovaná částice přilétala shora, tj. nalétávající funkce byla e^{-iky} . Diferenciální účinný průřez je udáván v závislosti na úhlu odchýlení od směru, němž částice přilétala. Na obrázcích 4.1 si lze všimnout, že diferenciální účinný průřez je dost utlumený pro malé úhly odchýlení. To je pravděpodobně způsobeno tím, že pro rozptyl o takto malý úhel by částice musela tunelovat přes kopec nacházející se okolo osy $x = 0$ pod trojúhelníkem. Pro zbylé úhly je na obrázcích vidět interferenční obrazec vyznačující se střídáním peaků a minim. Tento interferenční obrazec není lehké nějak jednoduše interpretovat, jelikož zde do hry vstupuje odraz od kopce vlevo nahoře, odraz od kopce vpravo nahoře a příspěvek od části nalétávající vlny prošlé dovnitř trojúhelníku. Lze si rovněž všimnout, že diferenciální účinný průřez se nezmění při změně znaménka úhlu odchýlení - je to sudá funkce úhlu odchýlení. Tato vlastnost je dána tím, že modelový potenciál je symetrický vzhledem k zrcadlení spojeném s osou, podél níž částice nalétává (záporně vzatá osa y).

Ze znalosti diferenciálního účinného průřezu jde spočítat integrovaný (totální) účinný průřez prostou integrací přes všechny možné úhly odchýlení. Takto byl integrální účinný průřez skutečně spočten, přičemž potřebná integrace byla provedena numericky obdélníkovým pravidlem (alternativou by bylo integrovat analyticky, čímž by se integrální účinný průřez převedl na součet příspěvků od jednotlivých členů Fourierovy řady). Výsledný integrální účinný průřez si lze prohlédnout na obrázku 4.2. Na obrázku 4.2 je konkrétně znázorněna závislost integrálního



Obrázek 4.2 Závislost integrálního účinného průřezu na energii rozptylované částice. Parametry modelu odpovídají parametrům uvedeným v tabulce 2.1.

účinného průřezu na hodnotě energie rozptylované částice. Lze si všimnout, že integrální účinný průřez roste s energií rozptylované částice. Zajímavého chování si lze všimnout v případě nízkých energií kde jsou vidět dva peaky. Tyto peaky si lze detailněji prohlédnout na obrázku 4.3, na němž je zachycen detail předchozího obrázku v okolí těchto peaků. Tyto dva peaky odpovídají rezonancím vyskytujícím se ve zkoumaném modelu. Podrobnějšímu studiu rezonancí se pak věnuje jeden z následujících oddílů.

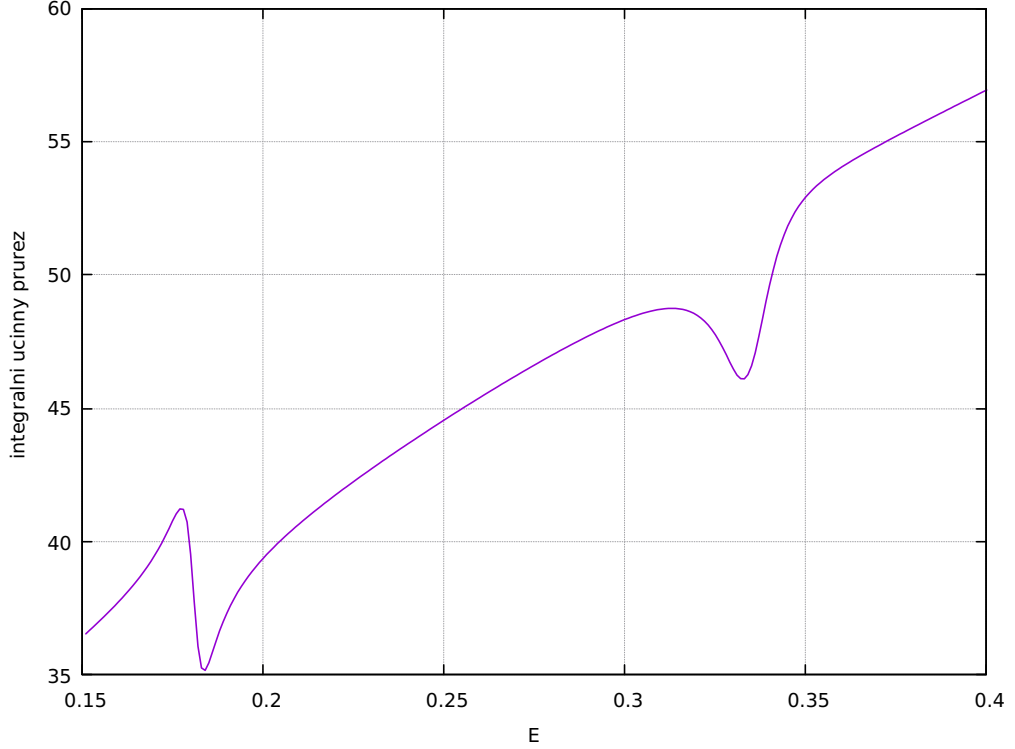
4.2 Fázová posunutí

Jiným přístupem k teorii rozptylu je přístup pomocí parciálních vln. Klíčovým objektem v teorii parciálních vln je S -matice, což je unitární matice, která umožňuje z nalétávající vlnové funkce spočítat rozptýlenou vlnovou funkci. V přístupu pomocí parciálních vln se vyplatí volit, že částice nalétává ve směru osy x , tj. nalétávající vlna je e^{ikx} . Tuto nalétávající vlnu jde (jak uvádí např. Harald Friedrich [5]) rozvinout do parciálních vln jako

$$e^{ikx} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(kr) e^{im\vartheta} = \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m \left(H_m^{(2)}(kr) + H_m^{(1)}(kr) \right) e^{im\vartheta}. \quad (4.6)$$

S -matice je konkrétně definována tak, že rozvoj vlnové funkce získané řešením rozptylové úlohy do parciálních vln vypadá v asymptotice $r \rightarrow \infty$ takto

$$\psi = \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m \left(H_m^{(2)}(kr) + \sum_{m'=-\infty}^{\infty} S_{m m'} H_{m'}^{(1)}(kr) \right) e^{im\vartheta}. \quad (4.7)$$



Obrázek 4.3 Detail obrázku 4.2 v okolí rezonančních peaků

Vlnová funkce jde v asymptotice napsat jako součet rovinné a sférické vlny $\psi = e^{ikx} + \psi_{sc}$, kde ψ_{sc} je vlnová funkce odpovídající v asymptotice radiálně odcházející vlně, která byla získána řešením rozptylové úlohy metodou Fourierovy řady. Odečtením předchozích dvou rozvoju vznikne rozvoj ψ_{sc} , který vypadá takto

$$\psi_{sc} = \frac{1}{2} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m \left(\sum_{m'=-\infty}^{\infty} (S_{mm'} - \delta_{mm'}) H_{m'}^{(1)}(kr) \right) e^{im\vartheta}. \quad (4.8)$$

Vlnová funkce ψ_{sc} byla v průběhu řešení rozvinuta jako

$$\psi_{sc}(r, \vartheta) = \sum_m \psi_m e^{im\vartheta}, \quad (4.9)$$

Srovnáním koeficientů obou rozvoju vyjde

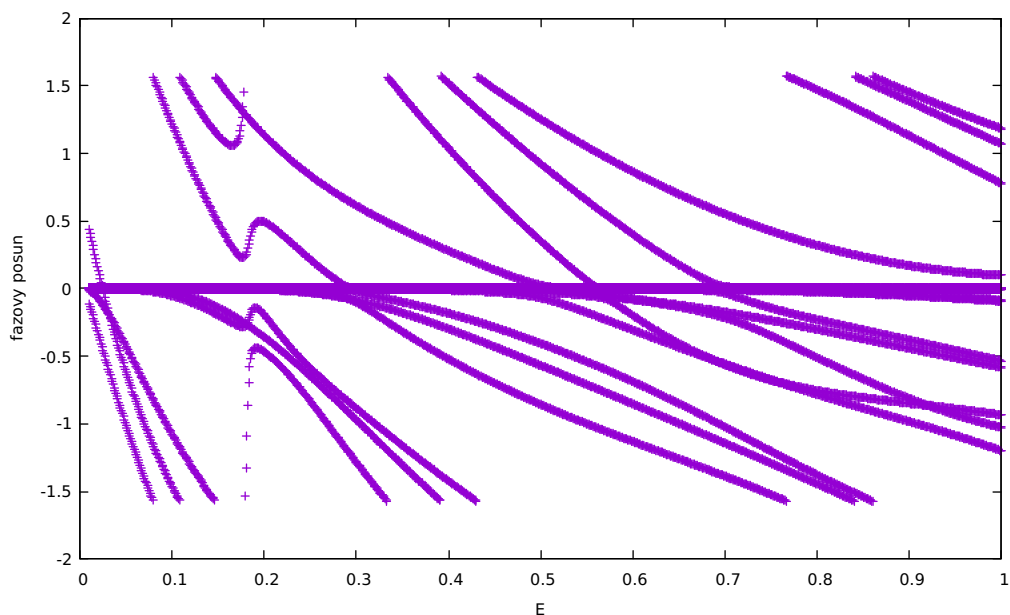
$$\frac{1}{2} i^m \sum_{m'=-\infty}^{\infty} (S_{mm'} - \delta_{mm'}) H_{m'}^{(1)}(kr) = \psi_m. \quad (4.10)$$

Při formulaci úlohy pomocí metody parciálních vln u metody Fourierovy řady se ukázalo být obzvláště výhodné vyřešit úlohu pro každou parciální vlnu zvlášť a tato řešení sčítat. To znamená, že koeficienty rozvoje vlnové funkce ψ_m budou vyjádřeny jako součet příspěvků od jednotlivých parciálních vln

$$\psi_m = \sum_{m'} \psi_{mm'}, \quad (4.11)$$

kde symbol $\psi_{mm'}$ značí příspěvek o m' té parciální vlny k m tému koeficientu rozvoje ψ_{sc} do Fourierovy řady. Srovnáním obou rozvoju v proměnné m' vyjde

$$S_{mm'} = \delta_{mm'} + \frac{2\psi_{mm'}}{i^m H_{m'}^{(1)}(kr)}. \quad (4.12)$$



Obrázek 4.4 Zobrazení fázových posunů pro modulo 0. Hodnoty parametrů modelu odpovídají tabulce 2.1

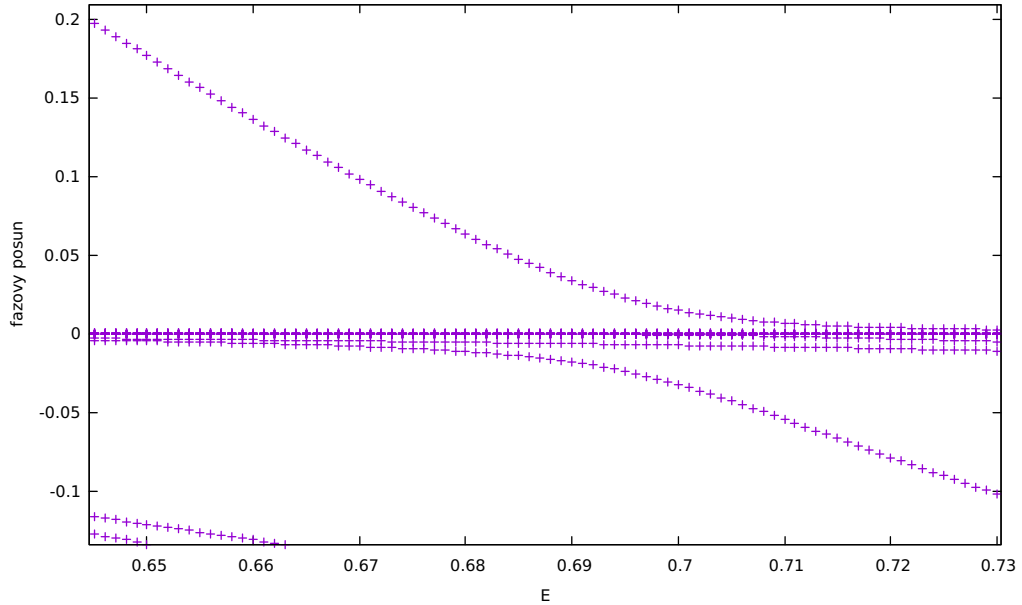
Toto je vztah pro maticové elementy S -matice a pomocí tohoto vztahu byla S -matice spočtena. Za $\psi_{mm'}$ byla dosazována hodnota v $N - 1$ bodě sítě, na níž byla diskretizována radiální rovnice. Hankelova funkce byla vyhodnocena pro r odpovídající tomuto bodu sítě.

Výsledná S -matice obsahuje veškeré informace o asymptotice zkoumaného rozptylu (jde z ní spočíst amplituda rozptylu) a jsou od ní odvozeny další veličiny jako fázová posunutí a časová zpoždění. V případě sféricky symetrického potenciálu by S -matice byla diagonální v bázi parciálních vln, v níž byla zkonstruována. V tomto případě by pro fázové posuny platil vztah $S_{mm} = e^{2i\varphi_m}$, kde φ_m je fázový posun m té parciální vlny. V případě modelového potenciálu, který není sféricky symetrický, je zapotřebí použít obecnější definici

$$s_j = e^{2i\varphi_j}, \quad (4.13)$$

kde s_j je j té vlastní číslo S -matice. Tato obecnější definice bohužel neumožňuje asociovat jednotlivá fázová posunutí s konkrétními parciálními vlnami. Pomocí tohoto vztahu byly vypočteny konkrétní fázové posuny. Díky tomu, že modelový potenciál má symetrie dané grupou C_{3v} , tak se S -matice rozpadne na tři bloky odpovídající zbytku po dělení třemi 0, 1 a 2. Má tím pádem smysl analyzovat fázové posuny příslušející jednotlivým zbytkům po dělení třemi zvlášť. Dokonce díky té symetrii platí, že fázová posunutí u zbytku 1 jsou stejná jako fázová posunutí u zbytku 2, a tím pádem má smysl analyzovat jen případ, kdy je zbytek 0 a případ kdy je zbytek 1.

Nejprve byly vypočteny fázové posuny odpovídající zbytku po dělení třemi 0. Výsledné fázové posuny jsou v závislosti na energii zobrazeny na obrázku 4.4. Na tomto obrázku je vidět zobrazení fázových posunů, nicméně není to dokonalé zobrazení, neboť zde jsou všechny fázové posuny v intervalu $(-\pi; \pi)$. Lze tudíž odhadovat, kdy dochází k přetečení přes krajní hodnotu intervalu. Dále by bylo vhodné jednotlivé fázové posuny "třídít" - dát k sobě ty které budou tvořit spojitou



Obrázek 4.5 Typický případ situace, kdy dochází k situaci vypadající téměř jako křížení. Takovéto chování znemožňuje efektivní třízení fázových posunů.

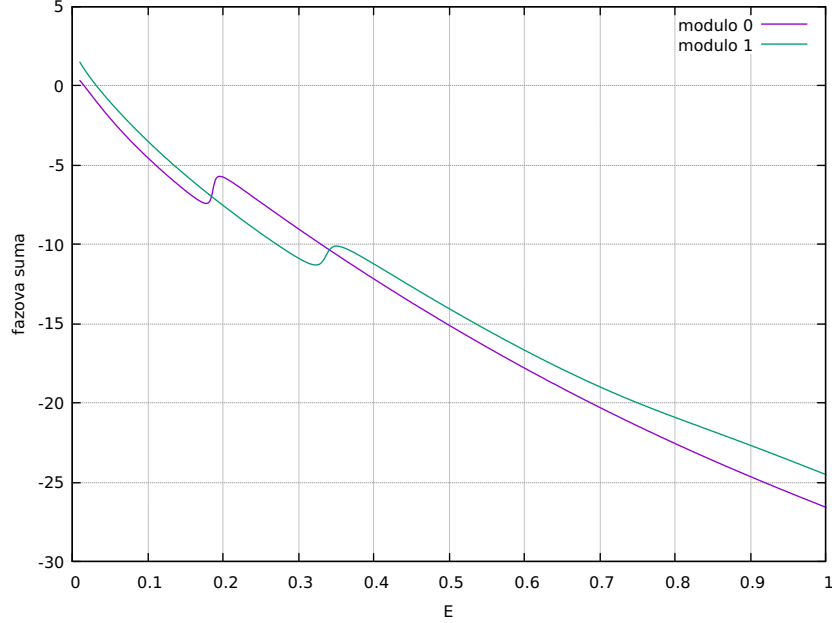
křivku. Jistý pokus o toto třízení byl sice proveden, tato snaha ale bohužel narážela na problém, jak řešit případy vypadající téměř jako křížení. Typický případ tohoto téměř křížení je zobrazen na obrázku 4.5. Výskyt takovýchto útvarů je patrně speciální případ jevu, který je obecně znám pod jmény jako no crossing theorem případně von Neumann-Wignerův jev, tento jev pak zmiňovali například již von Neumann s Wignerem v publikaci [10]. Tento jev a skutečnost, že stejně nemá smysl jednotlivé fázové posuny asociovat s jednotlivými parciálními vlnami, vedly k rozhodnutí zkoumat namísto jednotlivých fázových posunů takzvanou fázovou sumu definovanou jako součet všech fázových posunů s daným zbytkem po dělení třemi. Závislost této fázové sumy na energii je zachycena v grafu na obrázku 4.6. V tomto grafu si lze všimnout, že fázová suma klesá s energií a to všude až na 2 oblasti, kde dochází k rychlému nárůstu fázové sumy o π . Tyto oblasti budou odpovídat rezonancím a parametry těchto rezonancí budou hlouběji zkoumány v oddílu věnovaném rezonancím. Ještě je dobré poznamenat, že fázová suma, tak jak je zobrazená na obrázku 4.6 nespĺňuje standartní normalizaci založenou na Levinsonově teorému, nicméně pro studium rezonancí to nevádí, neboť se jedná pouze o přičtení aditivní konstanty.

S fázovými posunutími pak souvisejí časová zpoždění. Pro potenciál bez sférické symetrie existují dva přístupy, jak zavést časová zpoždění. Jedná se o takzvané partial time delays a proper time delays. Podrobnému zavedení obou těchto přístupů a diskuzi jejich rozdílů se (v 1D případě) věnuje článek [1]. V tomto článku jsou partial time delays definovány jako

$$\tilde{\tau}_j = 2 \frac{d}{dE} \varphi_j \quad (4.14)$$

a proper time delays jsou v článku [1] definovány jako vlastní čísla Smithovy matice dob života Q , která je tamtéž definována takto

$$Q = -iS^\dagger \frac{d}{dE} S. \quad (4.15)$$



Obrázek 4.6 Závislost fázové sumy na energii. Parametry modelu odpovídají tabulce 2.1. Fázová suma není normalizována na základě Levinsonova teorému.

Partial time delays pro modelový potenciál nepůjdou příliš dobře určit, jelikož v důsledku no crossing teorému nejdou dobře třídit jednotlivé fázové posuny. Přírozenou cestou jak zavést časová zpoždění se tím pádem ukazuje být spíše přístup proper time delays.

4.3 Rezonance

Ve zkoumaném rozptylu se na základě analýz účinného průřezu a fázové sumy vyskytují pro hodnoty parametrů odpovídající tabulce 2.1 dvě rezonance. Jedna z rezonancí je na energii přibližně 0.2 a druhá přibližně na energii 0.35. Klíčovými parametry rezonancí jsou obecně střední energie E_r na níž se rezonance vyskytuje a energienická šířka rezonance Γ .

Cílem je tím pádem pokusit se parametry rezonancí E_r a Γ najít. První způsob jak hledat parametry rezonancí je fitování závislosti účinného průřezu na energii (obrázek 4.3) křivkou odpovídající nějaké jednoduché funkci popisující pozadí plus Fanovou formulí popisující rezonanci (odvozením se zabývá Fanův článek [11]). Fanova formule vypadá takto

$$\sigma_F(q, E_r, \Gamma) = \frac{\left(q\frac{\Gamma}{2} + E - E_r\right)^2}{\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2 + (E - E_r)^2}. \quad (4.16)$$

Parametr q je znám jako Fanův faktor a jedná se o často velmi význačnou korekci na vliv pozadí. Výsledné hodnoty parametrů rezonancí získané fitováním Fanovy formule jsou uvedeny v tabulce 4.1, přičemž k fitování byla použita následující funkce s pozadím popsáním afinní funkcí

$$\sigma = aE + b + c_1\sigma_F(q_1, E_{r1}, \Gamma_1) + \sigma_F(q_2, E_{r2}, \Gamma_2). \quad (4.17)$$

parametr	1. rezonance	2. rezonance
E_r	$0.18138 \pm 9 \cdot 10^{-5}$	$0.3336 \pm 2 \cdot 10^{-4}$
Γ	0.0059 ± 0.0002	0.0146 ± 0.0003

Tabulka 4.1 Parametry rezonancí získané fitováním Fanových formulí. Chybami jsou myšleny nejistoty regrese.

parametr	1. rezonance	2. rezonance
E_r	$0.18692 \pm 5 \cdot 10^{-5}$	$0.33709 \pm 5 \cdot 10^{-5}$
Γ	0.0070 ± 0.0001	0.01645 ± 0.0001

Tabulka 4.2 Parametry rezonancí získané fitováním závislosti fázové sumy na energii. Chybami jsou myšleny nejistoty regrese.

Nejistoty uvedené v tabulce 4.1 mají význam nejistot regrese, které mohou být způsobeny tím, že afinní funkce není zcela dokonalým popisem pozadí, ale jen jeho dobrou aproximací. Fitování bylo provedeno na intervalu $[0.151; 0.4]$ a fitováno bylo celkem 250 bodů.

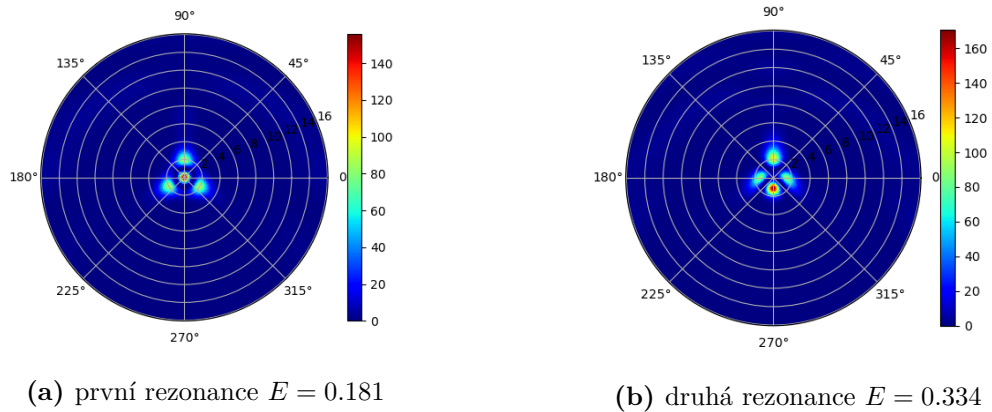
Jinou metodou studia rezonancí je hledání skoků o π v závislosti fázové sumy na energii (jedná se o závislosti na obrázku 4.6). Zde je dobré poznamenat, že jedna rezonance se vyskytuje v kanálech se zbytkem po dělení třemi 0 zatímco ta druhá v kanálech se zbytkem po dělení třemi 1. Parametry rezonancí byly hledány fitováním závislosti funkcí

$$\sum_j \varphi_j = aE + b + \arctan\left(\frac{\frac{\Gamma}{2}}{E_r - E}\right). \quad (4.18)$$

Získané hodnoty parametrů jsou pak uvedeny v tabulce 4.2. Nejistotami jsou opět myšleny chyby regrese. První rezonance byla fitována na intervalu $[0.12; 0.25]$, kde bylo fitováno celkem 131 bodů. U druhé rezonance byl interval $[0.29; 0.41]$ a bylo na něm 121 bodů.

Parametry rezonancí byly nalezeny celkem dvěma různými metodami. Zajímavé je srovnání obou těchto metod. Z dat uvedených v tabulkách 4.1 a 4.2 lze nahlédnout, že parametry rezonancí jsou v přibližné shodě. Bohužel ale rozdíly mezi hodnotami v obou tabulkách jsou větší než chyby regresí. To znamená, že zde musí být ještě nějaká další chyba, která vstupuje do hry. Touto chybou může být například to, že jak Fanova formule tak i vztah pro fázovou sumu jsou pouze aproximativní a může se jednat o chyby této aproximace. Jiným kandidátem může být to, že v obou případech bylo pozadí odhadováno afinní funkcí a tento odhad může v obou případech způsobit jinou chybu.

Ještě může být zajímavé podívat se, jak vypadají vlnové funkce (respektive hustoty pravděpodobnosti) pro takové energie, při nichž nastávají rezonance. Tyto hustoty pravděpodobnosti si lze prohlédnout na obrázku 4.7 (nalétávající funkcí je rovinná vlna přicházející shora e^{-iky}). Je dobré tyto hustoty pravděpodobnosti srovnat s obvyklým případem, kdy energie neodpovídá rezonanci. Hustotu pravděpodobnosti pro nerezonanční energie si lze prohlédnout na obrázku 2.3. Při srovnání obrázků si lze všimnout toho, že pro obyčejné (nerezonanční) energie je hustota pravděpodobnosti z velké části rozprostřena nahoře v oblasti před vstupem do trojúhelníku. Naproti tomu u rezonančních energií jde pozorovat velmi



Obrázek 4.7 Hustoty pravděpodobnosti odpovídající vlnovým funkcím při energiích odpovídajících rezonančním energiím. Rozptylovaná částice nalétává seshora. Parametry modelu odpovídají parametrům uvedeným v tabulce 2.1.

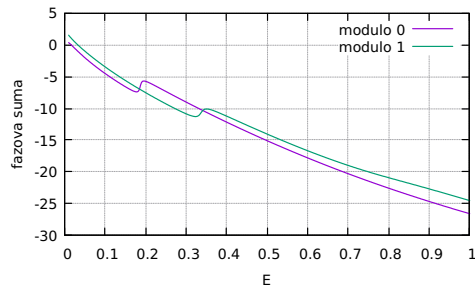
ostrá maxima uvnitř trojúhelníku, přičemž tato maxima nabývají výrazně vyšších hodnot než maximum u obyčejné energie. U rezonanční energie je rovněž mimo oblast trojúhelníku hustota pravděpodobnosti zanedbatelná oproti maximům.

Další zajímavou otázkou ohledně rezonancí je proč byly v modelu pozorovány pouze dvě rezonance. Mohou v rámci zkoumaného modelu existovat i další rezonance? Odpověď zní, že určitě mohou existovat i další rezonance a to takové rezonance, které se nacházejí na vyšších energiích a jsou natolik široké, že se je nepodařilo zachytit.

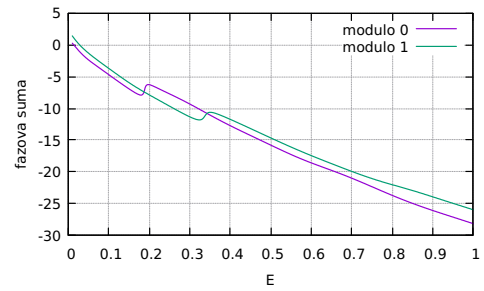
4.4 Srovnání numerických metod

Poslední otázkou je otázka, zdali výsledky počítané metodou R matice odpovídají výsledkům počítaným metodou Fourierovy řady. Nejdůležitějším grafem je pravděpodobně graf závislosti fázové sumy na energii 4.6. Proto byla tato závislost vypočtena rovněž metodou R -matice. Pomocí R -maticového postupu byla nejprve spočtena S -matice přesně podle postupu uvedeného v kapitole věnované R -matici. Numerickou diagonalizací S -matice byla následně nalezena fázová posunutí a jejich sečtením byly nalezeny fázové sumy odpovídající příspěvkům od parciálních vln se zbytkem po dělení třemi 0 a se zbytkem 1.

Fázové sumy počítané oběma metodami jsou zobrazeny vedle sebe na obrázku 4.8. Na tomto obrázku lze vidět, že křivky vypadají podobně u obou použitých metod. Vypíchnout jde skutečnost, že obě metody nacházejí rezonance na téměř stejných energiích. Co je nicméně zářezující, je skutečnost, že konkrétní hodnoty fázové sumy se pro obě metody mírně liší, což jde nahlédnout například na skutečnosti, že křivka pro modulo 1 končí u metody Fourierovy řady těsně nad hodnotou -25 zatímco u metody R -matice těsně pod touto hodnotou. Tato nesrovnalost může být dána tím, že u metody Fourierovy řady byla S -matice vyhodnocována na už předposledním budě diskretizační síti, což odpovídá $r = 15.84$, zatímco u metody R -matice byla S -matice vyhodnocována na hranici R -maticové koule, což odpovídá $r = 16$. Jiným možným vysvětlením může být to, že v obou případech se vyskytují numerické chyby. U metody Fourierovy řady jsou dány primárně diskretizací radiální rovnice a velikostí diskretizačního kroku



(a) Počítáno metodou Fourierovy řady.



(b) Počítáno metodou R -matice.

Obrázek 4.8 Závislost fázové sumy na energii. Fázová suma je dělená na příspěvky pocházející od parciálních vln s kvantovým číslem m se zbytkem po dělení třemi 0 a zbytkem 1. Parametry modelu odpovídají parametrům uvedeným v tabulce 2.1.

h. U metody R -matice se jedná hlavně o oříznutí báze v níž je diagonalizován Hamiltonián s Blochovým členem na energii E_{max} . Navíc díky tomu, že fázová suma je vlastně součtem 27 fázových posunutí, tak zde bude tato chyba přibližně 27 krát větší než u jednoho fázového posunutí.

Celkem jde nicméně na základě obrázku 4.8 tvrdit, že výsledky spočtené oběma metodami jsou v dobré shodě. Toto tvrzení je založeno na tom, že jak tvar křivky tak i poloha rezonancí jsou v obou případech téměř stejné.

Závěr

Tato práce se věnovala problému rozptylu v modelovém potenciálu se symetrií danou grupou C_{3v} . Tento modelový potenciál odpovídal Henon-Heilesovu potenciálu přenásobenému Gaussovou funkcí.

Nejprve byl studován klasický případ, kde byly pomocí symplektického integrátoru třetího řádu počítány trajektorie rozptylované částice. Pro tyto trajektorie bylo zkoumáno, kterým údolím vyletí z oblasti trojúhelníka v závislosti na počáteční vzdálenosti částice od osy a na počáteční hybnosti částice. V této závislosti se vyskytly pásy zakázaných hybností, pro něž vždy docházelo k návratu částice zpět. Vznik těchto pásů byl uspokojivě vysvětlen. Dále bylo pozorováno a alespoň trochu zkoumáno chaotické chování, které v modelu může nastávat pro vhodně zvolené počáteční podmínky. Toto chaotické chování se odráží v tom, že mapa závislosti toho kterým údolím částice vylétává v závislosti na počátečních podmínkách má fraktální strukturu.

Hlavním cílem této práce bylo nicméně řešení kvantového případu. Pro řešení kvantového případu byly použity dvě numerické metody. První numerická metoda byla založena na rozvoji vlnové funkce do Fourierovy řady v úhlové proměnné a následné diskretizaci a numerickém řešení zbývajících radiálních rovnic. Druhou použitou numerickou metodou byla metoda R -matice založená na uzavření problému do koule, diagonalizaci Hamiltoniánu uvnitř této koule a následném napojování na řešení volné částice na hranici té zvolené koule. Oběma metodami se podařilo úlohu vyřešit, čímž byl cíl řešení kvantového případu naplněn.

Následně byly ještě zkoumány některé fyzikální vlastnosti získaného řešení. Jedná se konkrétně o diferenciální i integrální účinný průřez v závislosti na energii a fázová posunutí respektive fázové sumy (angl. eigenphase sum) rovněž v závislosti na energii. V modelu byly rovněž pozorovány dvě rezonance a tyto rezonance byly hlouběji zkoumány. Tím je myšleno to, že byly dvěma různými metodami nalezeny jejich parametry, přičemž obě metody daly srovnatelné výsledky.

Na závěr byly srovnány závislosti fázové sumy na energii vypočtené oběma numerickými metodami a obě závislosti byly v dobré shodě, zejména jde vypíchnout fakt, že energie na nichž se vyskytují rezonance vycházely v obou případech srovnatelně. to znamená, že úlohu se podařilo vyřešit dvěma různými numerickými metodami a jednotlivá řešení dávají výsledky, které jsou spolu v dobré shodě.

Literatura

- [1] U. Saalman a J. M. Rost. „Time delays in anisotropic systems“. In: *Canadian Journal of Physics* 0 (2024). DOI: 10.1139/cjp-2023-0245.
- [2] Jesús M Seoane a Miguel A F Sanjuán. „New developments in classical chaotic scattering“. In: *Reports on Progress in Physics* 76.1 (pros. 2012), s. 016001. DOI: 10.1088/0034-4885/76/1/016001. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/76/1/016001>.
- [3] S. Koonin. *Computational Physics*. Benjamin/Cummings Publishing Company, 1986. ISBN: 978-0201150445.
- [4] Ronald D. Ruth. „A Canonical Integration Technique“. In: *IEEE Transactions on Nuclear Science* 30.4 (1983), s. 2669–2671. DOI: 10.1109/TNS.1983.4332919.
- [5] Harald Friedrich. *Scattering theory*. Springer, 2013. ISBN: 978-3662485255.
- [6] J. R. Taylor. *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*. Wiley, 1972. ISBN: 978-0486450131.
- [7] F.W.J. Olver, National Institute of Standards a Technology (U.S.) *NIST Handbook of Mathematical Functions Hardback and CD-ROM*. Cambridge University Press, 2010. ISBN: 9780521192255. URL: <https://books.google.cz/books?id=3I15Ph1Qf38C>.
- [8] P. G. Burke. *R-Matrix Theory of Atomic Collisions*. Springer Series on Atomic, Optical, a Plasma Physics, 2011. ISBN: 978-3-642-15930-5.
- [9] Adam Cahaya. „Radial wave function of 2D and 3D quantum harmonic oscillator“. In: *Al-Fiziya: Journal of Materials Science, Geophysics, Instrumentation and Theoretical Physics* 5 (čvn. 2023), s. 95–100. DOI: 10.15408/fiziya.v5i2.26172.
- [10] J. von Neumann a E. P. Wigner. „Über merkwürdige diskrete Eigenwerte“. In: *The Collected Works of Eugene Paul Wigner: Part A: The Scientific Papers*. Ed. Arthur S. Wightman. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1993, s. 291–293. ISBN: 978-3-662-02781-3. DOI: 10.1007/978-3-662-02781-3_19. URL: https://doi.org/10.1007/978-3-662-02781-3_19.
- [11] U. Fano. „Effects of Configuration Interaction on Intensities and Phase Shifts“. In: *Phys. Rev.* 124 (6 pros. 1961), s. 1866–1878. DOI: 10.1103/PhysRev.124.1866. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.124.1866>.