

České vysoké učení technické v Praze
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Rezonanční jevy v kvantových systémech periodicky závislých na čase

Karel Smolek

Diplomová práce

Květen 1999

Vedoucí diplomové práce:

RNDr. Miloš Tater, CSc.

Ústav jaderné fyziky AVČR - Řež u Prahy



Obsah

Seznam symbolů	3
1 Úvod	6
2 Základní pojmy teorie rozptylu	8
2.1 Klasický rozptyl	8
2.2 Kvantově-mechanický popis rozptylu	9
2.2.1 Základní pojmy	9
2.2.2 Asymptotická podmínka	10
2.2.3 Teorém ortogonality	10
2.2.4 Podmínka asymptotické úplnosti	11
2.2.5 Operátor S-matice	11
2.2.6 Rozvoj do parciálních vln	12
2.2.7 Greenův a T operátor	13
2.2.8 Stav $ \vec{p}+\rangle$ a $ \vec{p}-\rangle$	14
2.2.9 Jostova funkce	16
2.2.10 Analytické vlastnosti Jostovy funkce	18
2.2.11 Jednodimenzionální rozptyl	18
3 Rezonance	21
3.1 Rezonance a nuly Jostovy funkce	21
3.2 Rezonanční energie	22
3.3 Zpoždění vlnového balíku	24
4 Komplexní škálování	25
5 Dynamika časově periodických systémů a Floquetova teorie	28
6 Husimiho funkce	30
7 Numerické výsledky	32
7.1 Statická pravoúhlá potenciálová jáma	32
7.2 Výpočet rezonancí rozvojem řešení do ortonormální báze	37
7.2.1 Operátor $-i\frac{d}{dt} + V_1 \cos \omega t$	37
7.2.2 Operátor $K\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$	39

7.2.3	Operátor $K \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{d}{dt} + V(x) + V_1 \cos \omega t$	42
7.2.4	Operátor $K \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{d}{dt} + V(x)(1 + V_1 \cos \omega t)$	44
7.3	Výpočet rezonancí metodou konečných diferencí	48
7.3.1	Operátor $-i \frac{d}{dt}$	48
7.3.2	Operátor $-i \frac{d}{dt} + V_1 \cos \omega t$	51
7.3.3	Operátor $K \frac{d^2}{dx^2}$	52
7.3.4	Operátor $K \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$	54
7.3.5	Operátor $K \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{d}{dt}$	57
7.3.6	Operátor $K \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{d}{dt} + V(x) + V_1 \cos \omega t$	61
7.3.7	Operátor $K \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{d}{dt} + V(x)(1 + V_1 \cos \omega t)$	63
8	Závěr	66
	Poděkování	67
	Literatura	68

$(2n+1)!!$	$1.2.3 \cdots (2n+1)$
$\langle \cdot \cdot \rangle$	skalární součin
$\langle \langle \cdot \cdot \rangle \rangle$	skalární součin na $\mathcal{H} \otimes \mathcal{T}$
a	poloměr pravoúhlé potenciálové jámy
$\hat{A}^\dagger$	operátor sdružený k operátoru $\hat{A}$
$\hat{A} _{\mathcal{B}}$	restrikce operátor $\hat{A}$ na prostor $\mathcal{B}$
$\mathcal{B}$	prostor vázaných stavů
$\mathcal{C}$	množina komplexních čísel
$\delta(x)$	Diracova δ funkce
$\delta_3(\vec{x})$	Diracova δ funkce $\delta_3(\vec{x}) = \delta(x_1)\delta(x_2)\delta(x_3)$
$\delta_{a,b}$	Kroneckerovo δ ($\delta_{a,b} = 1$ pro $a = b$, $\delta_{a,b} = 0$ pro $a \neq b$)
δ_l	fázový posun
δ_l^{bg}	zpětný fázový posun
δ_l^{res}	rezonanční část fázového posunu
$(\Delta\hat{A})_\psi$	směrodatná odchylka
$d\Omega$	element prostorového úhlu
E	energie
$\bar{E}$	rezonanční energie
E_R	reálná část rezonanční energie
E_I	reálná část rezonanční energie
$E_{\vec{p}}$	$\vec{p}^2/2m$
$ E, l, m\rangle$	člen báze parciálních vln
$f(\vec{p}' \leftarrow \vec{p})$	amplituda rozptylu
$f_l(\vec{p}' \leftarrow \vec{p})$	parciální amplituda rozptylu
$\mathbf{f}_l$	Jostova funkce
$\hat{G}$	Greenův operátor
$\hat{G}_0$	Greenův operátor pro volný hamiltonián
Γ	gamma funkce
Γ	mínus dvojnásobek imaginární části rezonanční energie
$\chi_{l,p}^+(r)$	Jostovo řešení
$\chi_{l,p}^-(r)$	Jostovo řešení
$\hbar$	Planckova konstanta/ 2π
$\hat{h}_l^+(z)$	Riccati-Hankelova funkce
$\hat{h}_l^-(z)$	Riccati-Hankelova funkce
$\mathcal{H}$	Hilbertův prostor
$\hat{H}$	hamiltonián
$\hat{H}_0$	hamiltonián volné částice
$\hat{H}_\theta$	komplexně škálovaný hamiltonián
$H_n(z)$	Hermiteův polynom
$j_l(z)$	sférická Besselova funkce
$\hat{j}_l(z)$	Riccati-Besselova funkce
$\mathcal{K}$	prostor $\mathcal{H} \otimes \mathcal{T}$

$\hat{K}$	operátor na $\mathcal{H} \otimes \mathcal{T}$
$L^2(J)$	Hilbertův prostor kvadraticky integrabilních funkcí na intervalu J
$L^{2(0)}(J)$	prostor sudých kvadraticky integrabilních funkcí
$L^{2(1)}(J)$	prostor lichých kvadraticky integrabilních funkcí
$\hat{L}$	operátor čtverce momentu hybnosti
$\hat{L}_3$	operátor třetí složky momentu hybnosti
m	hmotnost částice
m^*	efektivní hmotnost částice
$\mathcal{N}$	množina přirozených čísel $(1,2,3,\dots)$
$\mathcal{N}_0$	množina čísel $0,1,2,3,\dots$
$n_l(z)$	Neumannova funkce
$\hat{n}_l(z)$	Riccati-Neumannova funkce
$\hat{\Omega}_+$	Møllerův operátor
$\hat{\Omega}_-$	Møllerův operátor
p	velikost hybnosti
P	koeficient průchodu
$\mathcal{P}$	fázový prostor systému
$\vec{P}$	hybnost
$\vec{p}$	vektor hybnosti
$\bar{p}$	rezonanční hybnost
p_I	mínus imaginární část rezonanční hybnosti
p_R	reálná část rezonanční hybnosti
$ \vec{p}\rangle$	rovinná vlna s hybností $\vec{p}$
$P_l(\zeta)$	Legendreův polynom
$\phi_{l,p}(r)$	regulární radiální řešení
$\phi_{\vec{P},\vec{Q}}$	koherentní stav
ψ^*	komplexně sdružená funkce
$\psi_{l,p}(r)$	normalizovaná radiální řešení
$ \psi+\rangle$	in-stav příslušný ke stavu $ \psi\rangle$
$ \psi_{\text{in}}\rangle$	in-stav příslušný ke stavu $ \psi\rangle$
$ \psi-\rangle$	out-stav příslušný ke stavu $ \psi\rangle$
$ \psi_{\text{out}}\rangle$	out-stav příslušný ke stavu $ \psi\rangle$
$ \psi_{\text{sc}}\rangle$	rozptýlená část vlnového balíku
$\vec{Q}$	poloha
r	radiální vzdálenost od počátku
R	koeficient odrazu
$\mathcal{R}$	množina reálných čísel
$\mathcal{R}$	$\mathcal{R}_+ = \mathcal{R}_- \equiv \mathcal{R}$
$\mathcal{R}_+$	$\text{Ran } \hat{\Omega}_+$
$\mathcal{R}_-$	$\text{Ran } \hat{\Omega}_-$
$\mathcal{R}^+$	kladná reálná čísla
$\mathcal{R}^-$	záporná reálná čísla
$\mathcal{R}_0^+$	nezáporná reálná čísla

$\text{Ran } \hat{A}$	obor hodnot operátoru $\hat{A}$
$\hat{S}$	operátor rozptylu, operátor S-matice
$\rho_\psi(\vec{P}, \vec{Q})$	Husimioho funkce pro stav ψ
$\hat{S}$	operátor komplexního škálování
s_l	element S-matice v bázi parciálních vln
σ	totální srážkový průřez
σ_l	parciální srážkový průřez
$\text{Span } A$	lineární obal množiny A
t	čas
$t(\vec{p}' \leftarrow \vec{p})$	T matice na energetické slupce
τ	časové zpoždění vlnového balíku způsobené rezonancí
$\mathcal{T}$	prostor periodických funkcí kvadraticky integrabilních na periodě
θ	úhel „otočení“ při komplexním škálování
$\hat{U}$	unitární propagátor
$\hat{U}_0$	unitární propagátor pro volný hamiltonián
v_0	rychlost vlnového balíku
$V(\vec{x})$	potenciální energie
$V(r)$	potenciální energie
V_0	hloubka pravoúhlé potenciálové jámy
$\hat{V}(\vec{x})$	operátor potenciální energie
$\hat{V}(r)$	operátor potenciální energie
$w(\chi \leftarrow \phi)$	pravděpodobnost přechodu ze stavu ϕ do stavu χ
$\vec{x}$	polohový vektor
$ \vec{x}\rangle$	zobecněný vlastní stav operátoru polohy
$\hat{\vec{x}}$	jednotkový vektor ve směru vektoru $\vec{x}$
ξ	prostorové zpoždění vlnového balíku způsobené rezonancí
$Y_l^m(\hat{\vec{x}})$	kulová funkce
$\mathcal{Z}$	množina celých čísel
$\mathcal{Z}^-$	množina záporných celých čísel $(-1, -2, -3, \dots)$

Kapitola 1

Úvod

V současné době se intenzivně zkoumá souvislost mezi klasickým a kvantovým popisem systémů. Motivace pochází z různých oblastí fyziky. Jednou z těchto problematik je tzv. kvantový chaos (viz [Boh91]), v němž zůstává stále mnoho otevřených problémů. V klasické fyzice je otázka chaosu dostatečně dobře pochopena a klasifikována, zatímco v kvantové mechanice není jeho role dostatečně přesně vymezena. Intenzivně se zkoumala diskrétní část spektra i rozptyl (viz [OT93]) a nabízí se zkoumání rezonancí v kvantové mechanice.

V klasické fyzice je systém popsán Hamiltonovými rovnicemi, které pro dané počáteční podmínky určují trajektorii ve fázovém prostoru, jehož dimenze je pro n -částic v prostoru rovna $6n$. V kvantové fyzice je stav systému reprezentován vektorem ze stavového prostoru, což je separabilní Hilbertův prostor. Pozorovatelné jsou pak představovány na něm definovanými samosdruženými operátory. Protože jednodimenzionální soustavy jsou regulární (integrabilní, nechaotické), tak systém, jenž vykazuje chaotické znaky, musí být minimálně dvoudimenzionální a příslušný hamiltonián nezávislý na čase, nebo jednodimenzionální s hamiltoniánem závislým na čase. V prvním případě je systém klasicky popsán fázovým prostorem s dimenzí minimálně 4, ve druhém případě s dimenzí 2, což poskytuje názornější představu. Proto se omezíme na tento typ systémů.

Existují systémy, jejichž fázový prostor má tzv. ostrovy stability a vzniká otázka, je-li nějaká souvislost těchto útvarů a rezonancí odpovídajícího kvantového systému. Tyto souvislosti již byly zkoumány u tzv. „kicked systémů“ (viz [Šeb93], [GŠ94]), které jsou popsány hamiltoniánem, v němž je časová závislost potenciálu vyjádřena pomocí δ -funkce:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(x) \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(t - n) \quad (1.1)$$

($\hat{H}_0$ je hamiltonián volné částice). Předmětem našeho zájmu však budou hamiltoniány spojitě závislé na čase. Navíc se omezíme na takové systémy, jejichž hamiltonián je na čase závislý periodicky. Je pak možno použít Floquetovy teorie a omezit se v čase pouze na konečný interval $(0, T)$. Námi zkoumané hamiltoniány budou mít

tvar

$$\hat{H}(t) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)(1 + V_1 \cos \omega t), \quad (1.2)$$

kde

$$\omega = \frac{2\pi}{T}. \quad (1.3)$$

Rezonanci kvantového systému odpovídá vlnová funkce, která není z příslušného Hilbertova prostoru. Pro výpočet rezonancí existuje více v praxi užívaných metod, které mají různý stupeň matematické rigoróznosti. Pro naše účely se jeví nejvhodnější metoda komplexního škálování, konkrétně metoda komplexní rotace hamiltoniánu, která stojí na rigorózním matematickém základu (viz [AC71]).

Práce je rozdělena do šesti částí. Ve druhé a třetí kapitole jsou zreprodukovány výsledky potenciálového rozptylu a teorie rezonancí, které jsou relevantní pro naši úlohu. Ve čtvrté kapitole jsou shrnuty principy metody komplexního škálování. V páté kapitole je popsána Floquetova teorie časově periodických kvantových systémů. Ve šesté kapitole je pojednáno o Husimiho funkci, kterou lze zvolit pro realizaci korespondence mezi klasickým fázovým prostorem a kvantově-mechanickým popisem. V poslední kapitole jsou pak popsány praktické metody hledání rezonancí v kvantových systémech a ukázána použitelnost ve výše uvedeném případě jednodimenzionálních systémů, jejichž hamiltonián periodicky závisí na čase.

Druhou „polovinou“ problému je nalezení příslušných trajektorií ve fázovém prostoru odpovídajícího klasického systému. To však již není součástí zadání této práce.

Kapitola 2

Základní pojmy teorie rozptylu

V této kapitole se budeme zabývat teorií rozptylu jedné částice na sféricky symetrickém potenciálu $V(r)$, který splňuje jisté předpoklady. Pokud nebude uvedeno jinak, odvozené výsledky jsou platné pro potenciál, který má tyto vlastnosti:

$$V(r) = O(r^{-3-\varepsilon}) \quad r \rightarrow \infty, \varepsilon > 0 \quad (2.1)$$

$$V(r) = O(r^{-\frac{3}{2}+\varepsilon}) \quad r \rightarrow 0, \varepsilon > 0 \quad (2.2)$$

$$V(r) \text{ je spojitá funkce až na konečný počet bodů nesesingulární nespojitosti.} \quad (2.3)$$

Většina vzorců a značení byla převzata z [Tay72]. Veškeré vztahy budou zapisovány pro $\hbar = 1$.

2.1 Klasický rozptyl

Uvažujme potenciál $V(r)$, který v okolí počátku roste dostatečně pomalu a v nekonečnu ubývá dostatečně rychle (viz (2.1)–(2.3)). Předpokládejme, že se klasická částice pohybuje z místa, které je dostatečně vzdálené od interakční oblasti. Po určité

Obr. 2.1: *Schematicky znázorněný pohyb klasické částice v blízkosti zdroje potenciálu $V(r)$.*

době (v čase $t \approx 0$) se přiblíží ke zdroji potenciálu $V(r)$, její trajektorie je ovlivněna a za dostatečně dlouhou dobu se částice opět vzdálí od interakční oblasti. Jestliže potenciál se vzdáleností dostatečně rychle ubývá, potom lze částici v časech $t \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow +\infty$ popisovat jako volnou, pro její trajektorii pak platí

$$\vec{x}(t) \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \vec{x}_{\text{in}}(t) \equiv \vec{q}_{\text{in}} + \vec{v}_{\text{in}} t \quad (2.4)$$

$$\vec{x}(t) \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \vec{x}_{\text{out}}(t) \equiv \vec{q}_{\text{out}} + \vec{v}_{\text{out}} t. \quad (2.5)$$

2.2 Kvantově-mechanický popis rozptylu

2.2.1 Základní pojmy

Uvažujme kvantovou částici, která je v čase $t \rightarrow -\infty$ lokalizována v dostatečně velké vzdálenosti od zdroje potenciálu $V(r)$ a která se pohybuje směrem k interakční oblasti. Předpokládejme, že v čase $t \approx 0$ je částice pod vlivem interakce a dále se pohybuje mimo interakční oblast. V čase $t \rightarrow +\infty$ je pak již částice prakticky mimo dosah interakce.

Hamiltonián takového systému lze zapsat jako

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(r), \quad (2.6)$$

kde $\hat{H}_0$ je hamiltonián volné částice a V je potenciál vyhovující podmínkám (2.1)–(2.3). V x -reprezentaci lze hamiltonián (2.6) zapsat jako diferenciální operátor

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m}\Delta + V\left(\sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}\right), \quad (2.7)$$

v polárních souřadnicích

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{\sin\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right)\right] + V(r). \quad (2.8)$$

Označme $\mathcal{H}$ stavový prostor našeho systému. Potom chování částice lze popsat Schrödingerovou rovnicí:

$$i\frac{d}{dt}|\psi_t\rangle = \hat{H}|\psi_t\rangle. \quad (2.9)$$

Označme unitární propagátor volné částice a částice pod vlivem interakce jako

$$\hat{U}_0(t) \equiv \hat{U}_0(t, 0) = e^{-i\hat{H}_0 t}, \quad (2.10)$$

$$\hat{U}(t) \equiv \hat{U}(t, 0) = e^{-i\hat{H} t} \quad (2.11)$$

a $|\psi_t\rangle$, $|\psi_{-\infty}\rangle$, $|\psi_{+\infty}\rangle$, $|\psi\rangle$ stav částice v časech t , $t \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow +\infty$, $t = 0$. Pak lze psát

$$|\psi_t\rangle = \hat{U}(t)\hat{U}^{-1}(-\infty)|\psi_{-\infty}\rangle, \quad (2.12)$$

$$|\psi_t\rangle = \hat{U}(t)\hat{U}^{-1}(+\infty)|\psi_{+\infty}\rangle, \quad (2.13)$$

$$|\psi\rangle = \hat{U}^{-1}(-\infty)|\psi_{-\infty}\rangle. \quad (2.14)$$

Kdyby na částici nepůsobila interakce, pak by ji bylo možno v čase $t = 0$ popsat stavem

$$|\psi_{\text{in}}\rangle = \hat{U}_0^{-1}(-\infty) |\psi_{-\infty}\rangle. \quad (2.15)$$

Podobně definujeme i stav $|\psi_{\text{out}}\rangle$

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = \hat{U}_0^{-1}(+\infty) |\psi_{+\infty}\rangle. \quad (2.16)$$

Nachází-li se částice v dostatečné vzdálenosti od interakční oblasti, lze ji popsat jako volnou

$$\hat{U}(t) |\psi\rangle \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \hat{U}_0(t) |\psi_{\text{in}}\rangle, \quad (2.17)$$

$$\hat{U}(t) |\psi\rangle \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} \hat{U}_0(t) |\psi_{\text{in}}\rangle. \quad (2.18)$$

2.2.2 Asymptotická podmínka

Jestliže potenciál V splňuje podmínku $\int d^3\vec{x} |V(\vec{x})|^2 < \infty$, pak pro každý stav $|\psi_{\text{in}}\rangle \in \mathcal{H}$ existuje $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ takový, že

$$\hat{U}(t) |\psi\rangle \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \hat{U}_0(t) |\psi_{\text{in}}\rangle \quad (2.19)$$

a podobně pro $|\psi_{\text{out}}\rangle \in \mathcal{H}$ a $t \rightarrow +\infty$.

Důkaz je proveden např. v [Tay72], §2-c. Definujeme-li tzv. Møllerovy vlnové operátory

$$\hat{\Omega}_+ = \lim_{t \rightarrow -\infty} \hat{U}^{-1}(t) \hat{U}_0(t), \quad (2.20)$$

$$\hat{\Omega}_- = \lim_{t \rightarrow +\infty} \hat{U}^{-1}(t) \hat{U}_0(t), \quad (2.21)$$

pak lze psát

$$|\psi\rangle = \hat{\Omega}_+ |\psi_{\text{in}}\rangle, \quad (2.22)$$

$$|\psi\rangle = \hat{\Omega}_- |\psi_{\text{out}}\rangle. \quad (2.23)$$

Lze ukázat, že operátory $\hat{\Omega}_+$, $\hat{\Omega}_-$ jsou izometrické a tedy operátory $\hat{\Omega}_+ \upharpoonright \text{Ran } \hat{\Omega}_+$, $\hat{\Omega}_- \upharpoonright \text{Ran } \hat{\Omega}_-$ jsou unitární.

2.2.3 Teorém ortogonality

Jestliže je splněna asymptotická podmínka, potom

$$\mathcal{R}_+ \perp \mathcal{B}, \quad (2.24)$$

$$\mathcal{R}_- \perp \mathcal{B}, \quad (2.25)$$

kde

$$\mathcal{R}_+ = \text{Ran } \hat{\Omega}_+, \quad (2.26)$$

$$\mathcal{R}_- = \text{Ran } \hat{\Omega}_- \quad (2.27)$$

a $\mathcal{B}$ je podprostor vázaných stavů hamiltoniánu $\hat{H}$.

Důkaz je proveden např. v [Tay72], §2-d.

2.2.4 Podmínka asymptotické úplnosti

Jestliže potenciál $V(\vec{x})$ splňuje podmínky (2.1)–(2.3), potom

$$\mathcal{R}_+ = \mathcal{R}_- \equiv \mathcal{R}. \quad (2.28)$$

Za předpokladu, že platí podmínka asymptotické úplnosti, lze Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ zapsat jako

$$\mathcal{H} = \mathcal{R} \oplus \mathcal{B}. \quad (2.29)$$

2.2.5 Operátor S-matice

Definujeme-li tzv. operátor S-matice jako unitární operátor

$$\hat{S} = \hat{\Omega}_-^\dagger \hat{\Omega}_+, \quad (2.30)$$

lze psát

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = \hat{S} |\psi_{\text{in}}\rangle \quad (2.31)$$

a pro pravděpodobnost přechodu ze stavu ϕ v čase $t = -\infty$ do stavu χ v čase $t = +\infty$ platí

$$w(\chi \leftarrow \phi) = |\langle \chi - | \phi + \rangle|^2 \quad (2.32)$$

$$= |\langle \chi | \hat{S} | \phi \rangle|^2, \quad (2.33)$$

kde jsme označili

$$|\phi + \rangle = \hat{\Omega}_+ |\phi \rangle, \quad (2.34)$$

$$|\chi + \rangle = \hat{\Omega}_- |\chi \rangle. \quad (2.35)$$

Zobecněný vlastní vektor $|\vec{p}\rangle$ operátoru hybnosti je zároveň zobecněným vlastním vektorem volného hamiltoniánu $\hat{H}_0$ s normalizací

$$\langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = \delta_3(\vec{p}' - \vec{p}) \quad (2.36)$$

a v x -reprezentaci jej lze zapsat

$$\langle \vec{x} | \vec{p} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{p}\vec{x}}. \quad (2.37)$$

Libovolný stav $|\psi\rangle \in \mathcal{R}$ lze pak zapsat jako

$$|\psi\rangle = \int d^3\vec{p} \psi(\vec{p}) |\vec{p}\rangle \quad (2.38)$$

a pak lze psát

$$\psi_{\text{out}}(\vec{p}) = \int d^3\vec{p}' \langle \vec{p} | \hat{S} | \vec{p}' \rangle \psi_{\text{in}}(\vec{p}'), \quad (2.39)$$

kde pro element S-matice platí

$$\langle \vec{p}' | \hat{S} | \vec{p}' \rangle = \delta_3(\vec{p}' - \vec{p}) - 2\pi i \delta(E_{\vec{p}'} - E_{\vec{p}}) t(\vec{p}' \leftarrow \vec{p}) \quad (2.40)$$

$$= \delta_3(\vec{p}' - \vec{p}) + \frac{i}{2\pi m} \delta(E_{\vec{p}'} - E_{\vec{p}}) f(\vec{p}' \leftarrow \vec{p}), \quad (2.41)$$

kde

$$E_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^2}{2m}, \quad (2.42)$$

m je hmotnost částice, $t(\vec{p}' \leftarrow \vec{p})$ je T matice na energetické slupce a $f(\vec{p}' \leftarrow \vec{p})$ je rozptylová amplituda. Funkce $t(\vec{p}' \leftarrow \vec{p})$ a $f(\vec{p}' \leftarrow \vec{p})$ jsou definované pouze pro hodnoty $\vec{p}'^2 = \vec{p}^2$ a jsou spojité vzhledem k obou svým argumentům. Rovnici (2.39) lze pak přepsat

$$\psi_{\text{out}}(\vec{p}) = \psi_{\text{in}}(\vec{p}) + \frac{i}{2\pi m} \int d^3\vec{p}' \delta(E_{\vec{p}'} - E_{\vec{p}}) f(\vec{p}' \leftarrow \vec{p}) \psi_{\text{in}}(\vec{p}'). \quad (2.43)$$

Jestliže jsou ve vlnovém balíku zkoumané částice převážně vlny s hybnostmi blízkými hodnotě $\vec{p}_0$, potom pravděpodobnost, že po interakci se bude částice pohybovat ve směru určeném vektorem $\vec{p}$ a v elementu prostorového úhlu $d\Omega$, je rovna diferenciálnímu srážkovému průřezu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\vec{p}_0 \leftarrow \vec{p}) = |f(\vec{p}_0 \leftarrow \vec{p})|^2. \quad (2.44)$$

Totální srážkový průřez je pak definovaný jako

$$\sigma(p_0) = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (2.45)$$

2.2.6 Rozvoj do parciálních vln

Hamiltonián volné částice $\hat{H}_0$, operátor čtverce momentu hybnosti $\hat{L}^2$ a operátor třetí složky momentu hybnosti $\hat{L}_3$ tvoří úplnou soustavu komutujících operátorů. Jejich společné vlastní vektory $|E, l, m\rangle$ pak vytvářejí ortonormální bázi Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$. V x -reprezentaci lze psát

$$\langle \vec{x} | E, l, m \rangle = i^l \frac{1}{r} \sqrt{\frac{2m}{\pi p}} \hat{j}_l(pr) Y_l^m(\hat{\vec{x}}), \quad (2.46)$$

kde $\hat{j}_l(z) = z j_l(z)$ je Riccati-Besselova funkce, $j_l(z)$ sférická Besselova funkce, $Y_l^m(\hat{\vec{x}})$ kulová funkce, závislá na jednotkovém vektoru $\hat{\vec{x}}$ ve směru vektoru $\vec{x}$, a $p = \sqrt{2mE}$. Normalizace vektorů $|E, l, m\rangle$ je

$$\langle E', l', m' | E, l, m \rangle = \delta(E' - E) \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (2.47)$$

Operátor S-matice je v této ortonormální bázi diagonální:

$$\langle E', l', m' | \hat{S} | E, l, m \rangle = \delta(E' - E) \delta_{l'l} \delta_{m'm} s_l(E). \quad (2.48)$$

Vlastní číslo operátoru $\hat{S}$ lze zapsat pomocí fázového posunu $\delta_l(E)$

$$s_l(E) = e^{2i\delta_l(E)}. \quad (2.49)$$

Zapišeme-li vektor $|E, l, m\rangle$ v p -reprezentaci jako

$$\langle \vec{p} | E, l, m \rangle = \frac{1}{\sqrt{m p}} \delta(E_{\vec{p}} - E) Y_l^m(\hat{\vec{p}}), \quad (2.50)$$

pak lze z rovnice (2.41) vyjádřit amplitudu rozptylu $f(\vec{p}' \leftarrow \vec{p})$ jako

$$f(\vec{p}' \leftarrow \vec{p}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(E) P_l(\cos \theta), \quad (2.51)$$

kde P_l je Legendreův polynom, θ úhel mezi vektory $\vec{p}$, $\vec{p}'$ a

$$f_l(E) = \frac{s_l(E) - 1}{2ip} \quad (2.52)$$

$$= \frac{e^{i\delta_l(E)} \sin \delta_l(E)}{p} \quad (2.53)$$

je parciální amplituda rozptylu (amplituda rozptylu l -té parciální vlny). Pro totální srážkový průřez pak platí

$$\sigma(p) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l(p), \quad (2.54)$$

kde

$$\sigma_l(p) = 4\pi(2l+1) |f_l(p)|^2 \quad (2.55)$$

$$= 4\pi(2l+1) \frac{\sin^2 \delta_l(E)}{p^2}. \quad (2.56)$$

2.2.7 Greenův a T operátor

Pro volný hamiltonián a hamiltonián s interakcí definujeme Greenův operátor (rezolventu hamiltoniánu)

$$\hat{G}_0(z) = (z - \hat{H}_0)^{-1}, \quad (2.57)$$

$$\hat{G}(z) = (z - \hat{H})^{-1}, \quad (2.58)$$

který je definován pro všechna $z \in \mathcal{C}$, pro která existuje inverze. Jestliže je z z bodové části spektra, má $\hat{G}(z)$ v bodě z pól, jehož reziduum je projektor na příslušný vlastní podprostor. Např. má-li $\hat{H}$ čistě diskrétní spektrum, vlastní vektory $|n\rangle$, pak

$$\hat{G}(z) = \sum_n \frac{|n\rangle \langle n|}{z - E_n} \quad (2.59)$$

a $\hat{G}(z)$ má v bodě $z = E_n$ pól s reziduem $|n\rangle\langle n|$. Jestliže z není ze spektra operátoru $\hat{H}$, je $\hat{G}(z)$ analytická operátorová funkce ($\forall \phi, \psi$ je $\langle \phi | \hat{G}(z) | \psi \rangle$ analytická funkce). Je-li z se spojitě části spektra, má $\hat{G}(z)$ v z nespojitost

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} (\hat{G}(z + i\varepsilon) - \hat{G}(z - i\varepsilon)) = -2\pi i. \quad (2.60)$$

Greenův operátor pro volný hamiltonián je v p -reprezentaci diagonální

$$\hat{G}_0(z) |\vec{p}\rangle = \frac{1}{z - E_{\vec{p}}} |\vec{p}\rangle \quad (2.61)$$

a v x -reprezentaci lze zapsat:

$$\langle \vec{x} | \hat{G}_0(z) | \vec{x}' \rangle = -\frac{m}{2\pi} \frac{\exp(i\sqrt{2mz}|\vec{x} - \vec{x}'|)}{|\vec{x} - \vec{x}'|}. \quad (2.62)$$

Definujeme-li operátor

$$\hat{T}(z) = \hat{V} + \hat{V} \hat{G}(z) \hat{V}, \quad (2.63)$$

lze Greenův operátor vyjádřit

$$\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z) \hat{T}(z) \hat{G}_0(z). \quad (2.64)$$

Pro operátor $\hat{T}(z)$ platí Lippmann-Schwingerova rovnice:

$$\hat{T}(z) = \hat{V} + \hat{V} \hat{G}_0(z) \hat{T}(z). \quad (2.65)$$

Pomocí operátoru $\hat{T}(z)$ lze spočítat element S-matice

$$\langle \vec{p} | \hat{S} | \vec{p}' \rangle = \delta_3(\vec{p}' - \vec{p}) - 2\pi i \delta(E_{\vec{p}'} - E_{\vec{p}}) \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \langle \vec{p}' | \hat{T}(E_{\vec{p}} + i\varepsilon) | \vec{p} \rangle \quad (2.66)$$

a funkci $t(\vec{p}' \leftarrow \vec{p})$ pak lze definovat i mimo energetickou slupku

$$t(\vec{p}' \leftarrow \vec{p}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \langle \vec{p}' | \hat{T}(E_{\vec{p}} + i\varepsilon) | \vec{p} \rangle. \quad (2.67)$$

2.2.8 Stav $|\vec{p}+\rangle$ a $|\vec{p}-\rangle$

Je-li $|\psi\rangle$ superpozicí rovinných vln $|\vec{p}\rangle$

$$|\psi\rangle = \int d^3\vec{p} \psi(\vec{p}) |\vec{p}\rangle, \quad (2.68)$$

lze stavy $|\psi+\rangle \equiv \hat{\Omega}_+ |\psi\rangle$, $|\psi-\rangle \equiv \hat{\Omega}_- |\psi\rangle$ vyjádřit jako superpozici

$$|\psi+\rangle = \int d^3\vec{p} \psi(\vec{p}) |\vec{p}+\rangle, \quad (2.69)$$

$$|\psi-\rangle = \int d^3\vec{p} \psi(\vec{p}) |\vec{p}-\rangle, \quad (2.70)$$

kde

$$|\vec{p}+\rangle = \hat{\Omega}_+ |\vec{p}\rangle, \quad (2.71)$$

$$|\vec{p}-\rangle = \hat{\Omega}_- |\vec{p}\rangle. \quad (2.72)$$

Lze ukázat, že stavy $|\vec{p}+\rangle$, $|\vec{p}-\rangle$ jsou vlastní vektory hamiltoniánu $\hat{H}$

$$\hat{H}|\vec{p}+\rangle = E_{\vec{p}}|\vec{p}+\rangle, \quad (2.73)$$

$$\hat{H}|\vec{p}-\rangle = E_{\vec{p}}|\vec{p}-\rangle, \quad (2.74)$$

a vytvářejí dvě ortonormální báze prostoru $\mathcal{R}$.

Pomocí operátoru $\hat{T}(z)$ lze vztah mezi $|\vec{p}\rangle$ a $|\vec{p}+\rangle$, $|\vec{p}-\rangle$ zapsat

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \hat{T}(E_{\vec{p}} + i\varepsilon) |\vec{p}\rangle = \hat{V} |\vec{p}+\rangle, \quad (2.75)$$

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \hat{T}(E_{\vec{p}} - i\varepsilon) |\vec{p}\rangle = \hat{V} |\vec{p}-\rangle \quad (2.76)$$

a potom

$$t(\vec{p}' \leftarrow \vec{p}) = \langle \vec{p}' | \hat{V} | \vec{p}+\rangle, \quad (2.77)$$

$$t(\vec{p}' \leftarrow \vec{p}) = \langle \vec{p}' - | \hat{V} | \vec{p}\rangle. \quad (2.78)$$

Pomocí Greenovy funkce lze vztah mezi $|\vec{p}\rangle$ a $|\vec{p}+\rangle$, $|\vec{p}-\rangle$ zapsat

$$|\vec{p}+\rangle = |\vec{p}\rangle + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \hat{G}(E_{\vec{p}} + i\varepsilon) \hat{V} |\vec{p}\rangle, \quad (2.79)$$

$$|\vec{p}-\rangle = |\vec{p}\rangle + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \hat{G}(E_{\vec{p}} - i\varepsilon) \hat{V} |\vec{p}\rangle, \quad (2.80)$$

nebo

$$|\vec{p}+\rangle = |\vec{p}\rangle + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \hat{G}_0(E_{\vec{p}} + i\varepsilon) \hat{V} |\vec{p}+\rangle, \quad (2.81)$$

$$|\vec{p}-\rangle = |\vec{p}\rangle + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \hat{G}_0(E_{\vec{p}} - i\varepsilon) \hat{V} |\vec{p}-\rangle, \quad (2.82)$$

což je Lippmann-Schwingerova rovnice pro stavy $|\vec{p}+\rangle$, $|\vec{p}-\rangle$. Zapišeme-li ji v x -reprezentaci, dostaneme

$$\langle \vec{x} | \vec{p}+\rangle = \langle \vec{x} | \vec{p}\rangle - \frac{m}{2\pi} \int d^3 \vec{x}' \frac{\exp(i p |\vec{x} - \vec{x}'|)}{|\vec{x} - \vec{x}'|} V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \vec{p}+\rangle, \quad (2.83)$$

$$\langle \vec{x} | \vec{p}-\rangle = \langle \vec{x} | \vec{p}\rangle - \frac{m}{2\pi} \int d^3 \vec{x}' \frac{\exp(-i p |\vec{x} - \vec{x}'|)}{|\vec{x} - \vec{x}'|} V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \vec{p}-\rangle, \quad (2.84)$$

což lze v limitě $r \rightarrow +\infty$ pro $|\vec{p}\rangle$ zapsat jako

$$\langle \vec{x} | \vec{p}+\rangle \xrightarrow{r \rightarrow +\infty} (2\pi)^{-3/2} \left[e^{i p \vec{x}} + f(p \hat{x} \leftarrow \vec{p}) \frac{e^{i p r}}{r} \right]. \quad (2.85)$$

Máme-li tedy vlnový balík $\psi_{\text{in}}(\vec{x}, t)$, jehož hybnost je lokalizována kolem hodnoty $\vec{p}_0$, pak příslušná vlnová funkce $\psi(\vec{x}, t)$ je ve velkých vzdálenostech od centra interakce superpozicí dvou vln

$$\psi(\vec{x}, t) = \psi_{\text{in}}(\vec{x}, t) + \psi_{\text{sc}}(\vec{x}, t), \quad (2.86)$$

původní vlny $\psi_{\text{in}}(\vec{x}, t)$ a roztýlené kulové vlny $\psi_{\text{sc}}(\vec{x}, t)$

$$\psi_{\text{sc}}(\vec{x}, t) = \frac{f(p_0 \hat{x} \leftarrow \vec{p}_0)}{r} \psi_{\text{in}}(r \hat{p}_0, t), \quad (2.87)$$

která se šíří stejnou rychlostí, jako původní vlna.

2.2.9 Jostova funkce

Vraťme se ještě k parciálním vlnám $|E, l, m\rangle$. Lze ukázat, že příslušný out-stav $|E, l, m+\rangle$ lze v x -reprezentaci zapsat

$$\langle \vec{x} | E, l, m+\rangle = i^l \frac{1}{r} \sqrt{\frac{2m}{\pi p}} \psi_{l,p}(r) Y_l^m(\hat{x}), \quad (2.88)$$

kde funkce $\psi_{l,p}(r)$ je určena diferenciální rovnicí

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + p^2 \right] \psi_{l,p}(r) = 0, \quad (2.89)$$

$$U(r) = 2mV(r) \quad (2.90)$$

a okrajovou podmínkou

$$\psi_{l,p}(0) = 0. \quad (2.91)$$

Z normalizace

$$\langle E', l', m' + | E, l, m+\rangle = \delta(E' - E) \delta_{l'l} \delta_{m'm} \quad (2.92)$$

navíc plyne, že

$$\int_0^{+\infty} \psi_{l,p'}(r)^* \psi_{l,p}(r) dr = \frac{\pi}{2} \delta(p' - p). \quad (2.93)$$

Proto se řešení $\psi_{l,p}(r)$ nazývá normalizovaná radiální funkce. Zajímavé je chování $\psi_{l,p}(r)$, když $r \rightarrow +\infty$:

$$\psi_{l,p}(r) \xrightarrow{r \rightarrow +\infty} j_l(pr) + p f_l(p) \hat{h}_l^+(pr) \quad (2.94)$$

$$\xrightarrow{r \rightarrow +\infty} e^{i\delta_l(p)} \sin[pr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l(p)] \quad (2.95)$$

$$\xrightarrow{r \rightarrow +\infty} \frac{i}{2} [\hat{h}_l^-(pr) - s_l(p) \hat{h}_l^+(pr)], \quad (2.96)$$

kde $\hat{h}_l^+(z)$, $\hat{h}_l^-(z)$ jsou Riccati-Hankelovy funkce $\hat{h}_l^+(z) = \hat{n}_l(z) + i\hat{j}_l(z)$, $\hat{h}_l^-(z) = \hat{n}_l(z) - i\hat{j}_l(z)$. $\hat{n}_l(z) = z n_l(z)$ je Riccati-Neumannova funkce a $n_l(z)$ je Neumannova funkce. Chování funkcí $\hat{h}_l^+(z)$, $\hat{h}_l^-(z)$ pro $r \rightarrow +\infty$ je

$$\hat{h}_l^+(z) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} e^{+i(z-l\pi/2)}, \quad (2.97)$$

$$\hat{h}_l^-(z) \xrightarrow{z \rightarrow +\infty} e^{-i(z-l\pi/2)}. \quad (2.98)$$

Z (2.95) je zřejmé, proč se veličině $\delta_l(p)$ říká fázový posun. Pro velká r je totiž radiální funkce $\psi_{l,p}(r)$ násobkem volné radiální funkce $\sin(pr - \frac{1}{2}l\pi)$ až na fázový posun $\delta_l(p)$. Místo okrajové podmínky (2.91) a normalizace (2.92) lze na $\psi_{l,p}(r)$ naložit pouze jednu z podmínek (2.94)–(2.96).

Jiné řešení $\phi_{l,p}(r)$ rovnice (2.89) lze obdržet naložením okrajové podmínky

$$\phi_{l,p}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} \hat{j}_l(pr) \quad (2.99)$$

$$\xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{(pr)^{l+1}}{(2l+1)!!}. \quad (2.100)$$

Funkce $\phi_{l,p}(r)$ je násobkem funkce $\psi_{l,p}(r)$ a takto určenému řešení rovnice (2.89) budeme říkat regulární řešení. Chování $\phi_{l,p}(r)$ v nekonečnu definuje tzv. Jostovu funkci $\mathbf{f}_l(p)$:

$$\phi_{l,p}(r) \xrightarrow{r \rightarrow +\infty} \frac{i}{2} [\mathbf{f}_l(p) \hat{h}_l^-(pr) - \mathbf{f}_l(p)^* \hat{h}_l^+(pr)]. \quad (2.101)$$

Porovnáním (2.101) a (2.96) se snadno zjistí, že

$$\phi_{l,p}(r) = \mathbf{f}_l(p) \psi_{l,p}(r) \quad (2.102)$$

a

$$s_l(p) = \frac{\mathbf{f}_l(p)^*}{\mathbf{f}_l(p)}. \quad (2.103)$$

Odtud lze Jostovu funkci zapsat pomocí fázového posunu $\delta_l(p)$:

$$\mathbf{f}_l(p) = |\mathbf{f}_l(p)| e^{-i\delta_l(p)}. \quad (2.104)$$

Dále budeme potřebovat vyjádření Jostovy funkce pomocí funkce $\phi_{l,p}(r)$:

$$\mathbf{f}_l(p) = 1 + \frac{1}{p} \int_0^{+\infty} \hat{h}_l^+(pr) U(r) \phi_{l,p}(r) dr. \quad (2.105)$$

Definujme dvě nová řešení $\chi_{l,p}^+(r)$, $\chi_{l,p}^-(r)$ (tzv. Jostova řešení) rovnice (2.89) definovaná podmínkami

$$\chi_{l,p}^+(r) \xrightarrow{r \rightarrow +\infty} \hat{h}_l^+(pr), \quad (2.106)$$

$$\chi_{l,p}^-(r) \xrightarrow{r \rightarrow +\infty} \hat{h}_l^-(pr). \quad (2.107)$$

Regulární řešení $\phi_{l,p}(r)$ pak lze zapsat jako lineární kombinace funkcí $\chi_{l,p}^+(r)$, $\chi_{l,p}^-(r)$ a příslušné kombinační koeficienty jsou pak určeny Jostovou funkcí $\mathbf{f}_l(p)$:

$$\phi_{l,p}(r) = \frac{i}{2} [\mathbf{f}_l(p) \chi_{l,p}^-(r) - \mathbf{f}_l(p)^* \chi_{l,p}^+(r)]. \quad (2.108)$$

2.2.10 Analytické vlastnosti Jostovy funkce

Zatím jsme se zabývali řešením rovnice (2.89) pouze pro hodnoty $p \geq 0$. Platí následující tvrzení:

Pro libovolné $p \in \mathcal{C}$ je regulární řešením diferenciální rovnice (2.89) vzhledem k p analytické v celé komplexní rovině.

Pomocí (2.105) lze Jostovu funkci dodefinovat i mimo fyzikální oblast $p \geq 0$. Lze ukázat, že takto definovaná Jostova funkce je analytická v celé horní komplexní polorovině bez reálné osy a spojitá v celé horní polorovině včetně reálné osy. Dále musí pro Jostovu funkci na oblasti analyticity platit

$$\mathbf{f}_l(p) = [\mathbf{f}_l(-p^*)]^* \quad (2.109)$$

a tedy

$$s_l(p) = \frac{\mathbf{f}_l(p)^*}{\mathbf{f}_l(p)} = \frac{\mathbf{f}_l(-p)}{\mathbf{f}_l(p)}. \quad (2.110)$$

Lze ukázat, že pro potenciál $V(r)$, který je nenulový pouze na omezené oblasti, nemá Jostova funkce póly — je analytická v celé komplexní rovině. Funkce $s_l(p)$ je tedy meromorfní (analytická v celé komplexní rovině, až na póly v bodech, kde $\mathbf{f}_l(p) = 0$). Z toho plyne, že póly Jostovy funkce v dolní komplexní polorovině nemají fyzikální smysl, jsou citlivé na chování potenciálu ve velkých vzdálenostech. Vynulujeme-li potenciál ve vzdálenosti třeba 10 000 kilometrů od centra interakce, póly Jostovy funkce zmizí, ale žádné měřitelné veličiny se nezmění.

Nuly Jostovy funkce v horní komplexní polorovině mají důležitý fyzikální význam. Lze ukázat, že rovnice $\mathbf{f}_l(p) = 0$ má v horní polorovině kořeny pouze na imaginární ose. V regulárním řešení $\phi_{l,p}(r)$ pak je přítomna pouze v nekonečnu ubývající vlna $-\frac{i}{2}\mathbf{f}_l(-p)\chi_{l,p}^+(r)$ a $\phi_{l,p}(r)$ pak určuje normalizovatelnou vlastní funkci hamiltoniánu příslušnou k vlastnímu číslu $p^2 < 0$. Funkce $\mathbf{f}_l(p)$ nemůže být v bodě $-p$ nulová, protože pak by $\phi \equiv 0$, což není možné. Lze tedy shrnout, že nuly Jostovy funkce $\mathbf{f}_l(p)$ a póly S-matice $s_l(p)$ v horní komplexní polorovině odpovídají vázaným stavům hamiltoniánu (a naopak).

Zvlášť je však třeba diskutovat případ, kdy $\mathbf{f}_l(p) = 0$ pro $p = 0$. Je-li $l > 0$, pak $\mathbf{f}_l(0) = 0$ právě tehdy, když existuje vázaný stav s nulovou energií. Je-li $l = 0$, potom vázaný stav s nulovou energií neexistuje a amplituda rozptylu $f_0(p)$ (srážkový průřez $\sigma_0(p)$) jde pro $p \rightarrow 0+$ k nekonečnu — nastává tzv. rezonance při nulové energii.

2.2.11 Jednodimenzionální rozptyl

V této kapitole se budeme zabývat speciálním případem, kdy zkoumaný rozptylový proces se odehrává v jednodimenzionálním prostoru. Systém je tedy popsán hamiltoniánem

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}(x), \quad (2.111)$$

definovaným na hustém podprostoru prostoru $L^2(\mathcal{R})$.

Prostor $L^2(\mathcal{R})$ lze zapsat jako direktní součet prostoru kvadraticky integrabilních funkcí, které jsou sudé a liché

$$L^2(\mathcal{R}) = L^{2(0)}(\mathcal{R}) \oplus L^{2(1)}(\mathcal{R}). \quad (2.112)$$

Protože prostory $L^{2(0)}(\mathcal{R})$ a $L^{2(1)}(\mathcal{R})$ jsou invariantní vzhledem k volnému hamiltoniánu $\hat{H}_0$, je ortonormální báze prostoru $L^2(\mathcal{R})$ tvořena vlastními vektory $\langle x|E, 0\rangle$, $\langle x|E, 1\rangle$ operátoru $\hat{H}_0$, které jsou sudé, resp. liché funkce

$$\hat{H}_0 \langle x|E, l\rangle = E \langle x|E, l\rangle, \quad \langle x|E, l\rangle \in L^{2(l)}, \quad l = 0, 1. \quad (2.113)$$

Pro vlnové funkce

$$\langle x|E, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos px, \quad (2.114)$$

$$\langle x|E, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin px, \quad (2.115)$$

kde

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad p > 0, \quad (2.116)$$

platí podmínka ortonormality:

$$\langle E', l'|E, l\rangle = \delta_{l',l} \delta(E' - E). \quad (2.117)$$

Příslušné out-stavy $\langle x|E, l; +\rangle$ jsou až na konstantu určeny funkcí $\phi_{l,p}(x)$, která splňuje diferenciální rovnici

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - U(x) + p^2 \right] \phi_{l,p}(x) = 0 \quad (2.118)$$

a okrajovou podmínku

$$\phi_{0,p}(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} \cos x, \quad (2.119)$$

$$\phi_{1,p}(x) \xrightarrow{x \rightarrow 0} \sin x. \quad (2.120)$$

Asymptotické chování $\phi_{l,p}(x)$ v nekonečno pak definuje Jostovu funkci $\mathbf{f}_l(p)$:

$$\phi_{l,p}(x) \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} \frac{i}{2} [\mathbf{f}_l(p) e^{-ipx} - \mathbf{f}_l^*(p) e^{ipx}], \quad (2.121)$$

$$\phi_{l,p}(x) \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} \frac{i}{2} (-1)^l [\mathbf{f}_l^*(p) e^{-ipx} - \mathbf{f}_l(p) e^{ipx}]. \quad (2.122)$$

V [For83] §3.2.7 je odvozeno asymptotické chování $\langle x|p+\rangle$:

$$\langle x|p+\rangle \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} B(p) \langle x|p\rangle, \quad (2.123)$$

$$\langle x|p+\rangle \xrightarrow{x \rightarrow -\infty} \langle x|p\rangle + A(p) \langle x|-p\rangle. \quad (2.124)$$

Čísla

$$R = |A(p)|^2, \quad (2.125)$$

$$P = |B(p)|^2 \quad (2.126)$$

se nazývají koeficienty odrazu a průchodu a představují pravděpodobnost, že po dostatečně dlouhé době bude částice nalezena před, resp. za interakční oblastí. Platí tedy vztah

$$R + P = 1. \quad (2.127)$$

Kapitola 3

Rezonance

3.1 Rezonance a nuly Jostovy funkce

Zabývejme se nyní nulami Jostovy funkce v dolní komplexní polorovině. Nechť $\mathbf{f}_l(p)$ má nulu v bodě

$$\bar{p} = p_R - ip_I, \quad p_R, p_I \in \mathcal{R}^+. \quad (3.1)$$

Stejně jako v případě vázaných stavů, je regulární řešení úměrné funkci $\chi_l^+(r)$. Nyní však není normalizovatelné, ale v nekonečnu exponenciálně diverguje. Nejedná se tedy o vlastní funkci hamiltoniánu. Předpokládejme, že hodnota $\bar{p}$ je blízko reálné osy a $\mathbf{f}_l(p)$ lze v okolí bodu p_R aproximovat

$$\mathbf{f}_l(p) \approx \left. \frac{d\mathbf{f}_l}{dp} \right|_{\bar{p}} (p - \bar{p}). \quad (3.2)$$

Odtud lze pak s využitím (2.104) pro $p \in \mathcal{R}$ v okolí p_R vyjádřit fázový posun

$$\delta_l(p) \approx -\arg \left. \frac{d\mathbf{f}_l}{dp} \right|_{\bar{p}} - \arg(p - \bar{p}) \quad (3.3)$$

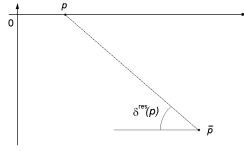
$$\equiv \delta_l^{\text{bg}} + \delta_l^{\text{res}}, \quad (3.4)$$

kde δ_l^{bg} je tzv. zpětný fázový posun a δ_l^{res} je rezonanční část fázového posunu. Z obrázku 3.1 je zřejmé, že pohybuje-li se bod p po reálné ose, tak v blízkosti bodu $\bar{p}$ se hodnota fázového posunu rapidně mění a to tím rychleji, čím blíže k reálné ose je $\bar{p}$. S hodnotou fázového posunu bezprostředně souvisí měřitelná veličina – srážkový průřez $\sigma_l(p)$

$$\sigma_l(p) = 4\pi(2l+1) \frac{\sin^2 \delta_l(p)}{p^2}. \quad (3.5)$$

Jeho chování v okolí hodnoty p_R se také rychle mění a závisí na zpětném fázovém posunu $\delta_l^{\text{bg}}(p)$.

Na obr. 3.2–3.5 jsou grafy závislosti fázového posunutí $\delta(p)$ a $\sin^2 \delta(p)$ na p v okolí p_R pro různé hodnoty zpětného fázového posunu δ^{bg} : 0, $\pi/4$, $\pi/2$ a $3\pi/4$ a pro $\bar{p} = 5 - 0.05i$. Na obr. 3.2 je klasický typ rezonance — čistá Breit-Wignerova



Obr. 3.1: *Rezonanční část $\delta_l^{\text{res}}(p)$.*

rezonance. Ve skutečnosti jsou však průběhy fázového posunutí a srážkového průřezu trochu odlišné, než je zobrazeno v grafech. Je to tím, že hodnota zpětného fázového posunu δ_l^{bg} není na p nezávislá (či jinak řečeno, (3.3) je pouhá aproximace skutečného průběhu $\delta_l(p)$).

Nuly Jostovy funkce na záporné imaginární ose p jsou tzv. virtuální stavy. Virtuální stav ovlivní měřitelné veličiny pouze tehdy, když se nachází v bezprostřední blízkosti počátku. Mluvíme pak o tzv. rezonanci při nulové energii.

Dále budeme rezonancí označovat pouze ty nuly Jostovy funkce (póly S-matice $s_l(p)$), které se při rozptylovém experimentu projevují na fyzikálně měřitelných veličinách, tedy

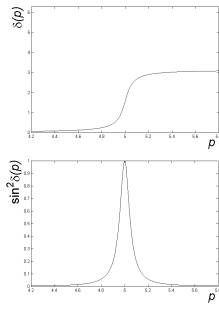
$$\text{Re } \vec{p}^2 > 0. \quad (3.6)$$

Poznamenejme ještě, že rezonance lze definovat nejen jako nuly Jostovy funkce, či póly S-matice, ale i pomocí Greenova operátoru (viz [Sim78]). Rezonanční energie jsou takové body $\vec{E} = \vec{p}^2/2m$, pro které existuje hustá podmnožina $\mathcal{D}$ v $\mathcal{H}$, že $\forall \varphi \in \mathcal{D}$ má funkce $(\varphi, \hat{G}(\vec{E}), \varphi)$ meromorfní prodloužení z horní komplexní poloroviny do spodní s póly v $\vec{E}$.

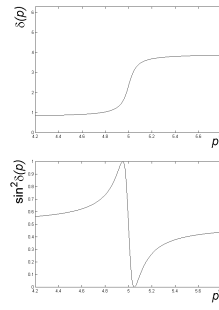
3.2 Rezonanční energie

Jostovu funkci můžeme zapisovat nejen jako funkci závislou na p , ale i na energii $E = \frac{p^2}{2m}$. Protože vztah mezi p a E není jednoznačný (jedné hodnotě E odpovídají dvě hodnoty p a $-p$), Jostova funkce v závislosti na E je funkcí na dvoulisté Riemannově ploše. První, tzv. fyzikální, list E odpovídá horní komplexní polorovině $\text{Im } p > 0$, druhý pak dolní polorovině $\text{Im } p < 0$.

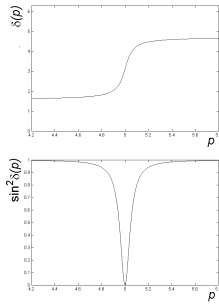
Vázané stavy, které jsou nuly Jostovy funkce na pozitivní imaginární ose p , pak leží na negativní reálné ose prvního listu E . Blíží-li se E k reálné ose zhora, pak $\sqrt{2mE} \rightarrow +p$, blíží-li se zdola, $\sqrt{2mE} \rightarrow -p$. Proto má Jostova funkce na kladné reálné poloose E řez. Nulám Jostovy funkce (rezonancím) ve spodní polorovině $\text{Im } p < 0$ odpovídají nuly ve spodní polorovině druhého listu E .



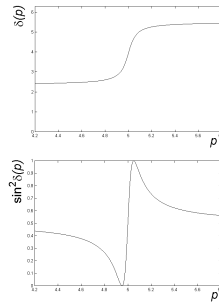
Obr. 3.2: Graf fázového posunutí $\delta(p)$ a $\sin^2 \delta(p)$ pro $\delta^{\text{bg}} = 0$.



Obr. 3.3: Graf fázového posunutí $\delta(p)$ a $\sin^2 \delta(p)$ pro $\delta^{\text{bg}} = \pi/4$.



Obr. 3.4: Graf fázového posunutí $\delta(p)$ a $\sin^2 \delta(p)$ pro $\delta^{\text{bg}} = \pi/2$.



Obr. 3.5: Graf fázového posunutí $\delta(p)$ a $\sin^2 \delta(p)$ pro $\delta^{\text{bg}} = 3\pi/4$.

Virtuálním stavům pak odpovídají nuly Jostovy funkce na kladné reálné poloose druhého Riemannova listu E .

Zapíšeme-li rezonanční energii

$$\bar{E} = \frac{\bar{p}^2}{2m} = E_R - i\frac{\Gamma}{2}, \quad E_R, \Gamma \in \mathcal{R}^+, \quad (3.7)$$

platí pro rezonanční část fázového posunu

$$\sin \delta_l^{\text{res}}(E) = \frac{\Gamma/2}{\sqrt{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}} \quad (3.8)$$

a v případě $\delta_l^{\text{bg}} = 0$ pak

$$\sigma_l(E) = \frac{2\pi(2l+1)}{m} \frac{(\Gamma/2)^2}{(E - E_R)^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (3.9)$$

což je známá Breit-Wignerova formule. Γ pak udává šířku píku v grafu $\sigma_l(E)$.

3.3 Zpoždění vlnového balíku

Mějme vlnový balík $\psi_{\text{in}}(\vec{x}, t)$ složený z vln, jejichž energie je převážně v intervalu širokém ΔE a

$$\Delta E \ll \Gamma. \quad (3.10)$$

Předpokládejme, že amplituda rozptylu $f(\vec{p}' \leftarrow \vec{p})$ je určena jediným členem v příslušném rozvoji do parciálních vln

$$f(\vec{p}' \leftarrow \vec{p}) = (2l+1)f_l(p)P_l(\hat{\vec{p}}' - \hat{\vec{p}}). \quad (3.11)$$

Potom po rozptylu interakcí ve velké vzdálenosti od počátku platí

$$\psi(\vec{x}, t) \xrightarrow{r \rightarrow +\infty} \psi_{\text{in}}(\vec{x}, t) + \psi_{\text{sc}}(\vec{x}, t), \quad (3.12)$$

kde

$$\psi_{\text{sc}}(\vec{x}, t) = \frac{f(p\hat{\vec{x}} \leftarrow \vec{p})}{r} \psi_{\text{in}}\left(\hat{\vec{p}}\left[r + \frac{d\delta_l(p)}{dp}\right], t\right). \quad (3.13)$$

Rozptýlená vlna je tedy opožděná o vzdálenost

$$\xi = \frac{d\delta_l(p)}{dp} = v_0 \frac{d\delta_l(E)}{dE} \sim \frac{v_0}{\Gamma} \quad (3.14)$$

za nerozptýlenou částí vlnového balíku (v_0 je rychlost balíku). Tomu odpovídá časové zpoždění

$$\tau = \frac{1}{v_0} \frac{d\delta_l(p)}{dp} = \frac{d\delta_l(E)}{dE} \sim \frac{1}{\Gamma}. \quad (3.15)$$

Kapitola 4

Komplexní škálování

Existuje několik metod pro počítání rezonančních energií. Jednou z nich je i metoda komplexní rotace. Její výhodou je, že stojí na rigorózním matematickém základu, její platnost pro třídu analytických potenciálů $V(z)$ byla exaktně dokázána např. v [AC71]. Při psaní této kapitoly bylo dále čerpáno z [Moi98], [Ho83] a [KKH89].

Z výsledků předchozí kapitoly plyne, že je-li $\bar{E} = \frac{\bar{p}^2}{2m} = E_R - i\frac{\Gamma}{2}$ rezonanční energie, potom se regulární řešení $\phi^{\text{res}}(r)$ rovnice (2.89) chová v nekonečnu jako $e^{i\bar{p}r}$, tedy exponenciálně diverguje. Pomocí (2.88) je pak určena vlastní funkce ψ^{res} diferenciálního operátoru (2.8), příslušející komplexnímu vlastnímu číslu $\bar{E}$. Zahrneme-li do definičního oboru diferenciálního operátoru (2.8) takovéto funkce, nebude samozřejmě samosdruženým operátorem definovaným na Hilbertově prostoru.

Definujme tzv. operátor komplexního škálování $\hat{S}$, který transformuje rezonanční funkce ψ^{res} na funkce kvadraticky integrabilní. Potom

$$(\hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1})(\hat{S}\psi^{\text{res}}) = \bar{E}(\hat{S}\psi^{\text{res}}). \quad (4.1)$$

Rezonanční energie a rezonanční vlnové funkce lze pak hledat jako komplexní vlastní čísla a kvadraticky integrabilní vlastní vektory operátoru $\hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1}$.

Příklad operátoru $\hat{S}$ je operátor komplexní rotace

$$\hat{S}(\theta) = e^{i\theta \frac{\partial}{\partial r}}, \quad \theta \in \mathcal{R}, \quad (4.2)$$

který působí následujícím způsobem:

$$\hat{S}(\theta)f(r) = f(re^{i\theta}). \quad (4.3)$$

Označme $\hat{H}_\theta$ „otočený“ hamiltonián

$$\hat{H}_\theta = \hat{S}(\theta)\hat{H}\hat{S}(\theta)^{-1} \quad (4.4)$$

a zkoumejme nyní jeho spektrum. Mějme rezonanci

$$\bar{p} = p_R - ip_I, \quad p_R, p_I \in \mathcal{R}^+ \quad (4.5)$$

$$= |\bar{p}|e^{-i\varphi}, \quad \varphi \in (0, \frac{\pi}{2}) \quad (4.6)$$

$$\bar{E} = \frac{\bar{p}^2}{2m} = E_R - i\frac{\Gamma}{2}, \quad E_R, \Gamma \in \mathcal{R}^+, \quad (4.7)$$

$$\varphi = \frac{1}{2} \arctg \left(\frac{\Gamma/2}{E_R} \right). \quad (4.8)$$

Potom

$$\phi^{\text{res}}(r \rightarrow +\infty) \sim \exp(i r |\bar{p}| e^{-i\varphi}) \quad (4.9)$$

$$\sim e^{r|\bar{p}|\sin\varphi} e^{ir|\bar{p}|\cos\varphi}. \quad (4.10)$$

Zapůsobme na ϕ^{res} operátorem $\hat{S}(\theta)$

$$\hat{S}(\theta)\phi^{\text{res}}(r \rightarrow +\infty) \sim \exp(i r |\bar{p}| e^{-i(\varphi-\theta)}) \quad (4.11)$$

$$\sim e^{r|\bar{p}|\sin(\varphi-\theta)} e^{ir|\bar{p}|\cos(\varphi-\theta)}. \quad (4.12)$$

Aby tedy byla funkce $\hat{S}(\theta)\phi^{\text{res}}$ kvadraticky integrabilní, musí být úhel θ větší, než kritická hodnota θ_c

$$\theta > \theta_c. \quad (4.13)$$

V případě rezonance je $\theta_c = \varphi$. Pro vázané stavy je hodnota kritického úhlu θ_c nulová a úhel θ musí být menší, než $\pi/2$.

V diskrétní části spektra „otočeného“ hamiltoniánu $\hat{H}_\theta$ tedy bude diskrétní spektrum původního hamiltoniánu $\hat{H}$ a navíc přibudou komplexní energie rezonancí, pro něž je splněna podmínka (4.13).

Obr. 4.1: *Spektrum komplexně škálovaného hamiltoniánu $\hat{H}_\theta$.*

Zkoumejme nyní, jak se „otočením“ hamiltoniánu $\hat{H}$ změní spojitá část spektra. Zobecněná vlastní funkce $\hat{H}$ příslušná k hodnotě $p^2/2m > 0$ ze spojitého spektra je určena radiální funkcí $\phi^{\text{scatt}}(r)$, jejíž chování je v nekonečnu určeno lineární kombinací

$$\phi^{\text{scatt}}(r) \xrightarrow{r \rightarrow +\infty} Ae^{-ipr} + Be^{ipr}. \quad (4.14)$$

Jestliže $\theta < \pi$, komplexně škálovaná funkce

$$\phi^{\text{scatt}}(re^{i\theta}) \xrightarrow{r \rightarrow +\infty} A \exp(-ipre^{i\theta}) + B \exp(ipre^{i\theta}) \quad (4.15)$$

$$\xrightarrow{r \rightarrow +\infty} Ae^{-rp \sin(\theta)} e^{irp \cos(\theta)} + Be^{rp \sin(\theta)} e^{-irp \cos(\theta)} \quad (4.16)$$

není pro $p \in \mathcal{R}$ normalizovatelná k δ funkci, takže se spojitá část spektra $\hat{H}$ komplexní rotací změní. Nedivergentní a ne kvadraticky integrabilní funkci lze dostat pouze když

$$p = |p|e^{-i\theta} \quad (4.17)$$

a tedy „otočením“ hamiltoniánu $\hat{H}$ se spojitá část spektra otočí v komplexní p -rovině o úhel θ a v komplexní E -rovině o úhel 2θ směrem dolů (viz obr. 4.1).

Dosud jsme se zabývali případem tzv. vnitřního škálování, kdy operátor $\hat{S}$ transformuje vlnovou funkci $\psi(r)$ na celé reálné ose. Uvedenou metodu lze modifikovat. Komplexní rotací je možno ovlivnit průběh vlnové funkce na celé reálné ose, až na omezenou oblast kolem počátku. Mluvíme pak o tzv. vnějším škálování (viz [Moi98] §2.1.2, §2.1.3). Metodu komplexní rotace pak je možno použít i v případě, že zkoumaný potenciál není analyticky prodloužitelný, ale je analyticky prodloužitelný všude, až na omezenou oblast, kde se komplexně neškáluje.

Kapitola 5

Dynamika časově periodických systémů a Floquetova teorie

V dalších kapitolách se budeme zabývat zkoumáním kvantových systémů, jejichž hamiltonián je periodicky závislý na čase

$$\hat{H}(t) = \hat{H}(t + T), \quad \forall t \in \mathcal{R}, \quad (5.1)$$

konkrétně se budeme zabývat případem, že hamiltonián lze zapsat jako součet časově nezávislého volného hamiltoniánu a potenciálu, který periodicky závisí na čase

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(\vec{x}, t), \quad \hat{V}(\vec{x}, t) = V(\vec{x}, t + T). \quad (5.2)$$

Označme $\mathcal{H}$ stavový prostor našeho systému. Definujme prostor

$$\mathcal{K} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{T} \quad (5.3)$$

se skalárním součinem

$$\langle\langle \Phi | \Phi' \rangle\rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \langle \Phi(t) | \Phi'(t) \rangle dt, \quad \Phi, \Phi' \in \mathcal{K}, \quad (5.4)$$

kde $\mathcal{T}$ je prostor funkcí, které jsou periodické s periodou T a kvadraticky integrabilní na intervalu $\langle 0, T \rangle$, $\langle \Phi(t) | \Phi'(t) \rangle$ je skalární součin na $\mathcal{H}$. Na prostoru $\mathcal{K}$ definujme samosdružený operátor $\hat{K}$

$$\hat{K} = \overline{\hat{H}(t) \otimes \hat{I}_{\mathcal{T}} + \hat{I}_{\mathcal{H}} \otimes \left(-i \frac{\partial}{\partial t}\right)}, \quad (5.5)$$

kde $\hat{I}_{\mathcal{T}}$, $\hat{I}_{\mathcal{H}}$ jsou operátory identity na prostorech $\mathcal{T}$, $\mathcal{H}$ a operátor $-i \frac{\partial}{\partial t}$ působí na ty funkce z $\mathcal{T}$, které jsou absolutně spojitě a jejichž první derivace je kvadraticky integrabilní na intervalu $(0, T)$.

Hledejme řešení Schrödingerovy rovnice

$$\left(\hat{H}(t) - i \frac{\partial}{\partial t} \right) |\psi(t)\rangle = 0. \quad (5.6)$$

V pracech [Yaj84], [Hän97], [BDG95]) je ukázáno, že libovolné řešení rovnice (5.6) lze zapsat jako lineární kombinaci stavů $|\Psi_\alpha(t)\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\Psi_{\alpha}(t)\rangle, \quad (5.7)$$

$$|\Psi_{\alpha}(t)\rangle = e^{-i\epsilon_{\alpha}t} |\Phi_{\alpha}(t)\rangle, \quad (5.8)$$

kde $|\Phi_{\alpha}(t)\rangle \in \mathcal{K}$ je (zobecněnou) vlastní funkcí operátoru $\hat{K}$

$$\hat{K}|\Phi_{\alpha}(t)\rangle = \epsilon_{\alpha}|\Phi_{\alpha}(t)\rangle. \quad (5.9)$$

Číslo ϵ_{α} je tzv. kvazienergie. Je-li $|\Phi_{\alpha}(t)\rangle$ řešení rovnice (5.9), potom také funkce

$$|\Phi_{\alpha'}(t)\rangle = e^{in\omega t} |\Phi_{\alpha}(t)\rangle, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (5.10)$$

kde

$$\omega = \frac{2\pi}{T}, \quad (5.11)$$

je opět řešením (5.9), nyní však s kvazienergií

$$\epsilon_{\alpha'} = \epsilon_{\alpha} + n\omega. \quad (5.12)$$

Avšak řešení Schrödingerovy rovnice (5.6)

$$|\Psi_{\alpha'}(t)\rangle = e^{-i\epsilon_{\alpha'}t} |\Phi_{\alpha'}(t)\rangle \quad (5.13)$$

je identické s řešením $|\Psi_{\alpha}(t)\rangle$. Pro stavy Φ_{α} , Φ_{β} platí podmínka ortonormality

$$\langle\langle \Phi_{\alpha} | \Phi_{\beta} \rangle\rangle = \delta_{\alpha,\beta} \quad (5.14)$$

a vytvářejí tedy ortonormální bázi Hilbertova prostoru $\mathcal{K}$. Z (5.8) je zřejmé, že unitární propagátor z času t_1 do času t_2 zobrazí stav $\Phi_{\alpha}(t_1)$ do stavu $e^{-i\epsilon_{\alpha}(t_2-t_1)}\Phi_{\alpha}(t_2)$. Unitární propagátor systému lze tedy zapsat:

$$\hat{U}(t_2, t_1) = \sum_{\alpha} e^{-i\epsilon_{\alpha}(t_2-t_1)} |\Phi_{\alpha}(t_2)\rangle \langle \Phi_{\alpha}(t_1)|, \quad (5.15)$$

kde index v sumě běží přes všechny neekvivalentní indexy α , tedy takové indexy, aby se kvazienergie nelišily pouze celočíselným násobkem ω . Příslušné kvazienergie ϵ_{α} jsou tedy z tzv. první Brillouinovy zóny $\langle 0, \omega \rangle$.

Kapitola 6

Husimiho funkce

Mějme kvantovou částici ve stavu ψ . Zajímá nás vztah, mezi klasickým a kvantovým popisem tohoto systému. Pro hybnost a polohu platí Heisenbergova relace neurčitosti

$$(\Delta \hat{P}_j)_\psi (\Delta \hat{X}_j)_\psi \geq \frac{1}{2} \hbar, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (6.1)$$

kde

$$(\Delta \hat{A})_\psi = \sqrt{\langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2} \quad (6.2)$$

je směrodatná odchylka. Poloha a hybnost částice nejsou kompatibilní pozorovatelné, neexistuje stav $\phi \in \mathcal{H}$, který by byl lokalizován v poloze i impulzu, nemá tedy smysl mluvit o hustotě pravděpodobnosti nalezení kvantové částice v bodě $[\vec{P}, \vec{Q}]$ fázového prostoru $\mathcal{P}$. Možnost srovnání mezi klasickým a kvantovým popisem poskytuje tzv. Husimiho funkce $\rho_\psi(\vec{P}, \vec{Q})$ (viz [KS96] §4.1), která v semiklasické limitě $\hbar \rightarrow 0$ již představuje hustotu pravděpodobnosti nalezení částice ve fázovém prostoru v bodě $[\vec{P}, \vec{Q}] \in \mathcal{P}$. Pravá strana (6.1) totiž vymizí a lze tedy nalézt stav, který je prakticky lokalizován v jednom bodě fázového prostoru.

Nechť $\phi_{\vec{P}, \vec{Q}}$ je takový stav, že v (6.1) nastává rovnost a navíc

$$\langle \phi_{\vec{P}, \vec{Q}} | \hat{P}_j | \phi_{\vec{P}, \vec{Q}} \rangle = 0, \quad (6.3)$$

$$\langle \phi_{\vec{P}, \vec{Q}} | \hat{X}_j | \phi_{\vec{P}, \vec{Q}} \rangle = 0. \quad (6.4)$$

Je-li částice v takovémto (tzv. koherentním) stavu $\phi_{\vec{P}, \vec{Q}}$, je neurčitost v určení její hybnosti a polohy nejmenší možná a hybnost a poloha částice je soustředěna v okolí bodu $[\vec{P}, \vec{Q}] \in \mathcal{P}$. Lze ukázat, že stav $\phi_{\vec{P}, \vec{Q}}$ má v x -reprezentaci vyjádření (viz [KS96] (4.5), [BEH93] §16.1.10)

$$\phi_{\vec{P}, \vec{Q}}(\vec{x}) = (\pi \hbar)^{-n/4} \exp \left(-\frac{i}{2\hbar} \vec{P} \vec{Q} \right) \exp \left[\frac{1}{\hbar} \left(i \vec{P} \vec{x} - \frac{(\vec{x} - \vec{Q})^2}{2} \right) \right]. \quad (6.5)$$

Pro libovolnou vlnovou funkci $\psi \in \mathcal{H}$ pak definujeme tzv. Husimiho funkci $\rho_\psi(\vec{P}, \vec{Q}) : \mathcal{P} \rightarrow \mathcal{R}$

$$\rho_\psi(\vec{P}, \vec{Q}) = (2\pi \hbar)^{-n} |\langle \phi_{\vec{P}, \vec{Q}} | \psi \rangle|^2. \quad (6.6)$$

Je zřejmé, že $\rho_\psi(\vec{P}, \vec{Q}) \geq 0$ a

$$\int_{\mathcal{P}} \rho_\psi(\vec{P}, \vec{Q}) d\vec{P} d\vec{Q} = 1. \quad (6.7)$$

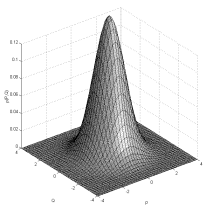
Například Husimiho funkce $\rho_m(P, Q)$ pro m -tý vlastní stav ($m \in \mathcal{N}_0$) harmonického oscilátoru, popsaného hamiltoniánem

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2, \quad (6.8)$$

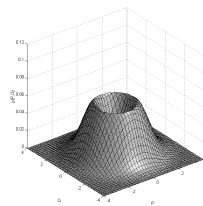
má tvar

$$\rho_m(P, Q) = \frac{1}{2\pi\hbar m!} \left[\frac{1}{2\hbar} (P^2 + Q^2) \right]^m \exp \left[-\frac{1}{2\hbar} (P^2 + Q^2) \right]. \quad (6.9)$$

Na obrázcích 6.1 a 6.2 je znázorněn průběh Husimiho funkce pro první dva stavy harmonického oscilátoru. Grafy jsou napočítány pro $\hbar = 1$. Máme-li stav oscilátoru



Obr. 6.1: Graf Husimiho funkce $\rho_0(P, Q)$ pro základní stav harmonického oscilátoru s energií $E = \frac{1}{2}$.



Obr. 6.2: Graf Husimiho funkce $\rho_1(P, Q)$ pro stav harmonického oscilátoru s energií $E = \frac{3}{2}$.

s fixní energií $E = (\frac{1}{2} + m)\hbar$, potom v limitě $\hbar \rightarrow 0$ ($m \rightarrow +\infty$) se Husimiho funkce koncentruje pouze na energetické slupce $\{[P, Q] \mid \frac{1}{2}P^2 + \frac{1}{2}Q^2 = E\} \subset \mathcal{P}$, což je v souladu s klasickým popisem harmonického oscilátoru.

Kapitola 7

Numerické výsledky

V této kapitole jsou uvedeny výsledky pro konkrétní jednodimenzionální systémy. Veškeré výpočty byly uvažovány v jednotkách $\hbar = 1$, $m = 1$.

Numerické výpočty byly prováděny na počítači s procesorem Intel Pentium 133MHz s pamětí 48MB. Byl používán numerický software Matlab 5.2. U některých výsledků je pro zajímavost uveden čas potřebný k výpočtu.

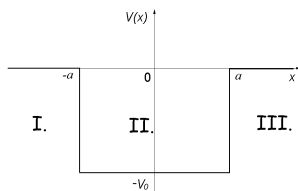
7.1 Statická pravoúhlá potenciálová jáma

V této kapitole se budeme zabývat jednodimenzionální pravoúhlou potenciálovou jámou. Zkoumaný systém je tedy popsán hamiltoniánem

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{V}(x), \quad (7.1)$$

kde

$$\hat{V}(x) = \begin{cases} 0, & x \notin \langle -a, a \rangle \\ -V_0, & x \in \langle -a, a \rangle. \end{cases} \quad (7.2)$$



Obr. 7.1: *Pravoúhlá potenciálová jáma.*

Hledejme nyní stavy $|E, l; +\rangle$ (viz kapitola 2.2.11). Budeme tedy počítat vlastní stavy $\phi_{l,p}$ hamiltoniánu (7.1), které vyhovují podmínkám (2.119), (2.120). Na oblastech I., II., III. (viz obr. 7.1) lze $\phi_{l,p}$ zapsat:

$$\phi_{0,p}^{\text{I.}}(x) = A_0^{\text{I.}} e^{-ipx} + B_0^{\text{I.}} e^{ipx}, \quad (7.3)$$

$$\phi_{0,p}^{\text{II.}}(x) = \cos kx, \quad (7.4)$$

$$\phi_{0,p}^{\text{III.}}(x) = A_0^{\text{III.}} e^{-ikx} + B_0^{\text{III.}} e^{ikx}, \quad (7.5)$$

$$\phi_{1,p}^{\text{I.}}(x) = A_1^{\text{I.}} e^{-ipx} + B_1^{\text{I.}} e^{ipx}, \quad (7.6)$$

$$\phi_{1,p}^{\text{II.}}(x) = \sin kx, \quad (7.7)$$

$$\phi_{1,p}^{\text{III.}}(x) = A_1^{\text{III.}} e^{-ikx} + B_1^{\text{III.}} e^{ikx}, \quad (7.8)$$

kde

$$k^2 = p^2 + 2V_0. \quad (7.9)$$

Z podmínky spojitosti funkce $\phi_{l,p}(x)$, resp. její první derivace dostaneme vyjádření koeficientů $A_l^{\text{I.}}$ až $B_l^{\text{III.}}$ a z (2.121) tedy i tvar Jostovy funkce $\mathbf{f}_l(p)$. Celkem tedy platí:

$$\phi_{0,p}^{\text{I.}}(x) = \frac{i}{2} [\mathbf{f}_0(p) e^{-ipx} - \mathbf{f}_0^*(p) e^{ipx}], \quad (7.10)$$

$$\phi_{0,p}^{\text{II.}}(x) = \cos kx, \quad (7.11)$$

$$\phi_{0,p}^{\text{III.}}(x) = \frac{i}{2} [\mathbf{f}_0^*(p) e^{-ipx} - \mathbf{f}_0(p) e^{ipx}], \quad (7.12)$$

$$\phi_{1,p}^{\text{I.}}(x) = \frac{i}{2} [\mathbf{f}_1(p) e^{-ipx} - \mathbf{f}_1^*(p) e^{ipx}], \quad (7.13)$$

$$\phi_{1,p}^{\text{II.}}(x) = \sin kx, \quad (7.14)$$

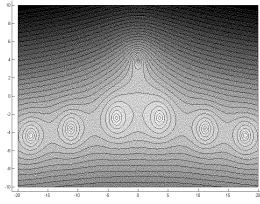
$$\phi_{1,p}^{\text{III.}}(x) = -\frac{i}{2} [\mathbf{f}_1^*(p) e^{-ipx} - \mathbf{f}_1(p) e^{ipx}], \quad (7.15)$$

kde

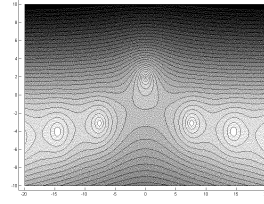
$$\mathbf{f}_0(p) = -e^{ipa} \left(i \cos ka + \frac{k}{p} \sin ka \right), \quad (7.16)$$

$$\mathbf{f}_1(p) = e^{ipa} \left(-i \sin ka + \frac{k}{p} \cos ka \right). \quad (7.17)$$

Zabývejme se nyní analytickými vlastnostmi Jostovy funkce. Na obrázku 7.2 a 7.3 jsou grafy Jostovy funkce $\mathbf{f}_0(p)$ a $\mathbf{f}_1(p)$ v komplexní rovině. Výpočty byly provedeny pro potenciálovou jámu hlubokou $V_0 = 10$ a širokou $a = 1/2$. Z grafů je zřejmé, že Jostova funkce má nuly na kladné imaginární poloose, ty odpovídají vázaným stavům, a v dolní komplexní polorovině – rezonance.



Obr. 7.2: *Graf Jostovy funkce $f_1(p)$ v komplexní rovině.*



Obr. 7.3: *Graf Jostovy funkce $f_1(p)$ v komplexní rovině.*

Energie vázaných stavů a rezonancí lze zjistit také jako póly S-matice

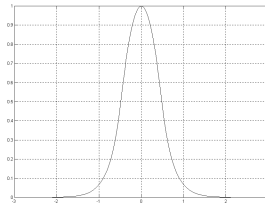
$$s_l(p) = e^{i2\delta_l(p)}, \quad (7.18)$$

kde $\delta_l(p)$ je fázové posunutí (viz [For83] (3.248))

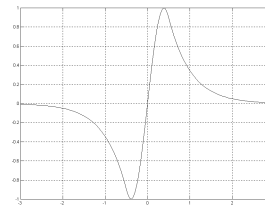
$$\operatorname{tg} \delta_0 = \frac{k \operatorname{tg} ka - p \operatorname{tg} pa}{p + k \operatorname{tg} ka \operatorname{tg} pa}, \quad (7.19)$$

$$\operatorname{tg} \delta_1 = \frac{p \operatorname{tg} ka - k \operatorname{tg} pa}{k + p \operatorname{tg} ka \operatorname{tg} pa}. \quad (7.20)$$

Na obrázku 7.4 a 7.5 je graf vlnové funkce jediného sudého a lichého vázaného stavu s energií -7.705 a -1.8629 . Na obrázku 7.6, 7.7, 7.8, je graf reálné, imaginární části a čtverce absolutní hodnoty vlnové funkce $\phi(x)$ (7.10)–(7.12) sudého rezonančního stavu s energií $3.604 - 8.6634i$. Z grafů je zřejmé, že na rozdíl od vázaného stavu již nyní vlnová funkce není kvadraticky integrabilní, dokonce není ani normalizovatelná k δ -funkci. Na obrázcích 7.9, 7.10 a 7.11 jsou pak grafy příslušné Husimiho funkce.



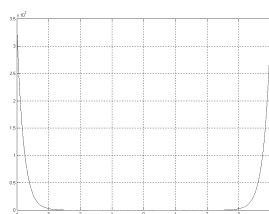
Obr. 7.4: *Graf vlnové funkce sudého vázaného stavu.*



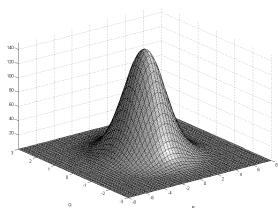
Obr. 7.5: *Graf vlnové funkce lichého vázaného stavu.*

Obr. 7.6: *Graf reálné části vlnové funkce rezonančního stavu.*

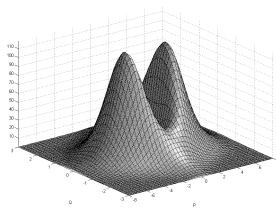
Obr. 7.7: *Graf imaginární části vlnové funkce rezonančního stavu.*



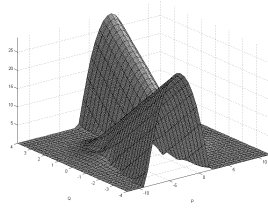
Obr. 7.8: *Graf kvadrátu absolutní hodnoty vlnové funkce rezonančního stavu.*



Obr. 7.9: *Graf Husimiho funkce sudého vázaného stavu.*



Obr. 7.10: *Graf Husimiho funkce lichého vázaného stavu.*



Obr. 7.11: *Graf Husimiho funkce rezonančního stavu.*

7.2 Výpočet rezonancí rozvojem řešení do ortonormální báze

7.2.1 Operátor $-i\frac{d}{dt} + V_1 \cos \omega t$

Zabývejme se nejprve numerickým řešením rovnice

$$\hat{T}\varphi(t) = \lambda\varphi(t), \quad \lambda \in \mathcal{C}, \quad (7.21)$$

kde

$$\hat{T} = -i\frac{d}{dt} + V_1 \cos \omega t, \quad V_1 \in \mathcal{R} \quad (7.22)$$

je diferenciální operátor definovaný na prostoru $\mathcal{T}$ kvadraticky integrabilních funkcí na intervalu $\langle 0, T \rangle$, které vyhovují periodické okrajové podmínce

$$\varphi(0) = \varphi(T) \quad (7.23)$$

a

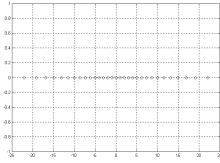
$$\omega = \frac{2\pi}{T}. \quad (7.24)$$

Libovolnou funkci z $\mathcal{T}$ lze zapsat jako lineární kombinaci funkcí $\phi_p(t)$

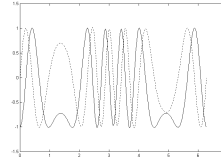
$$\phi_p(t) = \frac{1}{\sqrt{T}} e^{ip\omega t}, \quad p \in \mathcal{Z}. \quad (7.25)$$

Množina funkcí $\phi_p(t)$ je ortonormální

$$\int_0^T \phi_{p_1}^*(t) \phi_{p_2}(t) dt = \delta_{p_1, p_2}. \quad (7.26)$$



Obr. 7.12: Vlastní čísla operátoru $-i\frac{d}{dt} + 10 \cos t$ spočtená rozvojem řešení do báze $\phi_p(t)$ ($p = -15, \dots, 15$).



Obr. 7.13: Reálná (plná křivka) a imaginární část (tečkovaná křivka) vlastní funkce operátoru $-i\frac{d}{dt} + 10 \cos t$ spočtená rozvojem řešení do báze $\phi_p(t)$ ($p = -15, \dots, 15$, $\lambda = 2.004$).

Zapišeme-li funkci $\varphi \in \mathcal{T}$ jako lineární kombinaci funkcí $\phi_p(t)$

$$\varphi(t) = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} a_p \phi_p(t), \quad a_p \in \mathcal{C}, \quad (7.27)$$

platí

$$\hat{T}\varphi(x) = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} a_p (\omega p + V_1 \cos \omega t) \phi_p(t) \quad (7.28)$$

$$= \sum_{p=-\infty}^{+\infty} a_p \left(\omega p \phi_p(t) + \frac{V_1}{2} [\phi_{p+1}(t) + \phi_{p-1}(t)] \right) \quad (7.29)$$

a tedy vlastní čísla λ operátoru $\hat{T}$ jsou taková čísla, že soustava rovnic

$$0 = \langle \phi_{p_1} | (\hat{T} - \lambda) \varphi \rangle = \sum_{p_2=-\infty}^{+\infty} a_{p_2} \left[\omega p_2 \delta_{p_1, p_2} + \frac{V_1}{2} (\delta_{p_1, p_2+1} + \delta_{p_1, p_2-1}) - \lambda \delta_{p_1, p_2} \right] \quad (7.30)$$

má řešení. Řešíme-li tedy rovnici (7.21), stačí nalézt vlastní čísla a vektory matice $\mathbf{\Lambda}$ se složkami

$$\mathbf{\Lambda}_{p_1, p_2} = \langle \phi_{p_1} | \hat{T} \phi_{p_2} \rangle = \omega p_2 \delta_{p_1, p_2} + \frac{V_1}{2} [\delta_{p_1, p_2+1} + \delta_{p_1, p_2-1}]. \quad (7.31)$$

Na obr. 7.12 jsou znázorněna vlastní čísla operátoru $-i\frac{d}{dt} + 10 \cos t$ spočtená rozvojem řešení do báze $\phi_p(t)$, $p = -15, \dots, 15$. Na obr. 7.13 je pak graf reálné a

imaginární části vlastní funkce, která přísluší spočtenému vlastnímu číslu $\lambda = 2.004$. Je vidět, že výsledky jsou ve shodě s přesným analytickým řešením

$$\lambda = k\omega, \quad k \in \mathcal{Z}, \quad (7.32)$$

$$\varphi(t) = c \exp\left(i\lambda t - i\frac{V_1}{\omega} \sin \omega t\right), \quad c \in \mathcal{C}. \quad (7.33)$$

7.2.2 Operátor $K \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

Zabývejme se nyní ulohou nalézt vlastní čísla E a vlastní funkce $\Psi(x)$ operátoru

$$\hat{H} = K \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad K \in \mathcal{C}, \quad (7.34)$$

definovaného na prostoru $L^2(\mathcal{R})$.

Libovolnou funkci $\Psi(x) \in L^2(\mathcal{R})$ lze zapsat jako lineární kombinaci funkcí $\psi_q(x)$

$$\psi_q(x) = (q! 2^q)^{-1/2} \pi^{-1/4} e^{-\frac{x^2}{2}} H_q(x), \quad q \in \mathcal{N}_0, \quad (7.35)$$

kde $H_q(x)$ je Hermiteův polynom. Množina funkcí $\psi_q(x)$ je ortonormální (viz [For83] (H.21))

$$\langle \psi_{q_1} | \psi_{q_2} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{q_1}^*(x) \psi_{q_2}(x) dx = \delta_{q_1, q_2}. \quad (7.36)$$

Zapišeme-li $\Psi(x) \in L^2(\mathcal{R})$ jako lineární kombinaci funkcí $\psi_q(x)$

$$\Psi(x) = \sum_{q=0}^{+\infty} a_q \psi_q(x), \quad a_q \in \mathcal{C}, \quad (7.37)$$

dostaneme

$$\hat{H}\Psi(x) = \sum_{q=0}^{+\infty} a_q [K(-(2q+1) + x^2) + V(x)] \psi_q(x), \quad (7.38)$$

kde jsme použili vztah

$$\frac{d^2 H_q(x)}{dx^2} = -2q H_q(x) + 2x \frac{dH_q(x)}{dx} \quad (7.39)$$

(viz [For83] (H.19), [AS64] (22.6.19)).

V dalším budeme potřebovat spočítat integrál

$$I_{q_1, q_2} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^2 H_{q_1}(x) H_{q_2}(x) dx. \quad (7.40)$$

Využije se toho, že

$$H_q(x) = \left. \frac{\partial^q S(x, \xi)}{\partial \xi^q} \right|_{\xi=0}, \quad (7.41)$$

kde $S(x, \xi)$ je tzv. vytvořující funkce

$$S(x, \xi) = e^{x^2 - (\xi - x)^2} \quad (7.42)$$

(viz [For83] (H24), (H26)). Snadno se spočte integrál

$$I(\xi, \eta) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} x^2 S(x, \xi) S(x, \eta) dx \quad (7.43)$$

$$= \sqrt{\pi} e^{2\xi\eta} \left(\frac{1}{2} + (\xi + \eta)^2 \right). \quad (7.44)$$

Integrál I_{q_1, q_2} je pak možno zapsat:

$$I_{q_1, q_2} = \frac{\partial^{q_1+q_2}}{\partial \xi^{q_1} \partial \eta^{q_2}} I(\xi, \eta) \Big|_{\xi=0, \eta=0}. \quad (7.45)$$

Platí

$$\frac{\partial^{q_1+q_2}}{\partial \xi^{q_1} \partial \eta^{q_2}} e^{2\xi\eta} \Big|_{\xi=0, \eta=0} = 2^{q_1} q_1! \delta_{q_1, q_2} \quad (7.46)$$

(viz [For83] (H.29)), zbývá tedy dopočítat

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{q_1+q_2}}{\partial \xi^{q_1} \partial \eta^{q_2}} (\xi + \eta)^2 e^{2\xi\eta} \Big|_{\xi=\eta=0} &= \frac{\partial^{q_1}}{\partial \xi^{q_1}} \left[\sum_{n=0}^{q_2} \binom{q_2}{n} \frac{\partial^{q_2-n} (\xi + \eta)^2}{\partial \eta^{q_2-n}} \Big|_0 \frac{\partial^n e^{2\xi\eta}}{\partial \eta^n} \Big|_0 \right] \Big|_{\xi=0} = \\ &= (2 + q_1)! 2^{q_1} \delta_{q_2, 2+q_1} + q_1 q_1! 2^{q_1} \delta_{q_1, q_2} + q_1! 2^{q_1-2} \delta_{q_2, q_1-2}. \end{aligned} \quad (7.47)$$

Celkem nám tedy vyjde pro integrál (7.40) vztah

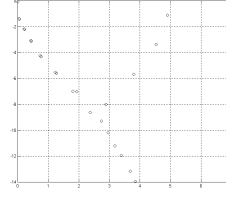
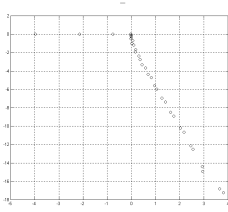
$$I_{q_1, q_2} = 2^{q_1} q_1! \sqrt{\pi} \left[\left(\frac{1}{2} + q_1 \right) \delta_{q_1, q_2} + \frac{1}{4} \delta_{q_1 - q_2, 2} + (q_1 + 1)(q_1 + 2) \delta_{q_2 - q_1, 2} \right]. \quad (7.48)$$

Vynásobíme-li skalárně rovnici (7.38) zleva funkcí ψ_{q_1} a využijeme-li vztahu (7.48), zjistíme, že problém nalezení vlastních čísel a vektorů operátoru $\hat{H}$ vede na problém vlastních čísel a vektorů matice $\mathbf{\Lambda}$ se složkami

$$\begin{aligned} \mathbf{\Lambda}_{q_1, q_2} &= \langle \psi_{q_1} | \hat{H} \psi_{q_2} \rangle = \\ &= -K(2q_1 + 1) \delta_{q_1, q_2} + \\ &+ K \left\{ \sqrt{\frac{2^{q_1} q_1!}{2^{q_2} q_2!}} \left[\left(\frac{1}{2} + q_1 \right) \delta_{q_1, q_2} + \frac{1}{4} \delta_{q_1 - q_2, 2} + (q_1 + 1)(q_1 + 2) \delta_{q_2 - q_1, 2} \right] \right\} + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{q_1! q_2! 2^{q_1+q_2} \pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x) e^{-x^2} H_{q_1}(x) H_{q_2}(x) dx. \end{aligned} \quad (7.49)$$

Poznamenejme ještě, že s využitím

$$H_q(-x) = (-1)^q H_q(x) \quad (7.50)$$



Obr. 7.14: Vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$ „otočeného“ o $0.85\frac{\pi}{4}$.

Obr. 7.15: Vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$ „otočeného“ o $0.85\frac{\pi}{4}$.

(viz [For83] H.20) lze pro sudé funkce $V(x)$ integrál v předchozí rovnici přepsat:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} V(x) e^{-x^2} H_{q_1}(x) H_{q_2}(x) dx = [1 + (-1)^{q_1+q_2}] \int_0^{+\infty} V(x) e^{-x^2} H_{q_1}(x) H_{q_2}(x) dx. \quad (7.51)$$

Na obrázku 7.14 jsou znázorněna vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$ „otočeného“ o $0.85\frac{\pi}{4}$. Byla tedy provedena transformace $x \rightarrow x \exp(i\theta)$ a vyšetřován operátor

$$\hat{H}_\theta = -\frac{\exp(-2i\theta)}{2} \frac{d^2}{dx^2} - 5 \exp\left[-\frac{1}{2} \left(e^{i\theta} x\right)^2\right]. \quad (7.52)$$

Byly použity prvky ortonormální báze s indexy $q = 0, 1, \dots, 40$ a integrál v (7.49) byl počítán analyticky s využitím vztahů

$$\int_0^{+\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1} a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \operatorname{Re} a > 0, \quad n \in \mathcal{N}_0, \quad (7.53)$$

$$\int_0^{+\infty} x^{2n+1} e^{-ax^2} dx = \frac{n!}{2a^{n+1}}, \quad \operatorname{Re} a > 0, \quad n \in \mathcal{N}_0 \quad (7.54)$$

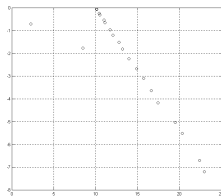
(viz [AS64] (7.4.4), (7.4.5)). Výpočet trval 60 sekund. V grafu je vidět, že vázané stavy operátoru $\hat{H}$ se otočením nezmění a kontinuum po otočení svírá s reálnou osou úhel 2θ .

Na obrázku 7.15 jsou znázorněna vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$ „otočeného“ o $0.85\frac{\pi}{4}$. Byla tedy provedena transformace $x \rightarrow x \exp(i\theta)$ a vyšetřován

operátor

$$\hat{H}_\theta = -\frac{\exp(-2i\theta)}{2} \frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp \left[-\frac{1}{2} (e^{i\theta} x)^2 \right]. \quad (7.55)$$

Byly použity prvky ortonormální báze s indexy $q = 0, 1, \dots, 40$. V grafu jsou patrné čtyři rezonance. Výpočet trval opět 60 sekund.



Obr. 7.16: Vlastní čísla komplexně „otočeného“ hamiltoniánu popisujícího pravoúhlou potenciálovou jámu.

Jak už bylo řečeno, metoda komplexního škálování není použitelná pro potenciály, které nejsou spojité. To je ukázáno na obr. 7.16, kde je metodou rozvoje řešení do báze počítáno spektrum komplexně otočeného hamiltoniánu, který popisuje pravoúhlou potenciálovou jámu širokou 1 a hlubokou 10. Byly použity prvky ortonormální báze s indexy $q = 0, 1, \dots, 20$. Vázané stavy při „otočení“ nezůstanou nezměněné, ale jsou umístěné mimo reálnou osu.

7.2.3 Operátor $K \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{d}{dt} + V(x) + V_1 \cos \omega t$

Nyní se budeme zabývat nejjednodušším případem, kdy operátor $\hat{K}(t)$ definovaný na $L^2(\mathcal{R}) \otimes \mathcal{T}$ závisí periodicky na čase:

$$\hat{K}(t) = K \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{d}{dt} + V(x) + V_1 \cos \omega t. \quad (7.56)$$

Využijeme výsledky předchozích kapitol. Vlastní funkce $\Psi(x, t)$ operátoru $\hat{K}(t)$ lze zapsat jako lineární kombinaci funkcí $\psi_{p,q}(x, t)$

$$\psi_{p,q}(x, t) = T^{-1/2} (q! 2^q)^{-1/2} \pi^{-1/4} e^{ip\omega t} e^{-\frac{x^2}{2}} H_q(x), \quad p \in \mathcal{Z}, \quad q \in \mathcal{N}_0, \quad (7.57)$$

kteřé jsou ortogonální:

$$\langle\langle\psi_{p_1,q_1}|\psi_{p_2,q_2}\rangle\rangle \equiv \int_0^T dt \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{p_1,q_1}^*(x,t) \psi_{p_2,q_2}(x,t) = \delta_{p_1,p_2} \delta_{q_1,q_2}. \quad (7.58)$$

Funkci opět rozvineme do řady

$$\Psi(x,t) = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} \sum_{q=0}^{+\infty} a_{p,q} \psi_{p,q}(x,t), \quad a_{p,q} \in \mathcal{C}, \quad (7.59)$$

a postupem obdobným jako v předchozích kapitolách dospějeme k problému vlastních čísel a vektorů „matice“ $\tilde{\Lambda}$ se složkami:

$$\begin{aligned} \tilde{\Lambda}_{p_1,q_1;p_2,q_2} &= \langle\langle\psi_{p_1,q_1}|\hat{K}\psi_{p_2,q_2}\rangle\rangle \\ &= -K(2q_1+1)\delta_{p_1,p_2}\delta_{q_1,q_2} + \\ &\quad + K\delta_{p_1,p_2}\sqrt{\frac{2^{q_1}q_1!}{2^{q_2}q_2!}} \left[\left(\frac{1}{2}+q_1\right)\delta_{q_1,q_2} + \frac{1}{4}\delta_{q_1-q_2,2} + (q_1+1)(q_1+2)\delta_{q_2-q_1,2} \right] + \\ &\quad + \delta_{p_1,p_2} \frac{1}{\sqrt{q_1!q_2!2^{q_1+q_2}\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} V(x)e^{-x^2}H_{q_1}(x)H_{q_2}(x)dx + \\ &\quad + \delta_{q_1,q_2} \left[\omega p_2 \delta_{p_1,p_2} + \frac{V_1}{2}(\delta_{p_1,p_2+1} + \delta_{p_1,p_2-1}) \right]. \end{aligned} \quad (7.60)$$

Pro praktické počítání lze matici $\tilde{\Lambda}$ přeindexovat například následujícím způsobem

$$\Lambda_{q_1(2P+1)+p_1+P+1, q_2(2P+1)+p_2+P+1} = \tilde{\Lambda}_{p_1,q_1;p_2,q_2}, \quad (7.61)$$

$$p_1 = -P, -P+1, \dots, P-1, P \quad (7.62)$$

$$q_1 = 0, 1, 2, \dots, Q-1, Q \quad (7.63)$$

$$p_2 = -P, -P+1, \dots, P-1, P \quad (7.64)$$

$$q_2 = 0, 1, 2, \dots, Q-1, Q \quad (7.65)$$

a uvažovat pouze konečný počet řádků a sloupců. Hledáme pak tedy vlastní čísla a vektory čtvercové matice Λ , která má $(2P+1)(Q+1)$ řádků a sloupců.

Snadno lze nalézt analytické řešení problému vlastních čísel E a funkcí $\Psi(x,t)$ operátoru $\hat{K}(t)$:

$$E = \lambda + k\omega, \quad k \in \mathcal{Z}, \quad (7.66)$$

$$\Psi(x,t) = c \psi(x) \exp\left(i\lambda t - i\frac{V_1}{\omega} \sin \omega t\right) \quad c \in \mathcal{C}, \quad (7.67)$$

kde $\psi(x)$ je vlastní funkce operátoru $K\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ příslušná k vlastnímu číslu λ .

Na obr. 7.17 jsou znázorněna vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt}$, který je komplexně otočen o $\theta = 0.9\frac{\pi}{4}$. Byla tedy provedena transformace $x \rightarrow x \exp(i\theta)$ a vyšetřován operátor

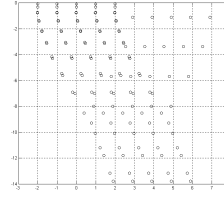
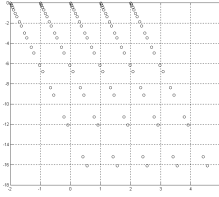
$$\hat{K}_\theta = -\frac{\exp(-2i\theta)}{2} \frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt}. \quad (7.68)$$

Na obr. 7.19-7.21 jsou pak grafy reálné, imaginární části a kvadrátu absolutní hodnoty vlastní vlnové funkce $\Psi(x, t)$, která přísluší vlastnímu číslu $E = -1.9613 - 0.2445i$ i operátoru $\hat{K}_\theta$. Na obr. 7.22 je graf kvadrátu absolutní hodnoty vlastní vlnové funkce po provedení inverzní transformace $x \rightarrow x \exp(-i\theta)$ ($\Psi(x, t) \rightarrow \Psi(x e^{i\theta})$). Byly použity prvky ortonormální báze s indexy $p = -2, \dots, 2$, $q = 0, \dots, 20$ (tedy $P = 2$, $Q = 20$).

Na obr. 7.18 jsou znázorněna vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$, který je komplexně otočen o $\theta = 0.9\frac{\pi}{4}$. Byla tedy provedena transformace $x \rightarrow x \exp(i\theta)$ a vyšetřován operátor

$$\hat{K}_\theta = -\frac{\exp(-2i\theta)}{2} \frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt} + 5 \exp\left[-\frac{1}{2}(e^{i\theta}x)^2\right]. \quad (7.69)$$

Byly použity prvky ortonormální báze s indexy $p = -2, \dots, 2$, $q = 0, \dots, 20$ (tedy $P = 2$, $Q = 20$) a potřebné integrály byly počítány numericky na intervalu $(0, 10)$. Výpočet trval 281 sekund.



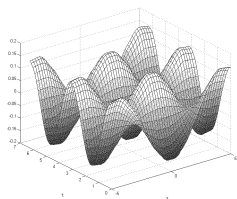
Obr. 7.17: Vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt}$ otočeného o $0.9\frac{\pi}{4}$ ($P = 2$, $Q = 20$).

Obr. 7.18: Vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$ otočeného o $0.85\frac{\pi}{4}$ ($P = 2$, $Q = 20$).

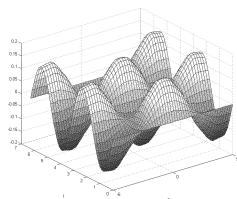
7.2.4 Operátor $K\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt} + V(x)(1 + V_1 \cos \omega t)$

Nakonec hledíme vlastní čísla a funkce operátoru

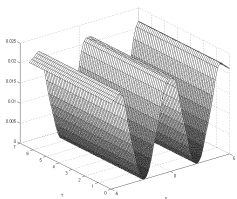
$$\hat{K}(t) = K\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt} + V(x)(1 + V_1 \cos \omega t) \quad (7.70)$$



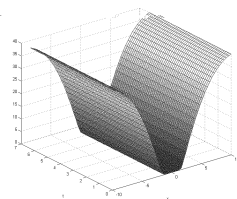
Obr. 7.19: *Graf reálné části vlastní funkce pro $E = -1.9613 - 0.2445i$.*



Obr. 7.20: *Graf imaginární části vlastní funkce pro $E = -1.9613 - 0.2445i$.*



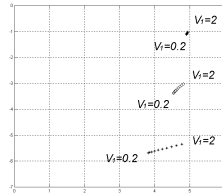
Obr. 7.21: *Kvadrát absolutní hodnoty vlastní funkce pro $E = -1.9613 - 0.2445i$.*



Obr. 7.22: *Kvadrát absolutní hodnoty vlastní funkce pro $E = -1.9613 - 0.2445i$ po "odškálování".*

definovaného na $L^2(\mathcal{R}) \otimes \mathcal{T}$. Postupem obdobným jako v předchozích kapitolách dospějeme k problému vlastních čísel a vektorů matice $\tilde{\Lambda}$ se složkami:

$$\begin{aligned}
\tilde{\Lambda}_{p_1, q_1; p_2, q_2} &= \langle \langle \psi_{p_1, q_1} | \hat{K} \psi_{p_2, q_2} \rangle \rangle \\
&= -K(2q_1 + 1)\delta_{p_1, p_2}\delta_{q_1, q_2} + \\
&+ K\delta_{p_1, p_2}\sqrt{\frac{2^{q_1} q_1!}{2^{q_2} q_2!}} \left[\left(\frac{1}{2} + q_1 \right) \delta_{q_1, q_2} + \frac{1}{4}\delta_{q_1 - q_2, 2} + (q_1 + 1)(q_1 + 2)\delta_{q_2 - q_1, 2} \right] + \\
&+ \omega p_2 \delta_{p_1, p_2}\delta_{q_1, q_2} + \\
&+ \frac{1}{\sqrt{q_1! q_2! 2^{q_1 + q_2} \pi}} \left[\delta_{p_1, p_2} + \frac{V_1}{2}(\delta_{p_1, p_2 + 1} + \delta_{p_1, p_2 - 1}) \right] \int_{-\infty}^{+\infty} V(x) e^{-x^2} H_{q_1}(x) H_{q_2}(x) dx.
\end{aligned} \tag{7.71}$$



Obr. 7.23: *Závislost tří vybraných rezonancí operátoru $-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right) (1 + V_1 \cos 6t)$ na parametru V_1 ($\theta = 0.85\frac{\pi}{4}$, $P = 10$, $Q = 30$).*

Pro praktické počítání lze, stejně jako v předchozí kapitole, matici $\tilde{\Lambda}$ přeindexovat například následujícím způsobem

$$\Lambda_{q_1(2P+1)+p_1+P+1, q_2(2P+1)+p_2+P+1} = \tilde{\Lambda}_{p_1, q_1; p_2, q_2}, \tag{7.72}$$

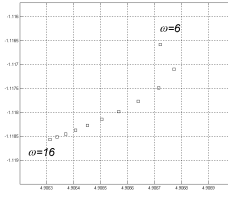
$$p_1 = -P, -P+1, \dots, P-1, P \tag{7.73}$$

$$q_1 = 0, 1, 2, \dots, Q-1, Q \tag{7.74}$$

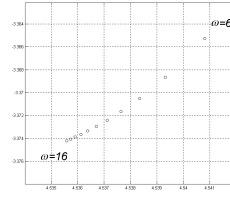
$$p_2 = -P, -P+1, \dots, P-1, P \tag{7.75}$$

$$q_2 = 0, 1, 2, \dots, Q-1, Q \tag{7.76}$$

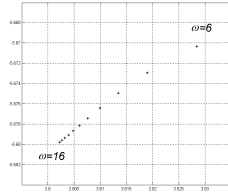
a uvažovat pouze konečný počet řádků a sloupců. Hledáme pak tedy vlastní čísla a vektory čtvercové matice Λ , která má $(2P+1)(Q+1)$ řádků a sloupců.



Obr. 7.24: Závislost vybrané rezonance operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)(1 + 0.3 \cos \omega t)$ na parametru ω ($\theta = 0.85\frac{\pi}{4}, P = 10, Q = 20$).



Obr. 7.25: Závislost vybrané rezonance operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)(1 + 0.3 \cos \omega t)$ na parametru ω ($\theta = 0.85\frac{\pi}{4}, P = 10, Q = 20$).



Obr. 7.26: Závislost vybrané rezonance operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)(1 + 0.3 \cos \omega t)$ na parametru ω ($\theta = 0.85\frac{\pi}{4}, P = 10, Q = 20$).

Graf 7.23 znázorňuje závislost polohy tří vybraných rezonancí operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)(1+V_1 \cos 6t)$ na velikosti parametru V_1 ($V_1 = 0.2, 0.4, \dots, 2$). Operátor byl „otočen“ o $0.85\frac{\pi}{4}$ a $P = 10$, $Q = 30$. Výpočet trval 6 hodin.

Grafy 7.24–7.24 znázorňují závislost polohy tří vybraných rezonancí operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)(1+0.3 \cos \omega t)$ na velikosti parametru ω ($\omega = 6, 7, \dots, 16$). Operátor byl „otočen“ o $0.85\frac{\pi}{4}$ a $P = 10$, $Q = 20$. Výpočet trval 160 minut.

7.3 Výpočet rezonancí metodou konečných diferencí

7.3.1 Operátor $-i\frac{d}{dt}$

Zabývejme se numerickým řešením rovnice

$$\hat{T}\varphi(t) = \lambda\varphi(t), \quad \lambda \in \mathcal{C}, \quad (7.77)$$

kde

$$\hat{T} = -i\frac{d}{dt} \quad (7.78)$$

je diferenciální operátor definovaný na prostoru $\mathcal{T}$ kvadraticky integrabilních funkcí na intervalu $\langle 0, T \rangle$, které vyhovují periodické okrajové podmínce

$$\varphi(0) = \varphi(T). \quad (7.79)$$

Rozdělme interval $\langle 0, T \rangle$ na $N+1$ bodů a to tak, že bod č. $n = 1, 2, \dots, N, N+1$ bude v bodě $t = (n-1)h$, kde

$$h = \frac{T}{N}. \quad (7.80)$$

Pro derivaci funkce $\varphi(t)$ platí

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = \frac{\varphi(t+h) - \varphi(t)}{h} + O(h) \quad (7.81)$$

(viz [Vit87] (5.7)), kde symbol $O(h^p)$ znamená, že chybu lze odhadnout výrazem Mh^p , kde M je vhodná konstanta. Nyní v jednotlivých bodech dělení intervalu aproximujme derivaci v (7.77) a aplikujme okrajovou podmínku (7.79). Dostaneme tak systém N lineárních rovnic pro neznámé funkční hodnoty funkce $\varphi((n-1)h) \equiv \varphi_n$

$$\varphi_{n+1} - \varphi_n = \tilde{\lambda}\varphi_n, \quad n = 1, 2, \dots, N-1 \quad (7.82)$$

$$\varphi_1 - \varphi_N = \tilde{\lambda}\varphi_N, \quad (7.83)$$

kde

$$\tilde{\lambda} = ih\lambda. \quad (7.84)$$

Úlohu nalezení vlastních čísel a vektorů operátoru $\hat{T}$ jsme tak převedli na úlohu vlastních čísel a vektorů matice

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.85)$$

Zabývejme se dále otázkou konvergence uvedené metody. Snadno se ověří, že platí

$$\det(\mathbf{\Lambda} - \tilde{\lambda}\mathbf{I}) = \begin{vmatrix} \Delta & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \Delta & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \Delta & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & \Delta \end{vmatrix} = \Delta^N - (-1)^N, \quad N \geq 2, \quad (7.86)$$

kde

$$\Delta = -1 - \tilde{\lambda}. \quad (7.87)$$

Položíme-li determinant (7.86) roven nule

$$\Delta^N = (-1)^N \iff (1 + \tilde{\lambda})^N = 1 \quad (7.88)$$

$$\iff \left(1 + \frac{iT\lambda}{N}\right)^N = 1, \quad (7.89)$$

zjistíme, že při použití metody konečných diferencí při dělení intervalu na $N + 1$ bodů spočteme vlastní čísla

$$\tilde{\lambda} = \exp\left(ik\frac{2\pi}{N}\right) - 1, \quad k = 0, 1, \dots, N-1, \quad (7.90)$$

$$\lambda = N\frac{i}{T} \left[1 - \exp\left(ik\frac{2\pi}{N}\right)\right], \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (7.91)$$

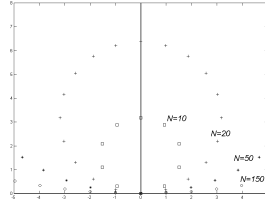
V komplexní rovině tedy budou nalezené hodnoty umístěné po obvodu kružnice (viz obr. 7.27). Provedeme-li v rovnici (7.89) limitní přechod $N \rightarrow +\infty$, obdržíme podmínku

$$e^{iT\lambda} = 1, \quad (7.92)$$

a tedy

$$\lambda = k\frac{2\pi}{T}, \quad k \in \mathcal{Z}, \quad (7.93)$$

což je v souladu s analytickým řešením rovnice (7.77). Snadno se lze přesvědčit, že



Obr. 7.27: Vlastní čísla nalezená metodou konečných diferencí pro $T = 2\pi$ a $N = 10, 20, 50, 150$.

vlastní vektory matice (7.85) mají tvar

$$\vec{\varphi} = c \left[1, (1 + \tilde{\lambda}), (1 + \tilde{\lambda})^2, \dots, (1 + \tilde{\lambda})^{N-1} \right] \quad (7.94)$$

$$= c \left[1, \exp\left(ik \frac{2\pi}{N}\right), \exp\left(ik \frac{4\pi}{N}\right), \dots, \exp\left(ik \frac{2(N-1)\pi}{N}\right) \right], \quad c \in \mathcal{C} \quad (7.95)$$

a tedy známe řešení soustavy rovnic (7.82), (7.83). Opět je tento výsledek v souladu s analytickým řešením rovnice (7.77).

Nakonec ještě poznamenejme, že první derivaci lze aproximovat přesnějším vztahem, než je (7.81):

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = \frac{\varphi(t+h) - \varphi(t-h)}{2h} + O(h^2) \quad (7.96)$$

(viz [Vit87] (5.10)). Matice $\mathbf{\Lambda}$ bude mít potom tvar

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.97)$$

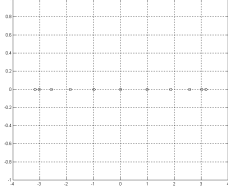
a

$$\tilde{\lambda} = i2h\lambda. \quad (7.98)$$

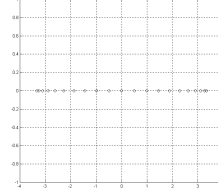
Matice $\mathbf{\Lambda}$ má vlastní čísla

$$\tilde{\lambda} = 2i \sin \frac{2\pi k}{N} \quad (7.99)$$

a vlastní vektory (7.94). Obdržíme-li při použití aproximace (7.81) vlastní čísla $\lambda_k^{(1)}$ (7.91), potom nyní při užití přesnější aproximace (7.96) dostaneme vlastní čísla $\lambda_k^{(2)} = \operatorname{Re} \lambda_k^{(1)}$. Protože jsou hodnoty $\lambda_k^{(1)}$ v komplexní rovině umístěné po obvodu kružnice (viz obr. 7.27), pro sudá N budou některá vlastní čísla $\lambda_k^{(2)}$ stejná a pro $N \rightarrow +\infty$ dostaneme (v okolí nuly) správné spektrum operátoru $\hat{T}$. Pro lichá N se pak na reálnou osu promítnou vlastní čísla $\lambda_k^{(1)}$, která mají velkou imaginární část a nesprávnou reálnou část. To je demonstrováno na obr. 7.28 a 7.29, kde jsou vynesena napočtená vlastní čísla pro $T = 2\pi$ a $N = 20$, $N = 21$.



Obr. 7.28: Spočtená vlastní čísla operátoru $-i\frac{d}{dt}$ při použití přesnější aproximace a pro počet bodů $N = 20$.



Obr. 7.29: Spočtená vlastní čísla operátoru $-i\frac{d}{dt}$ při použití přesnější aproximace a pro počet bodů $N = 21$.

7.3.2 Operátor $-i\frac{d}{dt} + V_1 \cos \omega t$

Tentokrát se zabýváme numerickým řešením rovnice

$$\hat{T}\varphi(t) = \lambda\varphi(t), \quad \lambda \in \mathcal{C}, \quad (7.100)$$

kde

$$\hat{T} = -i\frac{d}{dt} + V_1 \cos \omega t, \quad V_1 \in \mathcal{R} \quad (7.101)$$

je diferenciální operátor definovaný na prostoru $\mathcal{T}$ kvadraticky integrabilních funkcí na intervalu $\langle 0, T \rangle$, které vyhovují periodické okrajové podmínce

$$\varphi(0) = \varphi(T) \quad (7.102)$$

a

$$\omega = \frac{2\pi}{T}. \quad (7.103)$$

Zopakujeme-li postup provedený v předchozí kapitole, obdržíme opět systém lineárních rovnic určený maticí

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} -1 + v_1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 + v_2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 + v_3 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 + v_{N-1} & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 + v_N \end{pmatrix}, \quad (7.104)$$

kde

$$v_n = i\hbar V_1 \cos[\omega(n-1)h]. \quad (7.105)$$

Vlastní čísla operátoru $\hat{T}$ jsou pak kořeny algebraické rovnice N -tého stupně

$$\det(\mathbf{\Lambda} - i\hbar\lambda\mathbf{I}) = 0. \quad (7.106)$$

7.3.3 Operátor $K \frac{d^2}{dx^2}$

Zabývejme se nyní úlohou nalézt vlastní čísla E a vlastní funkce $\psi(x)$ operátoru

$$\hat{H} = K \frac{d^2}{dx^2}, \quad K \in \mathcal{C}, \quad (7.107)$$

definovaného na $L^2(-a, a)$, $a \in \mathcal{R}^+$ s nulovou okrajovou podmínkou

$$\psi(-a) = \psi(a) = 0. \quad (7.108)$$

Dále budeme postupovat stejně, jako v předchozích kapitolách. Rozdělme interval $(-a, a)$ na $N+2$ bodů a to tak, že bod č. $n = 0, 1, 2, \dots, N, N+1$ bude v bodě $x = -a + nh$, kde

$$h = \frac{2a}{N+1}. \quad (7.109)$$

Pro druhou derivaci funkce $\psi(x)$ platí

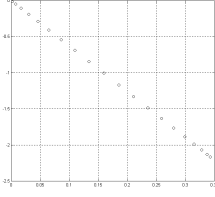
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{\psi(x-h) - 2\psi(x) + \psi(x+h)}{h^2} + O(h^2) \quad (7.110)$$

(viz [Vit87] (5.10)). Nyní v jednotlivých bodech dělení intervalu aproximujme derivaci a aplikujme okrajovou podmínku (7.108). Dostaneme tak systém N lineárních rovnic pro neznámé funkční hodnoty funkce $\psi(-a + nh) \equiv \psi_n$

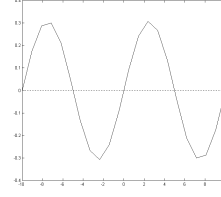
$$-2\psi_1 + \psi_2 = \tilde{\lambda}\psi_1 \quad (7.111)$$

$$\psi_{n-1} - 2\psi_n + \psi_{n+1} = \tilde{\lambda}\psi_n, \quad n = 2, \dots, N-1 \quad (7.112)$$

$$\psi_{N-1} - 2\psi_N = \tilde{\lambda}\psi_N, \quad (7.113)$$



Obr. 7.30: Vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}$ otočeného o $0.9\frac{\pi}{4}$ ($N = 20$, $a = 10$).



Obr. 7.31: Vlastní funkce operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}$ "otočeného" o $0.9\frac{\pi}{4}$ příslušná k vlastnímu číslu $E = 0.02997 - 0.1892i$ ($N = 20$).

kde

$$\tilde{\lambda} = \lambda \frac{h^2}{K}. \quad (7.114)$$

Úlohu nalezení vlastních čísel a vektorů operátoru $\hat{H}$ jsme tak převedli na úlohu vlastních čísel a vektorů matice

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}. \quad (7.115)$$

Matice $\mathbf{\Lambda}$ má vlastní čísla

$$\tilde{\lambda} = -2 - 2 \cos \left(\pi \frac{k+1}{N+1} \right), \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (7.116)$$

(viz [HO96]), které určují hodnoty ze spojitě části spektra operátoru $\hat{H}$, a vlastní vektory

$$\vec{\psi} = c \left[\sin \left(k\pi \frac{1}{N+1} \right), \sin \left(k\pi \frac{2}{N+1} \right), \dots, \sin \left(k\pi \frac{N}{N+1} \right) \right], \quad k = 0, 1, \dots, N-1. \quad (7.117)$$

Na obrázku 7.30 jsou znázorněna vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}$ „otočeného“ o $0.9\frac{\pi}{4}$. Vnitřek intervalu $(-10, 10)$ byl rozdělen na 20 bodů. Na obr. 7.31 je graf vlastní vlnové funkce, která přísluší vlastnímu číslu $E = 0.02997 - 0.1892i$

7.3.4 Operátor $K\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

Modifikujme předchozí úlohu. Vyšetřujme nyní operátor

$$\hat{H} = K\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad K \in \mathcal{C}. \quad (7.118)$$

Zopakujeme-li postup provedený v předchozí kapitole, obdržíme opět systém lineárních rovnic určený maticí

$$\Lambda = \begin{pmatrix} -2 + v_1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 + v_2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 + v_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -2 + v_{N-2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 + v_{N-1} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 + v_N \end{pmatrix}, \quad (7.119)$$

kde

$$v_n = \frac{h^2}{K}V(-a + nh). \quad (7.120)$$

Na obrázku 7.32 jsou znázorněna vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$ „otočeného“ o $0.85\frac{\pi}{4}$. Vnitřek intervalu $(-30, 30)$ byl rozdělen na 200 bodů. Na obrázku jsou patrné čtyři rezonance. Výpočet trval 47 sekund.

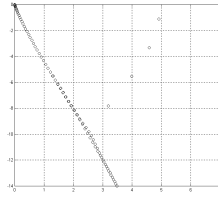
Graf 7.33 znázorňuje závislost polohy dvou vybraných rezonancí operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp(-ax^2)$ na velikosti parametru a . Interval $(-20, 20)$ byl rozdělen na 200 bodů a operátor byl „otočen“ o $0.9\frac{\pi}{4}$. Výpočet trval 1084 sekund. Na obrázku 7.34 je vynesena poloha rezonancí operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$ v závislosti na parametru V . Interval $(-20, 20)$ byl rozdělen opět na 200 bodů a operátor byl „otočen“ o $0.95\frac{\pi}{4}$. Výpočet trval 1832 sekund.

Na obrázku 7.36 jsou vyneseny tři vybrané rezonance operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{5}{1 + \exp\frac{|x|-1}{a}}$ pro různé hodnoty parametru a . Potenciál v tomto operátoru je speciálním případem Wood-Saxonova potenciálu

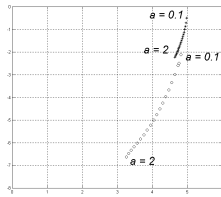
$$V(x) = \frac{V}{1 + \exp\frac{|x|-R}{a}}, \quad R, a \in \mathcal{R}^+. \quad (7.121)$$

Interval $(-30, 30)$ byl rozdělen na 200 bodů a operátor byl „otočen“ o $0.85\frac{\pi}{4}$. Výpočet trval 1725 sekund.

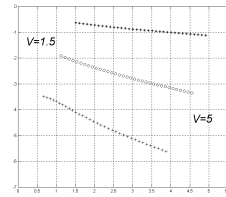
Zajímavé je porovnání dříve popsané metody výpočtu rezonancí pomocí rozvoje řešení do ortonormální báze a metody konečných diferencí. Na obrázku 7.37 a



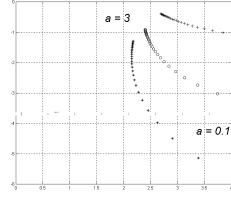
Obr. 7.32: Vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$ "otočeného" o $0.85\frac{\pi}{4}$ ($N = 200$, $a = 30$).



Obr. 7.33: Závislost dvou vybraných rezonancí operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp(-ax^2)$ na parametru a .

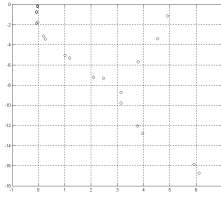


Obr. 7.34: Závislost tří vybraných rezonancí operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$ na parametru V .

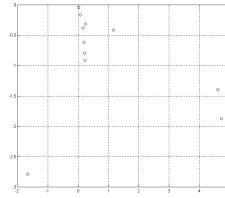


Obr. 7.35: Graf Wood-Saxonova potenciálu $V(x) = \frac{5}{1+\exp \frac{|x|-1}{a}}$ pro $a = 0.1$.

Obr. 7.36: Závislost tří vybraných rezonancí operátoru $-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{5}{1+\exp \frac{|x|-1}{a}}$ na parametru a .



Obr. 7.37: Vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp \left(-\frac{1}{2} x^2 \right)$ "otočeného" o $0.85 \frac{\pi}{4}$ spočtená metodou rozvoje řešení do báze ($N = 20$).



Obr. 7.38: Vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + 5 \exp \left(-\frac{1}{2} x^2 \right)$ "otočeného" o $0.85 \frac{\pi}{4}$ spočtená metodou konečných diferencí ($N = 20$, $a = 15$).

7.38 jsou znázorněna vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + 5\exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)$ „otočeného“ o $0.85\frac{\pi}{4}$ spočtená prvním i druhým způsobem. Při výpočtu pomocí rozvoje řešení do báze bylo použito 20 členů ortonormální báze a při užití metody konečných diferencí byl interval $(-15, 15)$ rozdělen na 20 bodů. Je vidět, že první metoda vyžaduje hledat vlastní čísla menší matice, než metoda druhá. Na druhé straně je však výpočet maticových elementů u metody rozvoje do báze nesrovnatelně složitější, než u metody konečných diferencí (zvláště v případě, že nelze potřebné integrály spočítat analyticky) a pro velký počet členů ortonormální báze dochází k poměrně velkým numerickým chybám.

7.3.5 Operátor $K\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt}$

Nyní se zabýváme problémem vlastních čísel a vektorů operátoru

$$\hat{K} = K\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt}, \quad K \in \mathcal{C} \quad (7.122)$$

definovaného na množině funkcí z $L^2(0, T) \otimes L^2(-a, a)$ s okrajovými podmínkami

$$\psi(-a, t) = \psi(a, t) = 0, \quad (7.123)$$

$$\psi(x, 0) = \varphi(x, T). \quad (7.124)$$

Rozdělme interval $\langle 0, T \rangle$ na $N + 1$ bodů a to tak, že bod č. $n = 1, 2, \dots, N, N + 1$ bude v bodě $t = (n - 1)h$, kde

$$h = \frac{T}{N} \quad (7.125)$$

a interval $(-a, a)$ rozdělme na $M + 2$ bodů tak, že bod č. $m = 0, 1, 2, \dots, M, M + 1$ bude v bodě $x = -a + mg$, kde

$$g = \frac{2a}{M + 1}. \quad (7.126)$$

Opět v operátoru (7.122) nahradíme derivace přibližnými vztahy (viz (7.96), (7.110)) a pro vlastní čísla λ a funkční hodnoty $\psi(mg, h(n - 1)) \equiv \psi_{m,n}$ vlastních funkcí dostaneme soustavu rovnic

$$-2C\psi_{1,1} + C\psi_{2,1} + \psi_{1,2} - \psi_{1,N} = \tilde{\lambda}\psi_{1,1} \quad (7.127)$$

$$C\psi_{m-1,1} - 2C\psi_{m,1} + C\psi_{m+1,1} + \psi_{m,2} - \psi_{m,N} = \tilde{\lambda}\psi_{m,1}, \quad m = 2, \dots, M - 1 \quad (7.128)$$

$$C\psi_{M-1,1} - 2C\psi_{M,1} + \psi_{M,2} - \psi_{M,N} = \tilde{\lambda}\psi_{M,1} \quad (7.129)$$

$$-2C\psi_{1,n} + C\psi_{2,n} + \psi_{1,n+1} - \psi_{1,n-1} = \tilde{\lambda}\psi_{1,n}, \quad n = 2, \dots, N - 1 \quad (7.130)$$

$$C\psi_{m-1,n} - 2C\psi_{m,n} + C\psi_{m+1,n} + \psi_{m,n+1} - \psi_{m,n-1} = \tilde{\lambda}\psi_{m,n}, \quad n = 2, \dots, N - 1, \quad m = 2, \dots, M - 1 \quad (7.131)$$

$$C\psi_{M-1,n} - 2C\psi_{M,n} + \psi_{M,n+1} - \psi_{M,n-1} = \tilde{\lambda}\psi_{M,n} \quad n = 2, \dots, N - 1 \quad (7.132)$$

$$-2C\psi_{1,N} + C\psi_{2,N} + \psi_{1,1} - \psi_{1,N-1} = \tilde{\lambda}\psi_{1,N} \quad (7.133)$$

$$C\psi_{m-1,N} - 2C\psi_{m,N} + C\psi_{m+1,N} + \psi_{m,1} - \psi_{m,N-1} = \tilde{\lambda}\psi_{m,N}, \quad m = 2, \dots, M-1 \quad (7.134)$$

$$C\psi_{M-1,N} - 2C\psi_{M,N} + \psi_{M,1} - \psi_{M,N-1} = \tilde{\lambda}\psi_{M,N}, \quad (7.135)$$

kde

$$C = i \frac{2hK}{g^2}, \quad (7.136)$$

$$\tilde{\lambda} = \lambda 2hi. \quad (7.137)$$

Tato soustava je určena maticí, kterou lze v blokovém tvaru zapsat:

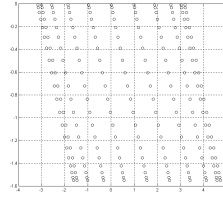
$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \mathbf{D} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{D} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{D} & \mathbf{I} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{D} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{D} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & -\mathbf{I} & \mathbf{D} & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{D} \end{pmatrix}, \quad (7.138)$$

kde $\mathbf{I}$ a $\mathbf{0}$ je jednotková a nulová matice o rozměru $M \times M$, $\mathbf{D}$ je matice, která má následující tvar

$$\mathbf{D} = C \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad (7.139)$$

a má opět rozměr $M \times M$. V matici $\mathbf{\Lambda}$ je v každém řádku a sloupci N čtvercových matic. Úlohu jsme tak převedli na problém vlastních čísel a vektorů matice $\mathbf{\Lambda}$. Jestliže $\vec{\psi}$ je vlastní vektor matice $\mathbf{\Lambda}$, potom jsou určeny i funkční hodnoty $\psi(-a + mg, (n-1)h) \equiv \psi_{m,n}$:

$$\begin{aligned} \vec{\psi} = & [\psi_{1,1}, \psi_{2,1}, \psi_{3,1}, \dots, \psi_{M,1}, \\ & \psi_{1,2}, \psi_{2,2}, \psi_{3,2}, \dots, \psi_{M,2}, \\ & \psi_{1,3}, \psi_{2,3}, \psi_{3,3}, \dots, \psi_{M,3}, \\ & \dots, \\ & \psi_{1,N}, \psi_{2,N}, \psi_{3,N}, \dots, \psi_{M,N}]. \end{aligned} \quad (7.140)$$



Obr. 7.39: Vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt}$ "otočeného" o $0.5\frac{\pi}{4}$ ($M = N = 20$, $a = 10$, $T = 2\pi$).

Matice $\mathbf{A}$ má vlastní čísla

$$\tilde{\lambda} = 2i \sin \frac{2k\pi}{M} - 2C \left[1 + \cos \left(\pi \frac{l+1}{N+1} \right) \right], \quad k = 0, 1, \dots, M, \quad l = 0, 1, \dots, N \quad (7.141)$$

a vlastní vektory

$$\psi_{m,n}^{(k,l)} = \left[\exp \left(ik \frac{2\pi}{N} \right) \right]^{n-1} \sin \left(l\pi \frac{n}{N+1} \right). \quad (7.142)$$

Na obr. 7.39 jsou znázorněna vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt}$ "otočeného" o $0.5\frac{\pi}{4}$. Vnitřek oblasti $(-10, 10) \times (0, 2\pi)$ byl rozdělen na 20×20 bodů. Výpočet trval asi 470 sekund.

Nahradíme-li v operátoru (7.122) časovou derivaci přibližným vztahem (7.81), pro vlastní čísla λ a funkční hodnoty $\psi(mg, h(n-1)) \equiv \psi_{m,n}$ vlastních funkcí dostaneme soustavu rovnic

$$-2C\psi_{1,n} + C\psi_{2,n} + \psi_{1,n+1} - \psi_{1,n} = \tilde{\lambda}\psi_{1,n}, \quad n = 1, \dots, N-1 \quad (7.143)$$

$$C\psi_{m-1,n} - 2C\psi_{m,n} + C\psi_{m+1,n} + \psi_{m,n+1} - \psi_{m,n} = \tilde{\lambda}\psi_{m,n}, \quad n = 1, \dots, N-1, \quad m = 2, \dots, M-1 \quad (7.144)$$

$$C\psi_{M-1,n} - 2C\psi_{M,n} + \psi_{M,n+1} - \psi_{M,n} = \tilde{\lambda}\psi_{M,n} \quad n = 1, \dots, N-1 \quad (7.145)$$

$$-2C\psi_{1,N} + C\psi_{2,N} + \psi_{1,1} - \psi_{1,N} = \tilde{\lambda}\psi_{1,N} \quad (7.146)$$

$$C\psi_{m-1,N} - 2C\psi_{m,N} + C\psi_{m+1,N} + \psi_{m,1} - \psi_{m,N} = \tilde{\lambda}\psi_{m,N}, \quad m = 2, \dots, M-1$$

$$(7.147)$$

$$C\psi_{M-1,N} - 2C\psi_{M,N} + \psi_{M,1} - \psi_{M,N} = \tilde{\lambda}\psi_{M,N}, \quad (7.148)$$

kde

$$C = i\frac{Kh}{g^2}, \quad (7.149)$$

$$\tilde{\lambda} = \lambda hi. \quad (7.150)$$

Tato soustava je určena maticí, kterou lze v blokovém tvaru zapsat:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{D} - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D} - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D} - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D} - \mathbf{I} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{D} - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{D} - \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D} - \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (7.151)$$

kde $\mathbf{I}$ a $\mathbf{0}$ je jednotková a nulová matice o rozměru $M \times M$, $\mathbf{D}$ je matice, která má následující tvar

$$\mathbf{D} = C \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \quad (7.152)$$

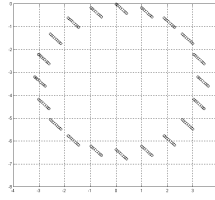
a má opět rozměr $M \times M$. V matici $\mathbf{A}$ je v každém řádku a sloupci N čtvercových matic. Matice $\mathbf{A}$ má vlastní čísla

$$\tilde{\lambda} = \exp\left(ik\frac{2\pi}{M}\right) - 1 - 2C \left[1 + \cos\left(\pi\frac{l+1}{N+1}\right)\right], \quad k = 0, 1, \dots, M, \quad l = 0, 1, \dots, N \quad (7.153)$$

a vlastní vektory

$$\psi_{m,n}^{(k,l)} = \left[\exp\left(ik\frac{2\pi}{N}\right)\right]^{n-1} \sin\left(l\pi\frac{n}{N+1}\right). \quad (7.154)$$

Na obr. 7.40 jsou znázorněna vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt}$ "otočeného" o $0.5\frac{\pi}{4}$. Vnitřek oblasti $(-10, 10) \times (0, 2\pi)$ byl rozdělen na 10×20 bodů. Výpočet trval asi 470 sekund.



Obr. 7.40: Spočítaná vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt}$ "otočeného" o $0.5\frac{\pi}{4}$ při použití méně přesné aproximace první derivace ($M = N = 20$, $a = 10$, $T = 2\pi$).

7.3.6 Operátor $K\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt} + V(x) + V_1 \cos \omega t$

Nyní se budeme zabývat nejjednodušším případem, kdy operátor $\hat{K}(t)$ definovaný na množině funkcí z $L^2(0, T) \otimes L^2(-a, a)$ s okrajovými podmínkami

$$\psi(-a, t) = \psi(a, t) = 0, \quad (7.155)$$

$$\psi(x, 0) = \varphi(x, T). \quad (7.156)$$

závisí periodicky na čase:

$$\hat{K}(t) = K\frac{d^2}{dx^2} - i\frac{d}{dt} + V(x) + V_1 \cos \omega t. \quad (7.157)$$

Postupem obdobným jako v předchozích kapitolách dospějeme k problému vlastních čísel a vektorů matice $\tilde{\Lambda}$:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{D}_2 & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{D}_3 & \mathbf{I} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{D}_4 & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{D}_{N-2} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & -\mathbf{I} & \mathbf{D}_{N-1} & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{D}_N \end{pmatrix}, \quad (7.158)$$

kde $\mathbf{I}$ a $\mathbf{0}$ je jednotková a nulová matice o rozměru $M \times M$, $\mathbf{D}_n$ jsou matice, které

mají následující tvar

$$\mathbf{D}_n = C \begin{pmatrix} v_1^{(n)} - 2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & v_2^{(n)} - 2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & v_3^{(n)} - 2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & v_{N-2}^{(n)} - 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & v_{N-1}^{(n)} - 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & v_N^{(n)} - 2 \end{pmatrix}, \quad (7.159)$$

kde

$$v_m^{(n)} = \frac{2\hbar i}{C} \left[V(-a + mg) + V_1 \cos(\omega(n-1)h) \right], \quad (7.160)$$

a mají opět rozměr $M \times M$. V matici $\mathbf{\Lambda}$ je v každém řádku a sloupci N čtvercových matic.

Aproximujeme-li časovou derivaci vztahem (7.81), budou mít matice $\tilde{\mathbf{\Lambda}}$, $\mathbf{D}_n$ tvar:

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}_2 - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D}_3 - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D}_4 - \mathbf{I} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{D}_{N-2} - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{D}_{N-1} - \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D}_N - \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (7.161)$$

$$\mathbf{D}_n = C \begin{pmatrix} v_1^{(n)} - 2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & v_2^{(n)} - 2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & v_3^{(n)} - 2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & v_{N-2}^{(n)} - 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & v_{N-1}^{(n)} - 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & v_N^{(n)} - 2 \end{pmatrix}, \quad (7.162)$$

kde

$$v_m^{(n)} = \frac{\hbar i}{C} \left[V(-a + mg) + V_1 \cos(\omega(n-1)h) \right]. \quad (7.163)$$

a

$$C = i \frac{Kh}{g^2}, \quad (7.164)$$

$$\tilde{\lambda} = \lambda \hbar i. \quad (7.165)$$

7.3.7 Operátor $K \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{d}{dt} + V(x)(1 + V_1 \cos \omega t)$

Nakonec hledejme vlastní čísla a funkce operátoru

$$\hat{K}(t) = K \frac{d^2}{dx^2} - i \frac{d}{dt} + V(x)(1 + V_1 \cos \omega t) \quad (7.166)$$

definovaného na množině funkcí z $L^2(0, T) \otimes L^2(-a, a)$ s okrajovými podmínkami

$$\psi(-a, t) = \psi(a, t) = 0, \quad (7.167)$$

$$\psi(x, 0) = \varphi(x, T). \quad (7.168)$$

Postupem obdobným jako v předchozích kapitolách dospějeme k problému vlastních čísel a vektorů matice $\tilde{\Lambda}$:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{D}_2 & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{D}_3 & \mathbf{I} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{D}_4 & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{D}_{N-2} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & -\mathbf{I} & \mathbf{D}_{N-1} & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & -\mathbf{I} & \mathbf{D}_N \end{pmatrix}, \quad (7.169)$$

kde $\mathbf{I}$ a $\mathbf{0}$ je jednotková a nulová matice o rozměru $M \times M$, $\mathbf{D}_n$ jsou matice, které mají následující tvar

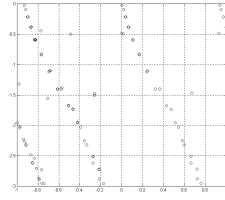
$$\mathbf{D}_n = C \begin{pmatrix} v_1^{(n)} - 2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & v_2^{(n)} - 2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & v_3^{(n)} - 2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & v_{N-2}^{(n)} - 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & v_{N-1}^{(n)} - 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & v_N^{(n)} - 2 \end{pmatrix}, \quad (7.170)$$

kde

$$v_m^{(n)} = \frac{2\hbar i}{C} V(-a + mg) \left[1 + V_1 \cos(\omega(n-1)h) \right], \quad (7.171)$$

a mají opět rozměr $M \times M$. V matici Λ je v každém řádku a sloupci N čtvercových matic.

Aproximujeme-li časovou derivaci vztahem (7.81), budou mít matice $\tilde{\Lambda}$, $\mathbf{D}_n$ tvar:



Obr. 7.41: Spočítaná vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)(1 + 0.3\cos t)$ "otočeného" o $0.85\frac{\pi}{4}$ ($M = 40, N = 10, a = 15$).

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}_2 - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D}_3 - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D}_4 - \mathbf{I} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{D}_{N-2} - \mathbf{I} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{D}_{N-1} - \mathbf{I} & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D}_N - \mathbf{I} \end{pmatrix}, \quad (7.172)$$

$$\mathbf{D}_n = C \begin{pmatrix} v_1^{(n)} - 2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & v_2^{(n)} - 2 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & v_3^{(n)} - 2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & v_{N-2}^{(n)} - 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & v_{N-1}^{(n)} - 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & v_N^{(n)} - 2 \end{pmatrix}, \quad (7.173)$$

kde

$$v_m^{(n)} = \frac{\hbar i}{C} V(-a + mg) \left[1 + V_1 \cos(\omega(n-1)h) \right], \quad (7.174)$$

a

$$C = i \frac{Kh}{g^2}, \quad (7.175)$$

$$\tilde{\lambda} = \lambda \hbar i. \quad (7.176)$$

Na obr. 7.41 jsou znázorněna vlastní čísla operátoru $-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}-i\frac{d}{dt}+\exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)(1+0.3\cos t)$ "otočeného" o $0.85\frac{\pi}{4}$. Oblast $(-15, 15) \times (0, 2\pi)$ byla rozdělena na 40×10 bodů. Výpočet trval asi 270 sekund.

Kapitola 8

Závěr

Tato práce ukázala použití metody komplexního škálování v úlohách potenciálového rozptylu, kdy je systém jednodimenzionální a kdy jeho hamiltonián navíc periodicky závisí na čase. Byly uvažovány potenciály krátkého dosahu, což umožnilo snadnou numerickou zvládnutelnost.

Podrobně byly rozebrány metody výpočtu rezonancí pomocí rozvoje řešení do ortonormální báze harmonického oscilátoru a pomocí metody konečných diferencí. Zjistilo se, že existují omezení na použitelnost těchto metod. Např. vznikají velké soustavy lineárních rovnic, jejichž řešení je obtížné i na dnešních výkonných počítačích. Při hledání rezonancí metodou konečných diferencí při dělení obdélníkové oblasti na $M \times N$ bodů vzniká problém hledání vlastních čísel a vektorů obrovské matice o rozměru $MN \times MN$. Při použití metody rozvoje řešení do báze dochází kvůli velikosti maticových elementů k poměrně velkým numerickým chybám, které znemožňují použít dostatečně členů ortonormální báze. Další omezení vzniká při použití metody komplexního škálování, jejíž užití je podloženo pouze u analyticky prodloužitelných potenciálů. Pro případ pravoúhlé potenciálové jámy (bariéry) lze však použít přiblížení pomocí Wood-Saxonova potenciálu.

Poděkování

Tato studie vznikla jako diplomová práce. Chtěl bych poděkovat svému školiteli panu RNDr. Miloši Taterovi, CSc. z Ústavu jaderné fyziky AVČR v Řeži u Prahy za odborné vedení a trpělivost při odhalování mých neznalostí a celkové korigování mé práce.

Literatura

- [AC71] Jacques Aguilar and Jean Michel Combes. A class of analytic perturbations for one-body Schrödinger hamiltonians. *Commun. math. Phys.*, 22:269–279, Březen 1971.
- [AS64] Milton Abramowitz and Irene A. Stegun. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables*. Natinoal bureau of standards applied mathematics series, 1964. Ruský překlad: Spravočnik po speciálnym funkcijam s formulami, grafikami i matematičeskimi tablicami, Nauka, Moskva 1979.
- [BDG95] Andreas Buchleitner, Dominique Delande, and Jean-Claude Gay. Microwave ionization of three-dimensional hydrogen atoms in a realistic numerical experiment. *Journal of the Optical Society of America*, 12B(4):505–519, Duben 1995.
- [BEH93] Jiří Blank, Pavel Exner, and Miloslav Havlíček. *Lineární operátory v kvantové fyzice*. Karolinum, Praha, 1993.
- [Boh91] Oriol Bohigas. Random matrix theories and chaotic dynamics. In M.-J. Giannoni, André Voros, and Jean Zinn-Justin, editors, *Les Houches School LII (1989)*, Division de Physique Théorique, Institut de Physique Nucléaire, Orsay CEDEX, 1991. Elsevier Science Publishers B. V.
- [For83] Jiří Formánek. *Úvod do kvantové teorie*. Academia, Praha, 1983.
- [GŠ94] Peter Gerwinski and Petr Šeba. Quantum resonances due to classical stability islands. *Physical Review*, E50(5):3615–3622, Listopad 1994.
- [Hän97] Peter Hänggi. Driven quantum systems. In T. Dittrich et al., editor, *Quantum Transport and Dissipation*, pages 249–285, Weinheim, 1997. VCH Publishers.
- [Ho83] Y. K. Ho. The method of complex coordinate rotation and its applications to atomic collision processes. *Physics Reports*, 99(1):1–68, 1983.
- [HO96] G. Y. Hu and R. F. O’Connell. Analytical inversion of symmetrical tri-diagonal matrices. *J. Phys.*, A: Math. Gen.(29):1511–1513, 1996.

- [KKH89] Vladimir I. Kukulin, Vladimir M. Krasnopol'sky, and Jiří Horáček. *Theory of Resonances*. Academia, Prague, 1989.
- [KS96] A. Knauf and Y. G. Sinai. Classical nonintegrability, quantum chaos. In *Sonderforschungsbereich 288*, Berlin, Říjen 1996. Preprint No. 232, <http://www-sfb288.math.tu-berlin.de>.
- [Moi98] Nimrod Moiseyev. Quantum theory of resonances: Calculating energies, widths and cross-sections by complex scaling. *Physics Reports*, 302:211–293, 1998.
- [OT93] Edward Ott and Tamás Tél. Chaotic scattering: An introduction. *Chaos*, 3(4):417–426, Říjen 1993.
- [Sim78] Barry Simon. Resonances and complex scaling: A rigorous overview. *International Journal of Quantum Chemistry*, 14:529–542, 1978.
- [Šeb93] Petr Šeba. Quantum irregular scattering in the presence of a classical stability island. *Physical Review*, E47(6):3870–3878, Červen 1993.
- [Tay72] John R. Taylor. *Scattering Theory*. John Wiley & Sons, Inc., New York, London, Sydney, Toronto, 1972.
- [Vit87] Emil Vitásek. *Numerické metody*. SNTL-Nakladatelství technické literatury, Praha, 1987.
- [Yaj84] Kenji Yajima. Quantum dynamics of time periodic systems. *Physica*, 124A:613–619, 1984.