

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Pavel Brožek

Analytické prodloužení ve vazbové konstantě

Ústav teoretické fyziky MFF UK

Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Jiří Horáček, DrSc.

Studijní program: Obecná fyzika

2010

Rád bych poděkoval vedoucímu bakalářské práce prof. RNDr. Jiřímu Horáčkovi, DrSc. za odborné vedení a čas, který mi věnoval.

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce a jejím zveřejňováním.

V Praze dne 27. května 2010

Pavel Brožek

Obsah

0.1	Úvod	5
1	Seznámení s metodou analytického prodloužení a použitým modelem	6
1.1	Teoretický úvod	6
1.2	Potenciál dvou δ -funkcí	8
1.3	Analytické chování funkce $\lambda(\kappa)$	11
2	Výpočet rezonanční energie Padé aproximací	19
2.1	Rezonance – s-vlna ($l = 0$)	19
2.2	Rezonance – p-vlna ($l = 1$)	24
2.3	Rezonance – d-vlna ($l = 2$)	29
3	Závěr	34
	Literatura	35

Název práce: Analytické prodloužení ve vazbové konstantě
Autor: Pavel Brožek
Katedra (ústav): Ústav teoretické fyziky MFF UK
Vedoucí bakalářské práce: prof. RNDr. Jiří Horáček, DrSc.
e-mail vedoucího: horacek@mbox.troja.mff.cuni.cz

Abstrakt: V předložené práci studujeme použití metody analytického prodloužení ve vazbové konstantě pro určení rezonančních energií a šířek rezonančních stavů. Analytické prodloužení je provedeno metodou statistické Padé aproximace. V práci je analyticky vyřešen rozptyl na jednoduchém sféricky symetrickém potenciálu dvou δ -funkcí a jsou zkoumány analytické vlastnosti řešení. Pro jistý obor hodnot vazbové konstanty λ , v němž existují vázané stavy, jsou vypočítána přesná data, která jsou poté použita pro výpočet rezonančních energií a šířek rezonancí při $\lambda = 0$. Takto určené energie jsou porovnány s přesnými energiemi a jejich přesnost je diskutována vzhledem ke stupni Padé aproximace a vzhledem k charakteru dat použitých při aproximaci. Výpočty jsou provedeny pro parciální vlny s, p a d.

Klíčová slova: Analytické prodloužení, Padé aproximace, rezonanční energie

Title: Analytic continuation in coupling constant
Author: Pavel Brožek
Department: Institute of Theoretical Physics, Faculty of Mathematics and Physics, Charles University
Supervisor: prof. RNDr. Jiří Horáček, DrSc.
Supervisor's e-mail address: horacek@mbox.troja.mff.cuni.cz

Abstract: In the thesis we study the application of the analytic continuation in the coupling constant method for determination of resonance energies and widths of resonance states; the analytical continuation is made by the statistical Padé approximation method. Scattering on spherically symmetric potential of two δ -functions is solved analytically and analytical properties of the solution are investigated. Exact data are computed for a range of coupling constant λ , where bound states exist, and these data are then used to calculate the resonance energies and widths of the resonances at $\lambda = 0$. The calculated energies are compared with exact energies and their accuracy is discussed in terms of the order of the Padé approximation and in terms of the character of the data used for the approximation. Calculations are done for s, p and d partial waves.

Keywords: Analytic continuation, Padé approximation, resonance energy

0.1 Úvod

Metoda analytického prodloužení ve vazbové konstantě je jedna z několika metod vyvinutých v posledních desetiletích pro počítání rezonančních energií. Rezonance například hrají důležitou roli při přenosu energie mezi elektrony a molekulami. Znalost rezonančních energií je proto důležitá v různých odvětvích fyziky. Určit rezonanční energii a šířku rezonance je přitom obecně poměrně komplikované, protože vlnová funkce rezonance není kvadraticky integrabilní.

V současnosti existují komerční programy umožňující vypočítat energie vázaných stavů. Pokud např. budeme chtít určit rezonanční energii pro nějakou danou molekulu, můžeme v programu zvětšit kladný náboj jader, tím se potenciál stane přitažlivějším a rezonance se přemění na vázaný stav, jehož energii už jsme schopni pomocí programu dobře spočítat. Metoda analytického prodloužení nám pak poskytuje možnost, jak z těchto dat určit rezonanční energii a šířku rezonance pro správné náboje jader. Zkoumání metody analytického prodloužení na reálných fyzikálních modelech by bylo velmi komplikované. V této práci se proto budeme zabývat jednoduchým modelem sestaveným z Diracových δ -funkcí.

Kapitola 1

Seznámení s metodou analytického prodloužení a použitým modelem

1.1 Teoretický úvod

V této práci se budeme zabývat výpočtem energie a šířky rezonancí jednoduchého sféricky symetrického potenciálu $V(r)$. Budeme předpokládat, že tento potenciál bude nulový pro $r > R$, kde R je dostatečně velké. Řešení Schrödingerovy rovnice odpovídající l -té parciální vlně proto bude mít pro $r \rightarrow \infty$ asymptotiku

$$\psi_l(r) \approx N(e^{-ikr} + S_l(k)e^{ikr}), \quad (1.1)$$

kde N je normalizační konstanta, $k^2 = E$ je energie odpovídajícího stavu a funkce $S_l(k)$ je element S-matice. Póly funkce $S_l(k)$ na kladné imaginární ose ($k = i\kappa$, $\kappa > 0$) nazýváme vázanými stavy, jejich vlnová funkce bude mít pro $r \rightarrow \infty$ tvar

$$\psi_l(r) \approx e^{-\kappa r}. \quad (1.2)$$

Póly na záporné imaginární ose ($k = -i\kappa$, $\kappa > 0$) nazýváme virtuálními stavy, jejich vlnová funkce bude mít pro $r \rightarrow \infty$ tvar

$$\psi_l(r) \approx e^{\kappa r}, \quad (1.3)$$

a póly v bodech $k = k_1 - ik_2$, $k_1, k_2 > 0$ nazýváme rezonančními stavy, v tomto případě bude mít vlnová funkce pro $r \rightarrow \infty$ tvar

$$\psi_l(r) \approx e^{ik_1 r} e^{k_2 r}. \quad (1.4)$$

Vlnová funkce vázaných stavů tedy s r jdoucím do nekonečna exponenciálně klesá k nule, v případě virtuálních stavů exponenciálně roste do nekonečna, u rezonancí pak roste vlnová funkce exponenciálně do nekonečna a ještě periodicky mění svou fázi.

Vázaným a virtuálním stavům odpovídá reálná záporná hodnota energie E . U rezonancí však energie nabývá komplexní hodnoty

$$E = E_R - \frac{i}{2}\Gamma, \quad (E_R = k_1^2 - k_2^2, \Gamma = 4k_1k_2). \quad (1.5)$$

Určit energii rezonančních stavů je ve srovnání s určováním energií vázaných stavů mnohem obtížnější. Spočítat energii vázaných stavů dnes většinou není problém. Bylo by tedy výhodné, kdybychom nějakým způsobem uměli využít znalosti energií vázaných stavů k výpočtu energií a šířek rezonancí. Tuto možnost nám poskytuje metoda analytického prodloužení, kterou se nadále budeme zabývat. Tato metoda spočívá v následujícím [1]:

Předpokládejme, že máme potenciál $V(r)$ a chceme určit rezonanční energii E_R a šířku rezonance Γ pro nějaký jeho rezonanční stav. K potenciálu $V(r)$ přidáme přitažlivý potenciál $\lambda U(r)$

$$V(r) \rightarrow V(r) + \lambda U(r), \quad (1.6)$$

jeho velikost je charakterizována kladným parametrem λ . Při zvětšování parametru λ mohou některé rezonance přejít na vázané stavy. Energie vzniklého vázaného stavu je možné určit pro různé hodnoty parametru λ , známe tak chování funkce $k(\lambda)$ na určitém intervalu parametru λ . Tato data se poté metodou analytického prodloužení extrapolují až do hodnoty $\lambda = 0$, která nás především zajímá.

Podle metody klasického analytického prodloužení ve vazbové konstantě popsané v [2] a [3] by se analytické prodloužení mělo provádět v nové proměnné $\sqrt{\lambda - \lambda_0}$, přitom λ_0 je hodnota λ , při které se dva rezonanční stavy mění na vázaný a virtuální stav, případně na dva virtuální stavy při $l = 0$. Hodnota λ_0 musí být určena z dat před prováděním aproximace. Nutnost aproximace v této nové proměnné je dána limitním chováním pro $k \rightarrow k(\lambda_0)$, které odpovídá $k(\lambda) = c_1 + c_2\sqrt{\lambda - \lambda_0}$, kde c_1 a c_2 jsou vhodné konstanty (c_1 je přitom pro $l \neq 0$ rovno nule).

Nepříjemnosti vzniklé nutností určit nejprve hodnotu λ_0 se můžeme vyhnout tím, že místo funkce $k(\lambda)$ budeme aproximovat inverzní funkci $\lambda(k)$. Tuto funkci můžeme dobře v okolí $k = 0$ aproximovat mocninnou řadou v k i pro nenulové l , v limitě $k \rightarrow 0$ bude totiž závislost odpovídat $\lambda(k) = \lambda_0 + \left(\frac{k}{c_2}\right)^2$. Analytickým prodloužením funkce $\lambda(k)$ pak můžeme najít k příslušející rezonanci potenciálu $V(r)$ jako řešení rovnice $\lambda(k) = 0$ a spočítat tak rezonanční energii E_R a šířku rezonance Γ podle vzorce (1.5).

Pro analytické prodloužení použijeme metodu statistické Padé aproximace [4]. Padé aproximací $f^{N,M}(x)$ funkce $f(x)$ je myšlena funkce

$$f(x) \approx f^{[N,M]}(x) = \frac{P_N(x)}{Q_M(x)}, \quad (1.7)$$

kde funkce $P_N(x)$ a $Q_M(x)$ jsou polynomy

$$P_N(x) = \sum_{i=0}^N p_i x^i, \quad Q_M(x) = 1 + \sum_{i=1}^M q_i x^i, \quad p_i, q_i \in \mathbb{R}, \quad (1.8)$$

Padé aproximace stupně N, M tedy odpovídá aproximaci racionální lomenou funkcí, kde stupeň čitatele a jmenovatele je N a M . Při statistické Padé aproximaci jsou koeficienty aproximace určeny minimalizací funkcionálu χ^2 ,

$$\chi^2 = \sum_{j=1}^J \frac{1}{\varepsilon_j^2} \left| \frac{P_N(x_j)}{Q_M(x_j)} - f_j \right|^2, \quad (1.9)$$

kde x_j a f_j jsou naměřené dvojice dat s chybou ε_j a J je jejich počet.

Na přesnost určení rezonančních parametrů má vliv množství a charakter dat, která pro aproximaci použijeme. V této práci se budeme zabývat právě tímto vlivem. Přesnost určení energie Padé aproximací získáme na základě srovnání s přesnou hodnotou energie, kterou budeme znát díky jednoduchosti zkoumaného modelu.

1.2 Potenciál dvou δ -funkcí

V této části budeme zkoumat řešení stacionární Schrödingerovy rovnice s jednoduchým sféricky symetrickým potenciálem daným dvěma δ -funkcemi

$$V(r) = -\frac{\lambda}{a}\delta(r-a) + \frac{\sigma}{b}\delta(r-b), \quad (1.10)$$

kde a, b, λ, σ jsou kladné konstanty a $a < b$. Označíme-li

$$k = \sqrt{E}, \quad (1.11)$$

bude mít Schrödingerova rovnice pro parciální vlnu l tvar

$$-\frac{d^2\psi_l(r)}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\psi_l(r) + V(r)\psi_l(r) = k^2\psi_l(r). \quad (1.12)$$

Okrajové podmínky volíme

$$\psi_l(0) = 0, \quad \frac{\psi'_l(R)}{\psi_l(R)} = ik, \quad (1.13)$$

pro $R \rightarrow \infty$ [5].

Situaci můžeme zjednodušit vyloučením parametru a . Předpokládejme, že $\psi_l(r)$ řeší rovnici (1.12). Definujme novou funkci

$$\bar{\psi}_l(r) := \psi_l(ar). \quad (1.14)$$

Tato funkce řeší rovnici

$$-\frac{d^2\bar{\psi}_l(r)}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\bar{\psi}_l(r) + \bar{V}(r)\bar{\psi}_l(r) = \bar{k}^2\bar{\psi}_l(r), \quad (1.15)$$

kde

$$\bar{V}(r) = -\lambda\delta(r-1) + \frac{\sigma}{b}\delta(r-\bar{b}), \quad \bar{b} = \frac{b}{a}, \quad \bar{k} = ak, \quad (1.16)$$

jak se můžeme přesvědčit výpočtem:

$$-\frac{d^2\bar{\psi}_l(r)}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\bar{\psi}_l(r) + \bar{V}(r)\bar{\psi}_l(r) =$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{d^2\psi_l(ar)}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\psi_l(ar) + \bar{V}(r)\psi_l(ar) = \\
&= a^2 \left[-\frac{d^2\psi_l(ar)}{d(ar)^2} + \frac{l(l+1)}{(ar)^2}\psi_l(ar) + \left(-\frac{\lambda}{a^2}\delta(r-1) + \frac{\sigma}{a^2b}\delta(r-\bar{b}) \right) \psi_l(ar) \right] = \\
&= a^2 \left[-\frac{d^2\psi_l(ar)}{d(ar)^2} + \frac{l(l+1)}{(ar)^2}\psi_l(ar) + \left(-\frac{\lambda}{a}\delta(ar-a) + \frac{\sigma}{b}\delta(ar-b) \right) \psi_l(ar) \right] = \\
&= a^2(k^2\psi_l(ar)) = \\
&= \bar{k}^2\bar{\psi}_l(r).
\end{aligned}$$

Obdobně každému řešení $\bar{\psi}_l(r)$ rovnice (1.15) odpovídá řešení $\psi_l(r) = \bar{\psi}_l\left(\frac{r}{a}\right)$ rovnice (1.12). Najdeme-li tedy řešení jednodušší rovnice (1.15), snadno od něj můžeme přejít k řešení rovnice (1.12). Proto v dalším textu budeme řešit pouze rovnici (1.15), kde už pro jednodu- chost nebudeme psát pruhy. Závislost k (resp. energie $E = k^2$) na parametrech potenciálu $k(a, b, \lambda, \sigma)$ (resp. $E(a, b, \lambda, \sigma)$) tedy splňuje následující vztah:

$$k(a, b, \lambda, \sigma) = \frac{1}{a}k\left(1, \frac{b}{a}, \lambda, \sigma\right) \quad \text{resp.} \quad E(a, b, \lambda, \sigma) = \frac{1}{a^2}E\left(1, \frac{b}{a}, \lambda, \sigma\right). \quad (1.17)$$

Obecné řešení rovnice (1.15) na intervalech $(0, 1)$, $(1, b)$ a $(b, +\infty)$ můžeme zapsat pomocí Besselových funkcí J

$$\psi_l(r) = \sqrt{r} \left(C_1 J_{l+\frac{1}{2}}(kr) + C_2 J_{-(l+\frac{1}{2})}(kr) \right), \quad (1.18)$$

kde C_1 a C_2 jsou libovolné konstanty [6]. Označme

$$\psi_0(r) = \sqrt{\frac{\pi r}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(kr) \quad (1.19)$$

$$\psi_\infty(r) = \sqrt{\frac{\pi r}{2}} \left(J_{l+\frac{1}{2}}(kr) + i(-1)^{l+1} J_{-(l+\frac{1}{2})}(kr) \right) \quad (1.20)$$

řešení splňující okrajovou podmínku v nule resp. v nekonečnu podle (1.13). Dá se ukázat platnost rovnosti

$$\psi'_0(r)\psi_\infty(r) - \psi_0(r)\psi'_\infty(r) = -i, \quad (1.21)$$

již budeme v dalších výpočtech využívat.

Řešení rovnice (1.15) na intervalu $(0, +\infty)$ můžeme obecně psát

$$\psi_l(r) = \begin{cases} A\psi_0(r) & r \in (0, 1] \\ B\psi_0(r) + C\psi_\infty(r) & r \in (1, b] \\ D\psi_\infty(r) & r \in (b, +\infty), \end{cases} \quad (1.22)$$

kde konstanty A, B, C, D musí být takové, aby funkce byla v bodech 1 a b spojitá a její derivace měla skok odpovídající velikosti δ -funkcí. Z těchto podmínek dostáváme čtyři

rovnice

$$A\psi_0(1) = B\psi_0(1) + C\psi_\infty(1) \quad (1.23)$$

$$A\psi'_0(1) = B\psi'_0(1) + C\psi'_\infty(1) + \lambda A\psi_0(1) \quad (1.24)$$

$$B\psi_0(b) + C\psi_\infty(b) = D\psi_\infty(b) \quad (1.25)$$

$$B\psi'_0(b) + C\psi'_\infty(b) = D\psi'_\infty(b) - \frac{\sigma}{b}D\psi_\infty(b). \quad (1.26)$$

Vyloučením konstant A, B, C, D a použitím vztahu (1.21) dostaneme podmínku pro k v implicitním tvaru:

$$\lambda(k) = \frac{b + \sigma i\psi_0(b)\psi_\infty(b)}{bi\psi_0(1)\psi_\infty(1) + \sigma i\psi_0(1)\psi_\infty(b) [i\psi_0(b)\psi_\infty(1) - i\psi_0(1)\psi_\infty(b)]}. \quad (1.27)$$

Tato závislost nám umožňuje formulovat důležitou větu:

Věta 1. *Taylorův rozvoj funkce $\lambda(k)$ v nule neobsahuje liché mocniny do řádu $2l-1$ včetně.*

Důkaz. Při důkazu této věty nás nezajímá konkrétní tvar koeficientů rozvoje, zajímáme se pouze o to, které členy v rozvoji jsou nenulové. Zavedeme si proto značení, které usnadní zápis - každou mocninnou řadu sudou v proměnné k budeme značit symbolem S :

$$S = \sum_{i=0}^{\infty} a_{2i}k^{2i}, \quad a_{2i} \in \mathbb{C}. \quad (1.28)$$

Je zřejmé, že pro dvě takové řady S_1 a S_2 existují řady S_3, S_4 a S_5 takové, že platí

$$S_1 + S_2 = S_3 \quad (1.29)$$

$$S_1 \cdot S_2 = S_4 \quad (1.30)$$

$$k^{2j}S_1 = S_5, \quad j \in \mathbb{N}. \quad (1.31)$$

Nadále budeme vynechávat dolní indexy odlišující jednotlivé řady, každý symbol S tedy bude představovat obecně jinou řadu.

Přepíšme nejprve funkce $\psi_0(r)$ a $\psi_\infty(r)$ pomocí symbolu S :

$$\psi_0(r) = \sqrt{\frac{\pi r}{2}} \left(\frac{kr}{2}\right)^{l+\frac{1}{2}} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!\Gamma(l+\frac{1}{2}+i+1)} \left(\frac{kr}{2}\right)^{2i} = k^{l+\frac{1}{2}}S \quad (1.32)$$

$$\psi_\infty(r) = \sqrt{\frac{\pi r}{2}} \left(\frac{kr}{2}\right)^{l+\frac{1}{2}} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!\Gamma(l+\frac{1}{2}+i+1)} \left(\frac{kr}{2}\right)^{2i} + \quad (1.33)$$

$$+ \sqrt{\frac{\pi r}{2}} i(-1)^{l+1} \left(\frac{kr}{2}\right)^{-(l+\frac{1}{2})} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!\Gamma(-l-\frac{1}{2}+i+1)} \left(\frac{kr}{2}\right)^{2i} = \quad (1.34)$$

$$= k^{l+\frac{1}{2}}S + k^{-(l+\frac{1}{2})}S. \quad (1.35)$$

Součin funkcí $\psi_0(r_1)$ a $\psi_\infty(r_2)$ proto bude

$$\psi_0(r_1)\psi_\infty(r_2) = \left(k^{l+\frac{1}{2}}S\right) \left(k^{l+\frac{1}{2}}S + k^{-(l+\frac{1}{2})}S\right) = k^{2l+1}S + S. \quad (1.36)$$

Nyní vyjádříme pomocí S čitatele a jmenovatele výrazu (1.27).

$$b + \sigma i \psi_0(b)\psi_\infty(b) = S + k^{2l+1}S + S = k^{2l+1}S + S \quad (1.37)$$

$$bi\psi_0(1)\psi_\infty(1) + \sigma i \psi_0(1)\psi_\infty(b) [i\psi_0(b)\psi_\infty(1) - i\psi_0(1)\psi_\infty(b)] = \quad (1.38)$$

$$= k^{2l+1}S + S + (k^{2l+1}S + S) (k^{2l+1}S + S + k^{2l+1}S + S) = \quad (1.39)$$

$$= k^{2l+1}S + S + (k^{2l+1}S + S) (k^{2l+1}S + S) = \quad (1.40)$$

$$= k^{2l+1}S + S + k^{2l+1}S + S = \quad (1.41)$$

$$= k^{2l+1}S + S \quad (1.42)$$

Funkce $\lambda(k)$ vyjádřená pomocí symbolu S vypadá následovně:

$$\lambda(k) = \frac{k^{2l+1}S + S}{k^{2l+1}S + S}. \quad (1.43)$$

Podrobným výpočtem se dá ukázat, že absolutní člen jmenovatele je nenulový, můžeme proto psát

$$\lambda(k) = \frac{k^{2l+1}S + S}{1 - (k^{2l+1}S + k^2S)} = \quad (1.44)$$

$$= (k^{2l+1}S + S) \sum_{i=0}^{\infty} (k^{2l+1}S + k^2S)^i = \quad (1.45)$$

$$= (k^{2l+1}S + S) (k^{2l+1}S + S) = \quad (1.46)$$

$$= k^{2l+1}S + S, \quad (1.47)$$

tím je důkaz dokončen. □

Ze způsobu odvození funkce $\lambda(\kappa)$ a z postupu důkazu věty 1 bychom mohli očekávat, že věta bude platit pro potenciál libovolného počtu δ -funkcí. Pokud by tomu tak skutečně bylo, pravděpodobně bychom mohli větu zobecnit na ještě obecnější potenciál. V této práci jsme se tím však dále nezabývali.

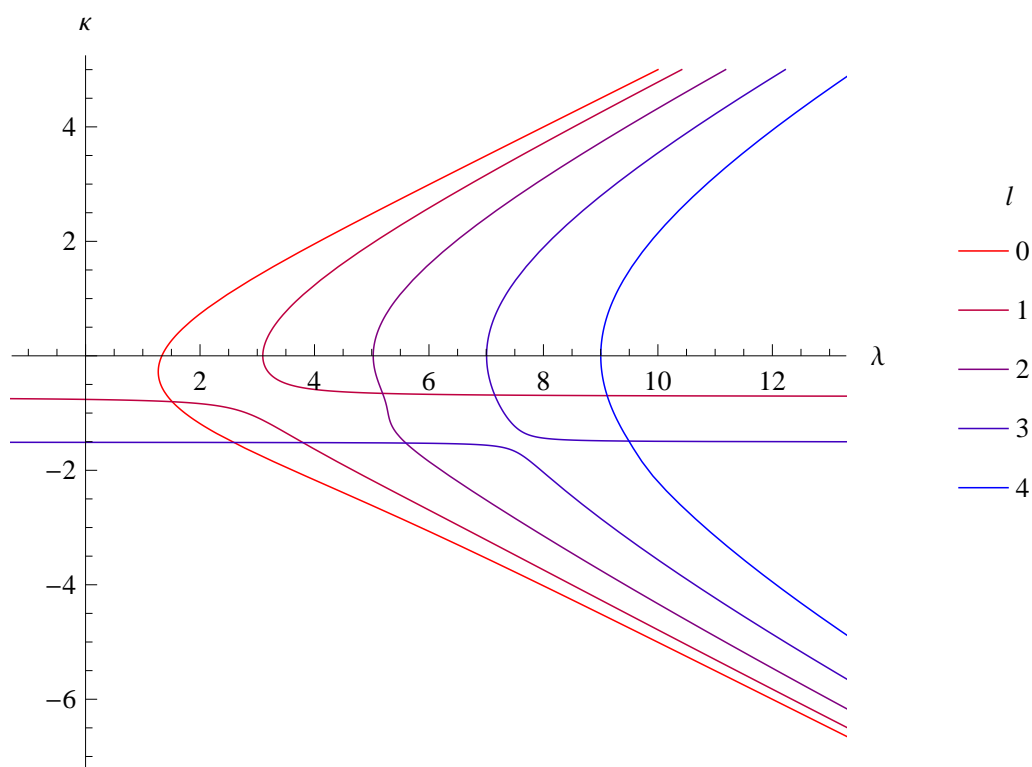
1.3 Analytické chování funkce $\lambda(\kappa)$

Nyní se budeme zabývat tím, jak se funkce $\lambda(\kappa)$ chová v závislosti na l a na parametrech σ a b (grafy jsou na obrázcích 1.1 až 1.7¹). Ve všech těchto grafech budeme na vodorovnou osu

¹Grafy byly vytvořeny pomocí programu Wolfram Mathematica 7.

vynášet hodnoty λ a na svislou hodnoty κ , což odpovídá chápání závislosti jako závislosti různých stavů charakterizovaných κ na velikosti přidaného potenciálu charakterizovaného parametrem λ . Pokud však budeme mluvit o chování funkce, vždy tím budeme mít na mysli funkci $\lambda(\kappa)$.

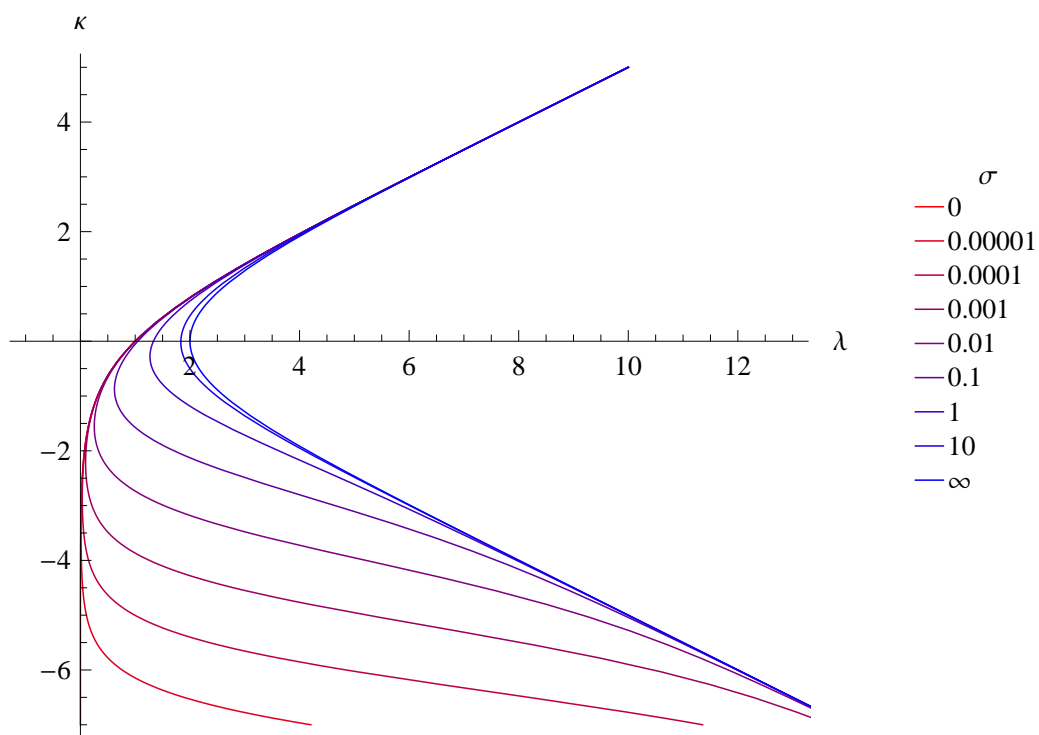
Na obrázku 1.1 je vynesena graf funkce $\lambda(\kappa)$ pro $\sigma = 1$, $b = 2$ a různé hodnoty $l = 0, 1, \dots, 4$. Můžeme si všimnout, že pro sudá l je funkce $\lambda(\kappa)$ jednoduše spojitá, zatímco pro lichá l má pól v nějakém záporném bodě κ . Domníváme se, že tento pól je pólem prvního řádu.



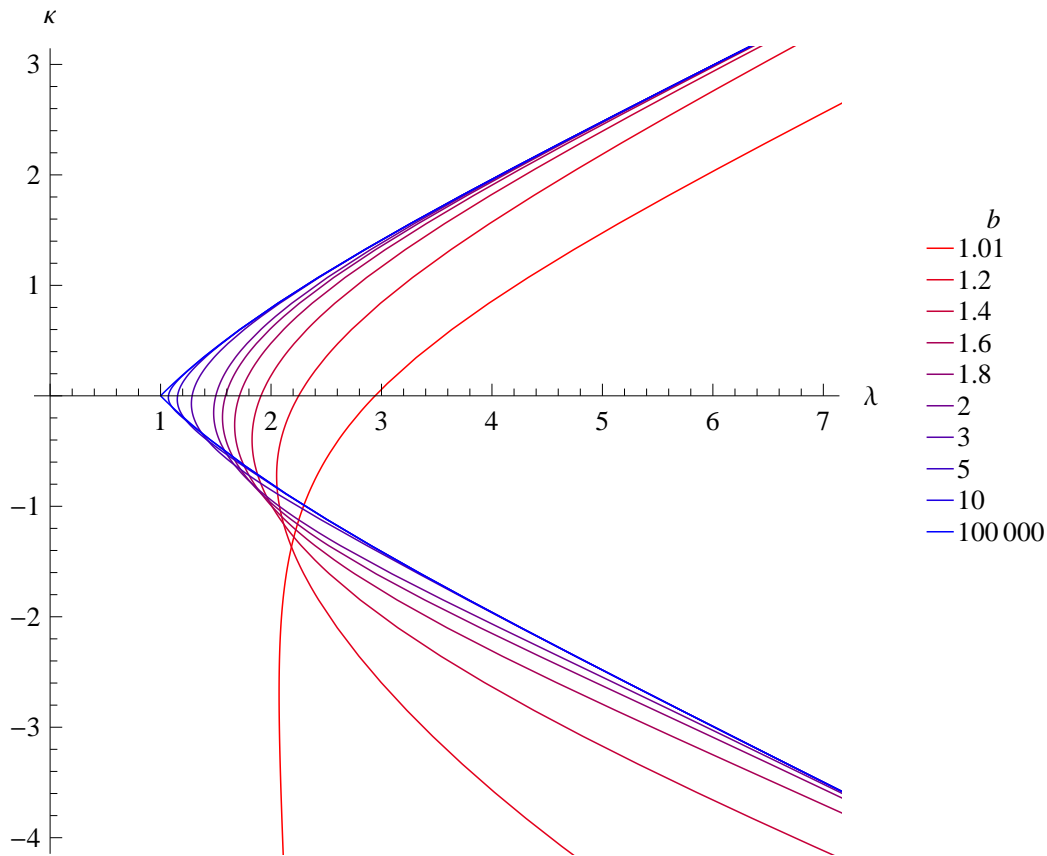
Obrázek 1.1. Funkce $\lambda(\kappa)$ pro $\sigma = 1$, $b = 2$ a $l = 0, \dots, 4$.

Podívejme se podrobněji na chování funkce $\lambda(\kappa)$ pro $l = 0$. Na obrázku 1.2 jsou vyneseny grafy funkce $\lambda(\kappa)$ pro $b = 2$ a různá σ od $\sigma = 0$ až po limitní případ $\sigma \rightarrow \infty$. Grafy by pro hodnoty σ větší než přibližně 10 splývaly s limitním případem $\sigma \rightarrow \infty$, nejsou proto v grafu vyneseny. Při menších hodnotách σ se funkce začne v záporných κ přiklánět k ose κ . Limitní případ $\sigma = 0$ pak na obrázku s $\kappa \rightarrow -\infty$ splývá s osou κ .

Na obrázku 1.3 jsme nechali konstantní $\sigma = 2$ a zkoumali jsme závislost na poloze δ -funkce b . Červená křivka odpovídající $b = 1.01$ je velmi podobná křivce odpovídající $\sigma = 0$ z obrázku 1.2, jen je posunuta o 2 doprava. Toto chování jsme mohli očekávat, neboť limitní případ $b = 1$ odpovídá situaci, kdy jsou obě δ -funkce umístěny v jednom bodě a jejich velikost je rovna $-\lambda + \sigma$. Je tedy zřejmé, že graf funkce $\lambda(\kappa)$ by měl být v případě



Obrázek 1.2. Funkce $\lambda(\kappa)$ pro $l = 0$, $b = 2$ a různá σ .



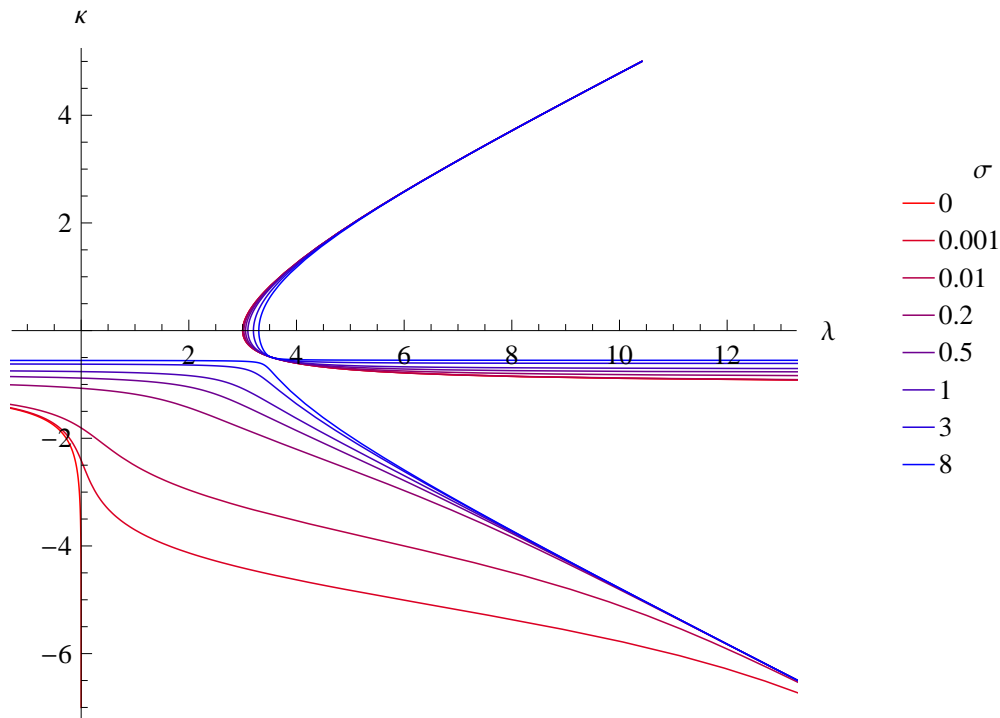
Obrázek 1.3. Funkce $\lambda(\kappa)$ pro $l = 0$, $\sigma = 2$ a různá b .

$b = 1$ posunut doprava od osy právě o hodnotu σ .

Se zvětšující se hodnotou b se minimum funkce $\lambda(\kappa)$ posouvá ze záporného nekonečna k nule. Od jistých hodnot b (v případě $\sigma = 2$ to je přibližně $b = 10$) se už funkce s rostoucí hodnotou b příliš nemění, s b jdoucím do nekonečna vytvoří funkce v $\kappa = 0$ hrot.

Všimneme si, že pro $l = 0$ (pokud nepočítáme limitní případy $\sigma = 0$ a $b = 1$) mohou nastat tyto tři možnosti: neexistují žádné vázané stavy ani virtuální stavy (pokud je λ menší než hodnota funkce $\lambda(\kappa)$ ve svém minimu), existují dva virtuální stavy (pokud λ nabývá nějaké hodnoty mezi minimální hodnotou λ_0 funkce $\lambda(\kappa)$ a hodnotou v nule $\lambda(0)$) nebo existuje jeden vázaný stav a jeden virtuální stav pro $\lambda > \lambda(0)$.

Nyní nás bude zajímat případ $l = 1$ a to především chování funkce v okolí pólu. Na obrázku 1.4 jsou znázorněny grafy pro $b = 2$ a různá σ . Je patrné, že chování funkce mimo pól je stejné jako v případě $l = 0$. Se zvětšujícími se hodnotami σ pozorujeme, že se pól funkce posouvá do menších hodnot κ a zároveň se jemu odpovídající chování více lokalizuje do užšího intervalu – „pól se zužuje“. Pro $\sigma \rightarrow \infty$ tak dostaneme pól v jistém bodě κ (na obrázku tento případ není zobrazen z důvodu přehlednosti), pro všechny hodnoty σ tedy



Obrázek 1.4. Funkce $\lambda(\kappa)$ pro $l = 1$, $b = 2$ a různá σ .

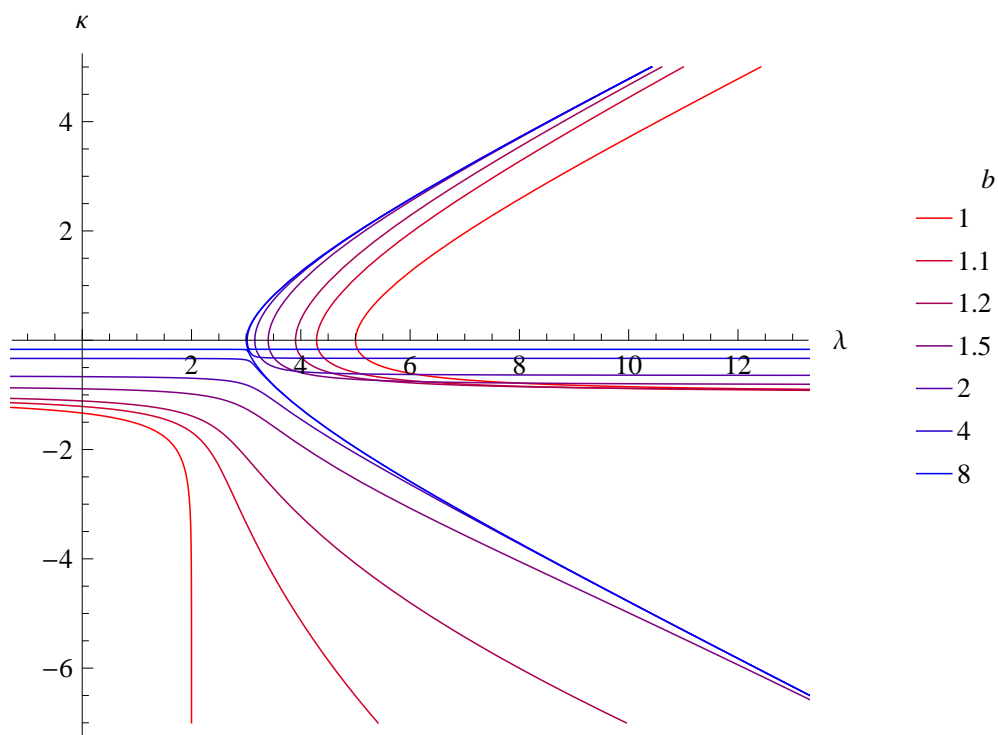
pól funkce může ležet jen v určitém intervalu hodnot κ .

Obrázek 1.5 ukazuje grafy funkce $\lambda(\kappa)$ kde $\sigma = 2$ a b probíhá různé hodnoty. Pozorujeme, že pól se s rostoucím b od jisté minimální hodnoty přibližuje k ose λ . Velké hodnoty b opět znamenají zužování pólu jako tomu bylo u parametru σ . Ve všech případech, které můžeme vidět na obrázcích 1.4 a 1.5, je patrné, že derivace funkce $\lambda(\kappa)$ je v $\kappa = 0$ nulová, což je v souladu s větou 1 dokázanou v předchozí kapitole.

Pro $l = 1$ (nepočítáme-li opět limitní případy parametrů σ a b) existuje vždy jeden virtuální stav, navíc pokud $\lambda > \lambda_0$, kde $\lambda_0 = \lambda(0)$, přibude k němu druhý virtuální stav a jeden vázaný stav.

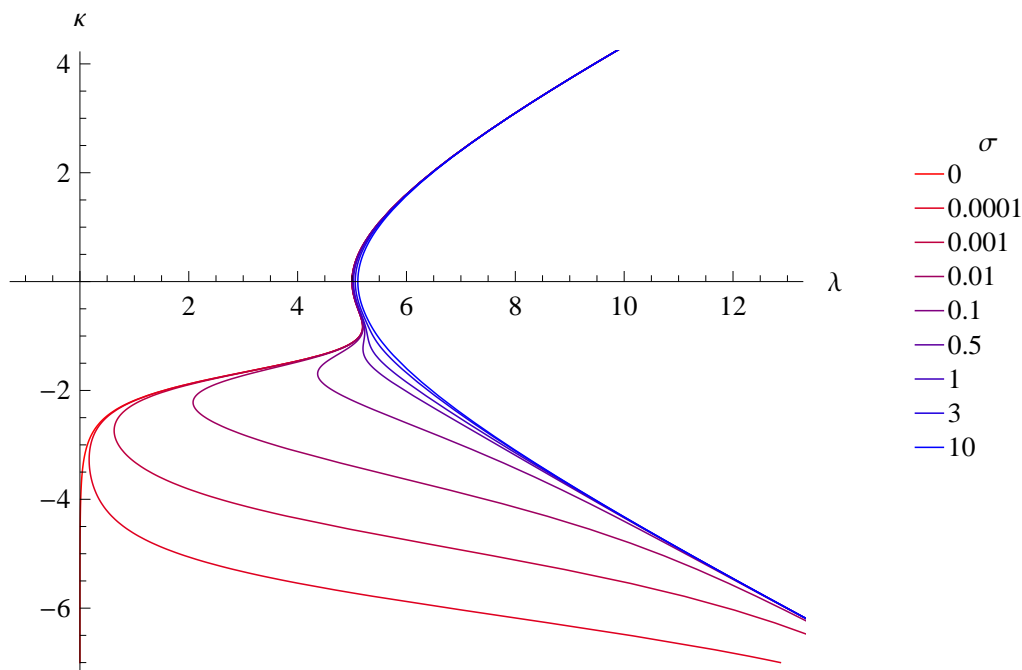
Poslední hodnota l , kterou se budeme zabývat je $l = 2$. Na obrázku 1.1 jsme viděli, že funkce pro $l = 2$ neměla pól. V oboru hodnot κ , kde bychom pól očekávali, pokud by se funkce měla chovat stejně jako v případech, kdy l bylo rovno 1 a 3, je však patrné jisté „zavlnění“ funkce.

Na obrázku 1.6 je znázorněna funkce $\lambda(\kappa)$ pro $l = 2$, $b = 2$ a různé hodnoty σ . Stejně jako v případech $l = 0, 1$ se funkce pro malá σ přiklání k ose κ . Zde to narozdíl od předchozích případů má za následek, že se pro jisté hodnoty λ vytvoří až tři virtuální stavy. Kdybychom se podívali podrobněji na případ $\sigma = 0.1$, viděli bychom, že s rostoucím λ se nejprve ze dvou rezonancí vytvoří dva virtuální stavy, poté z jiných dvou rezonancí vznikne vázaný stav a virtuální stav a tento virtuální stav se spojí s jedním z již vzniklých



Obrázek 1.5. Funkce $\lambda(\kappa)$ pro $l = 1$, $\sigma = 2$ a různá b .

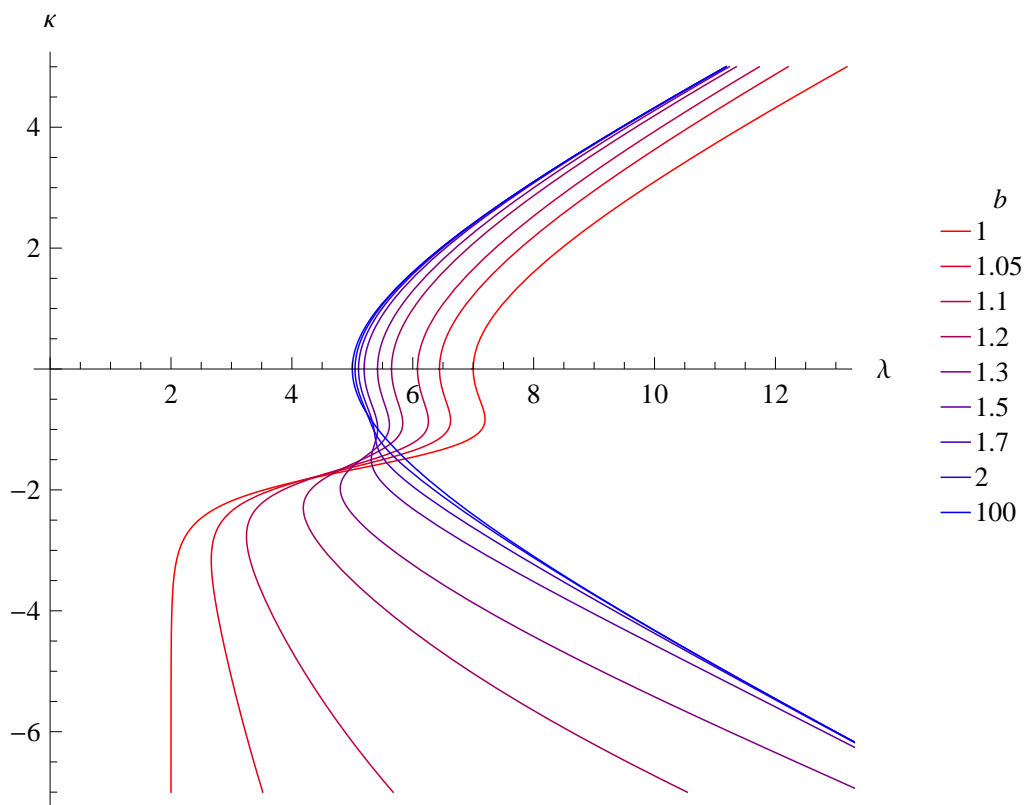
virtuálních stavů a spolu vytvoří opět dvě rezonance. K tomuto chování ale dochází pouze pro dostatečně malé hodnoty σ , z grafu vidíme, že tato hranice je pro $b = 2$ někde mezi $\sigma = 0.5$ a $\sigma = 1$.



Obrázek 1.6. Funkce $\lambda(\kappa)$ pro $l = 2$, $b = 2$ a různá σ .

Na obrázku 1.7 je nakonec znázorněna závislost na b při $\sigma = 2$. Zde mohou naráz vzniknout tři virtuální stavy pouze pro dostatečně malé hodnoty b .

V případě $l = 2$ pro dostatečně malá λ neexistují žádné virtuální ani vázané stavy, pro dostatečně velká λ existuje jeden virtuální a jeden vázaný stav. Pro některé hodnoty parametrů σ , b a λ však mohou existovat tři virtuální stavy a jeden vázaný stav. Pokud tato situace nastává, můžeme rozlišit ještě dva případy - jestliže je minimum funkce $\lambda(\kappa)$ v záporném κ menší než minimum v $\kappa = 0$, pak mohou pro jisté hodnoty λ existovat pouze dva virtuální stavy, pokud je větší, pak dva virtuální stavy samy neexistují pro žádné hodnoty λ .



Obrázek 1.7. Funkce $\lambda(\kappa)$ pro $l = 2$, $\sigma = 2$ a různá b .

Kapitola 2

Výpočet rezonanční energie Padé aproximací

2.1 Rezonance – s-vlna ($l = 0$)

Parametry potenciálu dvou δ -funkcí jsme pro s-vlnu zvolili $a = 5$, $b = 2a = 10$ a $\sigma = 5$. Pro tyto parametry má rezonance při $\lambda = 0$ rezonanční energii $E_R = 1.990372701$ eV a šířku $\Gamma = 0.5251207937$ eV¹. Množinu dat $\{(\kappa_j, \lambda_j)\}_{j=1}^J$, kterou budeme používat pro aproximaci, volíme tak, že kladně vzaté energie vázaných stavů $E_j = \kappa_j^2$ jsou rovnoměrně rozdělené v intervalu (E_{\min}, E_{\max}) , počet dvojic značíme J , ten budeme vždy volit $J = 50$. Platí tedy

$$\kappa_j = \sqrt{E_{\min} + \frac{E_{\max} - E_{\min}}{J - 1} \cdot (j - 1)}, \quad \lambda_j = \lambda(\kappa_j), \quad j \in \{1, \dots, J\}. \quad (2.1)$$

Hodnoty $\lambda_j = \lambda(\kappa_j)$ jsou vypočítány přesně použitím odvozeného vzorce (1.27).

Nyní se pokusíme odpovědět na otázky, jak zvolit hodnoty E_{\min} a E_{\max} tak, abychom dostávali dostatečně přesné výsledky, a jak přesnost výsledků závisí na stupni Padé aproximace. V tabulce 2.1 jsou uvedeny energie vypočítané pro různé stupně Padé aproximace při volbě $E_{\min} = 0.5$ eV, $E_{\max} = 20$ eV. Je patrné, že vypočítané energie se se zvyšujícím se stupněm Padé aproximace zpřesňují, pro vysoké stupně dostáváme dokonce shodu s přesnou hodnotou v rámci uvedené přesnosti.

Nejprve se zaměříme na volbu E_{\min} a E_{\max} při velkém stupni Padé aproximace - zvolili jsme stupeň 6/6. Při takto velkém stupni se vypočtené energie už poměrně dobře shodují s přesnými energiemi, mělo by proto být snazší rozhodnout, jaké volby E_{\min} a E_{\max} jsou vhodné a jaké nevhodné.

V tabulce 2.2 jsou uvedeny energie vypočítané Padé aproximací stupně 6/6 pro data s různou minimální energií E_{\min} a s maximální energií $E_{\max} = 20$ eV. Z uvedených výsledků je patrné, že volba minimální energie E_{\min} nemá při použití vysokého řádu Padé aproximace na přesnost příliš velký vliv, přesnější výsledky dostáváme spíše pro malé hodnoty E_{\min} .

¹Veškeré numerické výpočty v této práci byly provedeny v programu Wolfram Mathematica 7.

Tabulka 2.1. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých stupních Padé aproximace, $l = 0$.

Stupeň aproximace N/M	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
2/2	2.069923115	0.6324852581
3/3	1.996952878	0.5480691557
4/4	1.990758399	0.5271970509
5/5	1.990279292	0.5260656024
6/6	1.990353508	0.5251107311
7/7	1.990372440	0.5251195586
8/8	1.990372703	0.5251207825
9/9	1.990372701	0.5251207936
10/10	1.990372701	0.5251207937
přesně	1.990372701	0.5251207937

Tabulka 2.2. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\min} a stupni Padé aproximace 6/6, $l = 0$.

Minimální energie E_{\min} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.001	1.990355408	0.5251221378
0.01	1.990355299	0.5251216098
0.1	1.990354759	0.5251190051
0.2	1.990354340	0.5251167337
0.5	1.990353508	0.5251107311
1	1.990352948	0.5251017661
2	1.990353706	0.5250857363
5	1.990364678	0.5250473639
10	1.990399455	0.5250143732
15	1.990443175	0.5250250633
přesně	1.990372701	0.5251207937

V tabulce 2.3 jsou uvedeny energie vypočítané Padé aproximací stupně 6/6 pro data s různou maximální energií E_{\max} . Minimální energie $E_{\min} = 0.5$ eV je ve všech případech stejná. Podobně jako u E_{\min} vidíme, že volba E_{\max} nemá na přesnost při velkém stupni Padé aproximace velký vliv. Hodnoty mírně ztrácí přesnost pouze pro velké hodnoty E_{\max} .

Tabulka 2.3. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\max} a stupni Padé aproximace 6/6, $l = 0$.

Maximální energie E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
1	1.990375481	0.5251264754
2	1.990374713	0.5251291840
3	1.990373736	0.5251311564
5	1.990371434	0.5251336276
8	1.990367545	0.5251344627
12	1.990362214	0.5251310392
20	1.990353508	0.5251107311
40	1.990366410	0.5250071601
60	1.990461765	0.5249350257
80	1.990605243	0.5250827693
100	1.990675655	0.5254648467
150	1.989676707	0.5332619019
přesně	1.990372701	0.5251207937

V další tabulce 2.4 jsou uvedené energie vypočítané Padé aproximací stupně 6/6 pro energie, které leží v intervalech (E_{\min}, E_{\max}) délky 0.5 eV. V každém případě je tedy počet bodů na jednotku energie stejný. Jak v případě rezonanční energie E_R tak v případě šířky rezonance Γ je patrné mírné zhoršení přesnosti při použití dat odpovídajících větším energiím.

Nyní se budeme zabývat nižším stupněm 3/3 Padé aproximace, který je zajímavější z hlediska použití v praxi. Při praktických výpočtech jsou data obvykle zatížena jistou chybou, která znemožňuje aproximaci funkcí o velkém počtu volných parametrů. Padé aproximace stupně 3/3 má 5 volných parametrů, což je ještě přijatelný počet.

V tabulce 2.5 jsou uvedeny vypočítané hodnoty pro různá E_{\min} , $E_{\max} = 20$ eV. Rezonanční energie E_R se s rostoucím E_{\min} zmenšuje, přesné hodnotě odpovídá nejlépe když je E_{\min} rovno přibližně 5 eV. Šířka rezonance Γ se s rostoucím E_{\min} nejprve zvětšuje, při hodnotě asi 5 eV se začíná zmenšovat. Přesné hodnotě je nejbližší při minimálním E_{\min} , s většími hodnotami se přesnost spíše zhoršuje.

Tabulka 2.6 odpovídá výsledkům při různých hodnotách E_{\max} , E_{\min} bylo nastaveno na 0.5 eV. Podobně jako když jsme zvyšovali hodnotu E_{\min} tak i při rostoucím E_{\max} klesá hodnota E_R , hodnota Γ se nejprve zvyšuje, při $E_{\max} = 60$ eV nabývá maxima a poté klesá. Nejpřesnější hodnoty E_R dostáváme při $E_{\max} = 40$ eV, nejpřesnější hodnoty Γ při malých E_{\max} .

Tabulka 2.4. Rezonanční energie a šířka rezonance pro různé intervaly (E_{\min}, E_{\max}) a stupeň Padé aproximace 6/6, $l = 0$.

E_{\min} [eV]	E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.5	1.0	1.990375481	0.5251264754
2.5	3.0	1.990369300	0.5251337721
4.5	5.0	1.990361726	0.5251274418
6.5	7.0	1.990356645	0.5251099621
8.5	9.0	1.990356666	0.5250845961
10.5	11.0	1.990363769	0.5250560238
12.5	13.0	1.990379120	0.5250305272
14.5	15.0	1.990402639	0.5250156875
přesně		1.990372701	0.5251207937

Tabulka 2.5. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\min} a stupni Padé aproximace 3/3, $l = 0$.

E_{\min} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.001	1.999258058	0.5455234869
0.01	1.999090620	0.5457195271
0.1	1.998436300	0.5464871823
0.2	1.997969506	0.5470135498
0.5	1.996952878	0.5480691557
1	1.995731659	0.5491619390
2	1.993938387	0.5504276601
5	1.990267753	0.5518514849
10	1.986082379	0.5517032111
15	1.982913773	0.5503675358
přesně	1.990372701	0.5251207937

Tabulka 2.6. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\max} a stupni Padé aproximace $3/3$, $l = 0$.

E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
1	2.004386498	0.5215744763
2	2.003934263	0.5256412213
3	2.003505291	0.5285968143
5	2.002675374	0.5329895707
8	2.001468938	0.5376903042
12	1.999912405	0.5421739121
20	1.996952878	0.5480691557
40	1.990309122	0.5549357241
60	1.984487319	0.5567297241
80	1.979230610	0.5559183572
100	1.974362482	0.5533997093
150	1.963245955	0.5418708094
přesně	1.990372701	0.5251207937

V tabulce 2.7 jsou nakonec uvedeny rezonanční energie vypočítané pro různé intervaly (E_{\min}, E_{\max}) stejné délky 0.5 eV. Rezonanční energie E_R s rostoucí energií dat opět klesá, nejpřesnější hodnoty dosahujeme v oblasti energie kolem 11 eV. Šířka rezonance Γ v závislosti na energii dat roste, pouze poslední hodnota pro interval (14.5, 15.0) je menší než hodnota předchozí. Nejpřesnějšího určení Γ dosahujeme pro nejmenší energie dat.

Porovnáním vypočtených dat a přesných hodnot v tabulkách 2.5 až 2.7, kde byla použita Padé aproximace stupně $3/3$, zjistíme, že hodnotu rezonanční energie E_R můžeme určit s přesností téměř tří platných číslic. Přesnost určení šířky rezonance Γ je podstatně horší - většinou dosahujeme shodu s přesnou hodnotou pouze v jedné platné číslici. Můžeme však pozorovat, že přesnost výsledků se zlepšuje až na dvě platné cifry, pokud data, na kterých provádíme aproximaci, jsou z oblasti malých energií.

Tabulka 2.7. Rezonanční energie a šířka rezonance pro různé intervaly (E_{\min} , E_{\max}) a stupni Padé aproximace 3/3, $l = 0$.

E_{\min} [eV]	E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.5	1.0	2.004386498	0.5215744763
2.5	3.0	2.001692094	0.5358666125
4.5	5.0	1.998814696	0.5429634328
6.5	7.0	1.995967502	0.5472324249
8.5	9.0	1.993221148	0.5497971313
10.5	11.0	1.990604057	0.5511755685
12.5	13.0	1.988126830	0.5516650655
14.5	15.0	1.985791238	0.5514569836
přesně		1.990372701	0.5251207937

2.2 Rezonance – p-vlna ($l = 1$)

Parametry potenciálu dvou δ -funkcí jsme pro p-vlnu zvolili $a = 7$, $b = 2a = 14$ a $\sigma = 6$. Pro tyto parametry má rezonance při $\lambda = 0$ rezonanční energii $E_R = 2.212041688$ eV a šířku $\Gamma = 0.5203074036$ eV. Pro statistickou Padé aproximaci jsme data získali opět ze vzorce (2.1). Počet bodů je vždy volen $J = 50$.

Opět se nejprve podíváme, jak přesné výsledky nám dávají různé stupně Padé aproximace. Vypočítané hodnoty jsou v tabulce 2.8. Jestliže porovnáme tyto výsledky s analogickými výsledky pro $l = 0$ (tabulka 2.1), je zřejmé, že pro $l = 1$ dosahujeme při stejných stupních Padé aproximace horších výsledků. Například abychom dostali shodu rezonanční energie E_R s přesnou hodnotou na tři platné cifry a shodu šířky rezonance Γ s přesnou hodnotou v jedné platné cifře, musíme použít stupeň aproximace alespoň 5/5, zatímco u $l = 0$ nám pro tuto přesnost stačil stupeň 3/3. Domníváme se, že zhoršení výsledků je způsobeno přítomností pólu, který jsme mohli vidět v grafech pro $l = 1$ (obrázky 1.4 a 1.5) v kapitole 1.3 a který pravděpodobně zhoršuje schopnost aproximace vystihnout správné chování funkce $\lambda(\kappa)$.

V tabulkách 2.9 až 2.11 jsou uvedeny energie vypočítané Padé aproximací stupně 6/6 pro data s různou minimální energií E_{\min} a maximální energií $E_{\max} = 20$ eV (tabulka 2.9), pak pro data s minimální energií $E_{\min} = 0.5$ eV a různou maximální energií E_{\max} (tabulka 2.10) a nakonec pro data v různých intervalech energií (E_{\min} , E_{\max}) (tabulka 2.11).

V případě různých E_{\min} dosahujeme nejlepší přesnosti E_R při minimálních hodnotách E_{\min} , nejlepší přesnosti Γ při hodnotě E_{\min} asi 5 eV. V případě různých E_{\max} dostáváme lepší shodu hodnot E_R a Γ s přesnými hodnotami, pokud je energie dat poměrně malá - nejlepší hodnoty E_R dosahujeme pokud je E_{\max} asi 8 eV, nejlepší hodnoty Γ při minimálních energiích dat. Podíváme-li se na chování vypočtených energií pro vyšší energie dat, budou se E_R a Γ nejprve vzdalovat od správných hodnot a poté se k nim začnou vracet a projdou jimi opačným směrem. Domníváme se proto, že tato shoda se správnými hodnotami při

Tabulka 2.8. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých stupních Padé aproximace, $l = 1$.

Stupeň aproximace N/M	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
2/2	2.532400345	1.105899920
3/3	2.522694242	0.9726870589
4/4	2.255557323	0.6967486742
5/5	2.210943036	0.5502897072
6/6	2.210587974	0.5231351095
7/7	2.211955047	0.5203087173
8/8	2.212035873	0.5202998316
9/9	2.212041554	0.5203069368
10/10	2.212041689	0.5203073690
11/11	2.212041689	0.5203074026
přesně	2.212041688	0.5203074036

Tabulka 2.9. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\min} a stupni Padé aproximace 6/6, $l = 1$.

Minimální energie E_{\min} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.001	2.210932089	0.5234892182
0.01	2.210914969	0.5234728810
0.1	2.210830714	0.5233938634
0.2	2.210760168	0.5233243957
0.5	2.210587974	0.5231351095
1	2.210362248	0.5228367492
2	2.210024191	0.5222587995
5	2.209411834	0.5205702034
10	2.208992051	0.5177917289
15	2.209001964	0.5150273075
přesně	2.212041688	0.5203074036

Tabulka 2.10. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\max} a stupni Padé aproximace $6/6$, $l = 1$.

Maximální energie E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
1	2.213147519	0.5221112681
2	2.212940216	0.5225179376
3	2.212761753	0.5227912972
5	2.212444172	0.5231475360
8	2.212018032	0.5234260731
12	2.211502252	0.5235224722
20	2.210587974	0.5231351095
40	2.208864728	0.5200482471
60	2.208019316	0.5147843197
80	2.208289222	0.5077291334
100	2.210041276	0.4990705212
150	2.225312712	0.4722709996
přesně	2.212041688	0.5203074036

Tabulka 2.11. Rezonanční energie a šířka rezonance pro různé intervaly (E_{\min} , E_{\max}) a stupeň Padé aproximace $6/6$, $l = 1$.

E_{\min} [eV]	E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.5	1.0	2.213147519	0.5221112681
2.5	3.0	2.212172839	0.5232852688
4.5	5.0	2.211345396	0.5233466039
6.5	7.0	2.210627831	0.5228526791
8.5	9.0	2.210023825	0.5219601968
10.5	11.0	2.209543500	0.5207488248
12.5	13.0	2.209199517	0.5192710362
14.5	15.0	2.209006214	0.5175677842
přesně		2.212041688	0.5203074036

velkých energiích dat je spíše náhodná a nepřikládáme jí tedy velký význam. V tabulce 2.11 s různými intervaly energií dostáváme nejlepší hodnoty E_R pro data s energií okolo 3 eV a nejlepší hodnoty Γ pro minimální energii dat a pro energii dat okolo 11 eV.

Stejně jako v předchozí části s vlnou se i nyní budeme zabývat vlivem hodnot E_{\min} a E_{\max} na přesnost při Padé aproximaci řádu 3/3. Tento vliv budeme vyhodnocovat na základě výsledků uvedených v tabulkách 2.12 až 2.14. V tabulce 2.12 jsou uvedeny rezonanční energie vypočtené z dat s různou minimální energií E_{\min} a $E_{\max} = 20$ eV, v tabulce 2.13 rezonanční energie vypočtené z dat s minimální energií $E_{\min} = 0.5$ eV a různou maximální energií E_{\max} a nakonec v tabulce 2.14 rezonanční energie vypočtené z dat s energiemi v různých intervalech (E_{\min}, E_{\max}).

S rostoucí minimální energií dat E_{\min} klesá hodnota E_R k přesné hodnotě, rezonanční šířka Γ nejprve roste a pak také klesá k přesné hodnotě. Určená rezonanční šířka je však téměř dvojnásobně větší než přesná hodnota, výsledky jsou zde tedy velmi nepřesné. Poněkud lepších výsledků Γ dosahujeme, pokud snižujeme hodnotu maximální energie E_{\max} až na $E_{\max} = 1$ eV, pro tuto hodnotu dostáváme shodu alespoň na první platné číslici. Hodnota E_R vychází naopak nejlépe pro velké hodnoty E_{\max} . Bereme-li energie dat z intervalů délky 0.5 eV, největší shoda vypočítaných rezonančních energií E_R s přesnou hodnotou nastává pro malé energie a největší zkoumané energie dat, tedy 15 eV. Výsledky se mezi sebou však příliš neliší vzhledem k rozdílu hodnot a přesné hodnoty. Nejlepších výsledků pro Γ dosahujeme opět v oblasti malých energií dat.

Tabulka 2.12. Resonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\min} a stupni Padé aproximace 3/3, $l = 1$.

Minimální energie E_{\min} [eV]	Resonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.001	2.526543585	0.9230720319
0.01	2.526215990	0.9264893714
0.1	2.524986661	0.9409539519
0.2	2.524176766	0.9513988338
0.5	2.522694242	0.9726870589
1	2.521570942	0.9924424989
2	2.521589305	0.9962231547
5	2.517300333	0.9962693074
10	2.487971619	0.9208236231
15	2.444026410	0.8706526710
přesně	2.212041688	0.5203074036

V tabulkách 2.12 až 2.14 zabývajících se Padé aproximací stupně 3/3 tedy vidíme, že pro $l = 1$ můžeme očekávat přesnost hodnot E_R pouze na jednu platnou číslici, v případě hodnot Γ pak ani tuto přesnost. Správnou první platnou cifru hodnoty Γ dostáváme pouze pokud aproximovaná data neobsahují data o vysokých energiích, energie dat by neměla být větší než 1 eV.

Tabulka 2.13. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\max} a stupni Padé aproximace 3/3, $l = 1$.

Maximální energie E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
1	2.488750587	0.5583500695
2	2.498667946	0.6071140684
3	2.504956365	0.6464682895
5	2.512550106	0.7108227533
8	2.518094009	0.7868342635
12	2.520988643	0.8650776040
20	2.522694242	0.9726870589
40	2.525036204	1.074673776
60	2.503923891	1.029513697
80	2.458974786	0.9815954962
100	2.410126913	0.9602163585
150	2.316490081	0.9647690420
přesně	2.212041688	0.5203074036

Tabulka 2.14. Rezonanční energie a šířka rezonance pro různé intervaly (E_{\min}, E_{\max}) a stupeň Padé aproximace 3/3, $l = 1$.

E_{\min} [eV]	E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.5	1.0	2.488750587	0.5583500695
2.5	3.0	2.514131625	0.7624043606
4.5	5.0	2.516477158	0.8906510584
6.5	7.0	2.516976033	0.9493864786
8.5	9.0	2.518593457	0.9861634325
10.5	11.0	2.516703347	0.9880945599
12.5	13.0	2.505627627	0.9531255754
14.5	15.0	2.483504397	0.9115258840
přesně		2.212041688	0.5203074036

2.3 Rezonance – d-vlna ($l = 2$)

Parametry potenciálu dvou δ -funkcí jsme pro d-vlnu zvolili $a = 9$, $b = 2a = 18$ a $\sigma = 6$. Pro tyto parametry má rezonance při $\lambda = 0$ rezonanční energii $E_R = 2.247236704$ eV a šířku $\Gamma = 0.5597492474$ eV. Pro statistickou Padé aproximaci jsme data získali opět ze vzorce (2.1). Počet bodů je vždy volen $J = 50$.

Nejprve se podíváme, jak přesné výsledky nám dávají různé stupně Padé aproximace. Vypočítané rezonanční energie jsou uvedeny v tabulce 2.15. Hodnoty rezonanční energie E_R resp. šířky rezonance Γ se s přesnou hodnotou shodují ve třech resp. v jedné platné číslici až pro stupeň aproximace 7/7. Pozorujeme, že pro malé stupně aproximace se šířky rezonance Γ pohybují ve velkém rozmezí hodnot. Přesnost výsledků je tedy značně horší než byla pro $l < 2$. V případě $l = 1$ jsme zhoršení přesnosti mohli připsat pólu funkce $\lambda(\kappa)$, v případě $l = 2$ jsme však pól nepozorovali. Domníváme se však, že funkce $\lambda(k)$ má dva póly blízko imaginární osy a tyto póly způsobují zhoršení přesnosti - Padé aproximace při nízkých stupních nedokáže tyto póly dobře vystihnout. Zároveň jsou tyto póly pravděpodobnou příčinou „zavlnění“ funkce $\lambda(\kappa)$, které jsme popsali v kapitole 1.3.

Tabulka 2.15. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých stupních Padé aproximace, $l = 2$.

Stupeň aproximace N/M	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
2/2	2.936813315	0.5248974427
3/3	2.697997034	1.561408599
4/4	2.601351195	0.8965098035
5/5	2.186707786	1.175804657
6/6	2.217871339	0.6686102517
7/7	2.240896111	0.5645388637
8/8	2.247025180	0.5595934839
9/9	2.247229490	0.5597217714
10/10	2.247237000	0.5597470843
11/11	2.247236826	0.5597488565
přesně	2.247236704	0.5597492474

Nyní se zaměříme na výpočty rezonančních energií při stupni Padé aproximace 6/6. Vypočítané rezonanční energie při různých E_{\min} a $E_{\max} = 20$ eV jsou uvedeny v tabulce 2.16, při $E_{\min} = 0.5$ eV a různých E_{\max} v tabulce 2.17 a nakonec při různých intervalech (E_{\min}, E_{\max}) v tabulce 2.18. V těchto tabulkách můžeme pozorovat, že přesnější hodnoty E_R dostáváme spíše pro malé E_{\min} , hodnota E_{\max} by pak měla být v řádu jednotek eV. Šířka rezonance Γ je ve všech případech (až na ojedinělý případ $E_{\max} = 150$ eV v tabulce 2.17, který nepokládáme za významný) větší než správná hodnota o asi 0.05 eV až 0.1 eV. Nejpresnější hodnoty Γ jsme dosáhli pro $E_{\min} = 0.5$ eV a $E_{\max} = 1$ eV.

Tabulka 2.16. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\min} a stupni Padé aproximace 6/6, $l = 2$.

Minimální energie E_{\min} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.001	2.226361396	0.6677374721
0.01	2.225955400	0.6677894944
0.1	2.223935777	0.6680826334
0.2	2.222212539	0.6682983678
0.5	2.217871339	0.6686102517
1	2.211858004	0.6684738700
2	2.202020166	0.6669403815
5	2.180049672	0.6590373349
10	2.154471942	0.6469075095
15	2.139248380	0.6423375381
přesně	2.247236704	0.5597492474

Tabulka 2.17. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\max} a stupni Padé aproximace 6/6, $l = 2$.

Maximální energie E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
1	2.267397022	0.6099866603
2	2.264637962	0.6191694374
3	2.261973784	0.6260902439
5	2.256741997	0.6366244009
8	2.248963487	0.6479144003
12	2.238605288	0.6581122586
20	2.217871339	0.6686102517
40	2.166817204	0.6655984463
60	2.121833554	0.6555644634
80	2.098952406	0.6616622534
100	2.106203438	0.6455201631
150	2.144260328	0.5352743974
přesně	2.247236704	0.5597492474

Tabulka 2.18. Rezonanční energie a šířka rezonance pro různé intervaly (E_{\min} , E_{\max}) a stupeň Padé aproximace 6/6, $l = 2$.

E_{\min} [eV]	E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.5	1.0	2.267397022	0.6099866603
2.5	3.0	2.251825002	0.6430057905
4.5	5.0	2.234846251	0.6578964734
6.5	7.0	2.217523159	0.6634462862
8.5	9.0	2.200318535	0.6627439852
10.5	11.0	2.183571398	0.6580324315
12.5	13.0	2.167661370	0.6515553095
14.5	15.0	2.153205041	0.6456895447
přesně		2.247236704	0.5597492474

I v případě $l = 2$ uvádíme výsledky vypočítané Padé aproximací stupně 3/3: v tabulce 2.19 jsou uvedeny rezonanční energie pro různá E_{\min} a $E_{\max} = 20$ eV, v tabulce 2.20 pro $E_{\min} = 0.5$ eV a různá E_{\max} , v tabulce 2.21 pro různé intervaly (E_{\min} , E_{\max}). Je patrné, že výsledky jsou velmi nepřesné - rezonanční energie E_R se shodují s přesnou hodnotou zpravidla v jedné platné cifře, rezonanční šířky Γ se neshodují s přesnou hodnotou ani v jedné cifře, v některých případech jsou až trojnásobně větší než je přesná hodnota. Přesto je však z tabulek 2.20 a 2.21 patrné, že rezonanční šířky Γ jsou poněkud přesnější, pokud energie dat nabývá pouze malých hodnot. U rezonančních energií E_R je tomu naopak, data pokrývající pouze oblasti malé energie dávají méně přesné výsledky.

Tabulka 2.19. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\min} a stupni Padé aproximace 3/3, $l = 2$.

Minimální energie E_{\min} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.001	2.848750188	1.522195674
0.01	2.839220080	1.530609995
0.1	2.798428106	1.557312192
0.2	2.767025453	1.567839803
0.5	2.697997034	1.561408599
1	2.626332206	1.507251327
2	2.558894130	1.387195837
5	2.517646741	1.190408116
10	2.517455921	1.103819746
15	2.517915421	1.098148974
přesně	2.247236704	0.5597492474

Tabulka 2.20. Rezonanční energie a šířka rezonance při různých volbách E_{\max} a stupni Padé aproximace $3/3$, $l = 2$.

Maximální energie E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
1	2.947166055	0.8455214113
2	2.954326410	0.8846142719
3	2.960197320	0.9303270742
5	2.965603078	1.031611346
8	2.954168039	1.194933417
12	2.897097811	1.399362549
20	2.697997034	1.561408599
40	2.512234693	1.286939145
60	2.504442535	1.207777632
80	2.503498026	1.224405925
100	2.498655119	1.270547256
150	2.476236567	1.412461038
přesně	2.247236704	0.5597492474

Tabulka 2.21. Rezonanční energie a šířka rezonance pro různé intervaly (E_{\min} , E_{\max}) a stupeň Padé aproximace $3/3$, $l = 2$.

E_{\min} [eV]	E_{\max} [eV]	Rezonanční energie E_R [eV]	Šířka rezonance Γ [eV]
0.5	1.0	2.947166055	0.8455214113
2.5	3.0	2.957592875	1.130572038
4.5	5.0	2.835365122	1.459927959
6.5	7.0	2.636480901	1.474360269
8.5	9.0	2.542984187	1.305797413
10.5	11.0	2.519779169	1.184241065
12.5	13.0	2.517044997	1.122403013
14.5	15.0	2.518066590	1.098000837
přesně		2.247236704	0.5597492474

Prezentované výsledky pro Padé aproximaci stupně 3/3 tedy ukazují, že při takto nízkém stupni aproximace bude přesnost velmi špatná nezávisle na zvolených E_{\min} a E_{\max} . V případě rezonanční energie E_R můžeme očekávat správnou pouze první platnou cifru, v případě šířky rezonance Γ jsou výsledky prakticky nepoužitelné.

Kapitola 3

Závěr

V práci jsme nejprve našli závislost vazbové konstanty λ na k a tím jsme analyticky vyřešili model dvou δ -funkcí. Pro funkci $\lambda(k)$ jsme poté dokázali větu, která říká, že Taylorův rozvoj $\lambda(k)$ v nule neobsahuje členy s lichou mocninou do řádu $2l - 1$. Tento výsledek by mohl být důležitý, pokud bychom místo Padé aproximace použili aproximaci jinou funkcí, která by tuto větu automaticky splňovala.

Vyšetřováním funkce $\lambda(k)$ pro imaginární k jsme určili jaké vázané a virtuální stavy mohou existovat pro různé hodnoty parametrů potenciálu použitého modelu. Zjistili jsme, že v případě p-vlny má funkce $\lambda(k)$ na záporné imaginární ose komplexní k -roviny pól. V případě d-vlny pól na imaginární ose nebyl přítomen, domníváme se však, že blízko imaginární osy jsou přítomny dva póly. Pozorovali jsme, že s rostoucím l se výrazně snižuje přesnost vypočítaných rezonančních energií při zachování stupně Padé aproximace, to si vysvětlujeme právě přítomností pólů funkce $\lambda(k)$. Model dvou δ -funkcí se tedy jeví spíše jako nevhodný pro použití Padé aproximace při nenulovém momentu hybnosti l , pro $l = 0$ však poskytuje i při nízkém stupni Padé aproximace 3/3 dostatečnou přesnost.

Zkoumáním vlivu energie použitých dat pro aproximaci na vypočítané rezonanční energie jsme zjistili, že v našem modelu není při určování rezonanční energie E_R tato volba příliš podstatná. Abychom určili přesně šířku rezonance Γ , je nutné používat při aproximaci pouze data s menšími energiemi.

Literatura

- [1] J. Horáček (2009): *Determination of Resonance Parameters by Use of Padé III Approximation*, AIP Conference Proceedings **1168**, 139–142
- [2] V. I. Kukulin a V. M. Krasnopolsky (1977): J. Phys. A: Math. Gen. **10**, L33–37
- [3] V. M. Krasnopolsky, V. I. Kukulin (1978): Phys. Lett. **69A**, 251–254
- [4] V. I. Kukulin, V. M. Krasnopolsky a J. Horáček (1989): *Theory of Resonances*, Kluwer Academic, Dordrecht, 40–64.
- [5] A. J. F. Siegert (1939): Phys. Rev. **56**, 750–752
- [6] B. G. Koreněv (1977): *Úvod do teorie Besselových funkcí*, SNTL, Praha, 21–26, 51