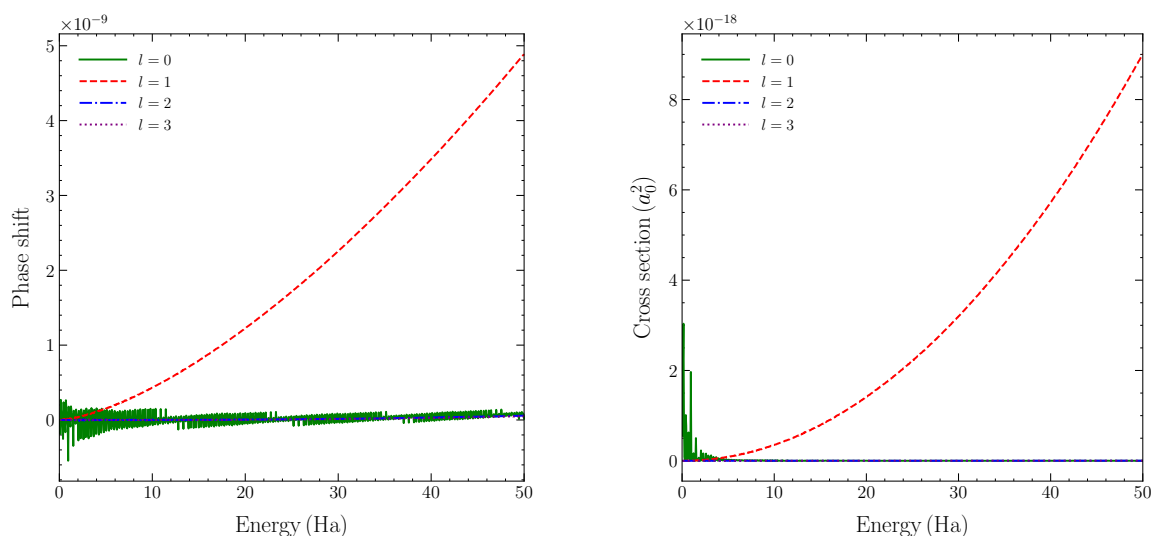


# 1 Potenciálová studna

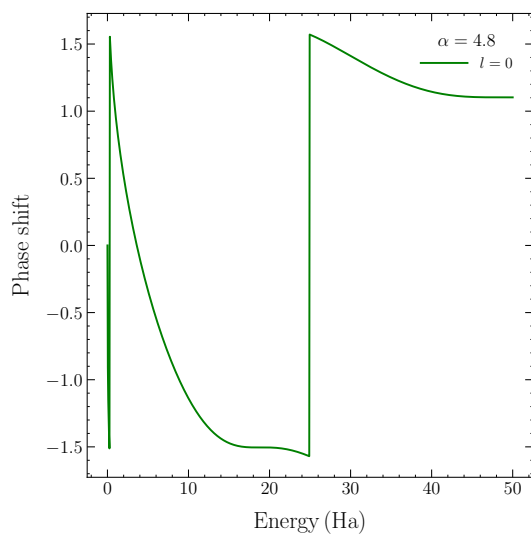
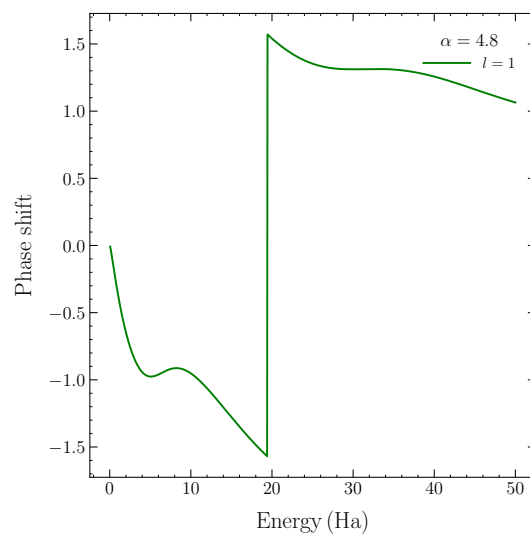
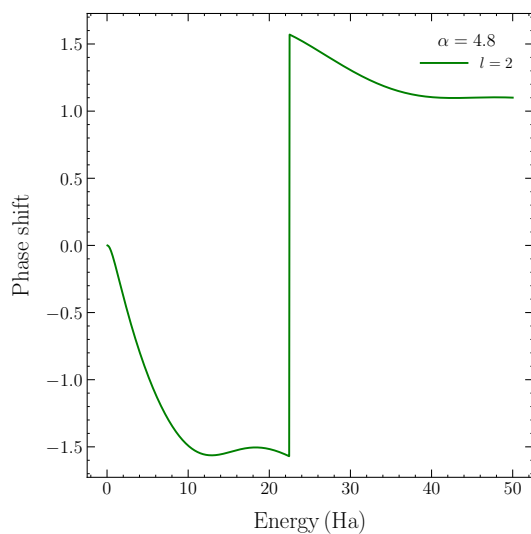
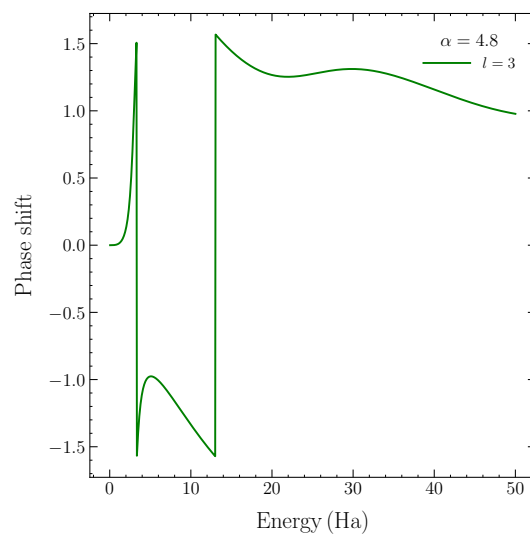
[3.] Program byl otestován využitím nulového potenciálu  $V(r) \equiv 0$ . Výsledky testu, fázové posuny a účinné průřezy, jsou vidět na grafu 1. Vidíme, že pro parciální vlny  $l = 0, 2, 3$  se výsledky shodují s očekáváním, tedy získkem téměř nulových fázových posunů a účinných průřezů s určitými náhodnými odchylkami způsobené numerikou. Pro  $l = 1$  je však pozorován mnou neočekávaný monotónní růst fázového posunu i účinného průřezu. Zatím jsem odhalil, čím je toto chování způsobeno. U všech parciálních vln se však hodnoty fázových posunů i účinných průřezů pohybují v řádu nejvýše  $10^{-9}$ , respektive  $10^{-18}$ , u parciálních vln  $l = 0, 2, 3$  i v mnohem nižším řádu, což je přijatelné považovat za numerickou odchylku.



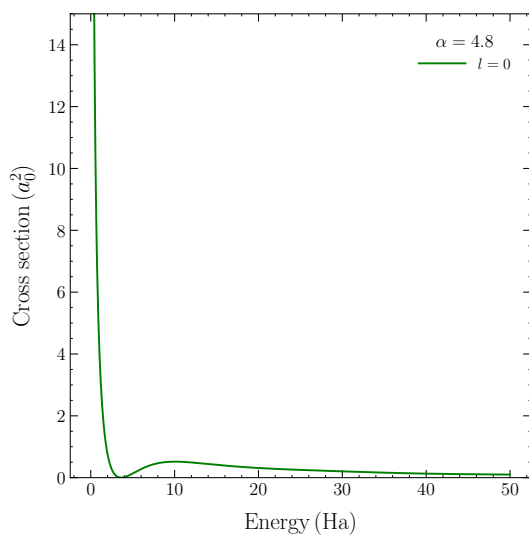
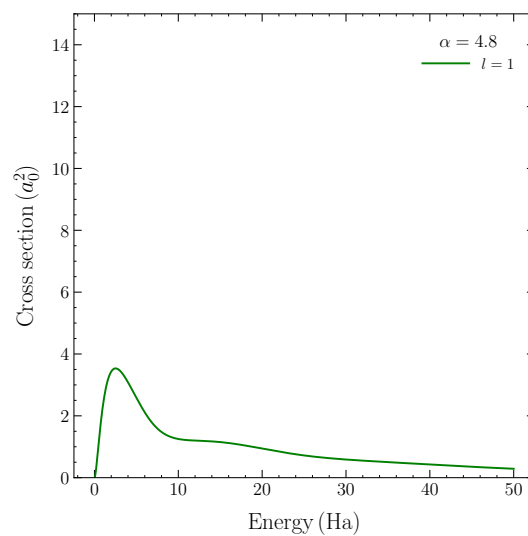
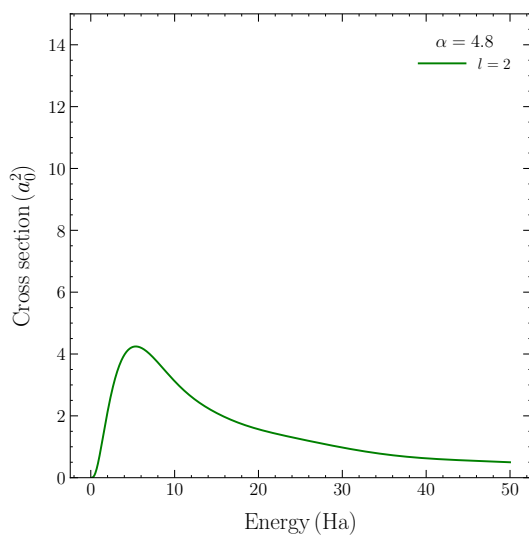
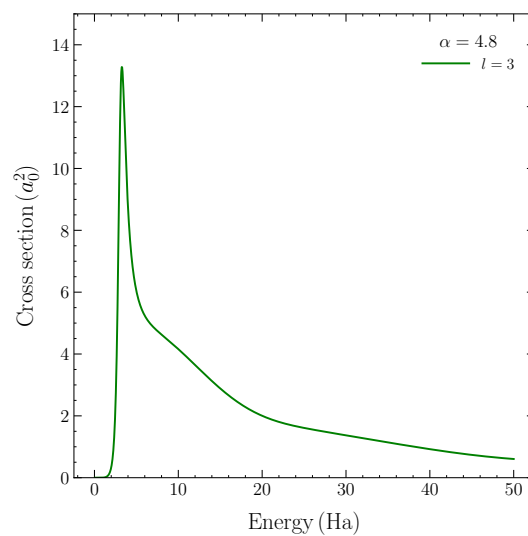
Graf 1: Testování programu pro nulový potenciál  $V(r) \equiv 0$

Pro potenciálovou studnu byly výsledky programu alespoň orientačně porovnány s exaktními řešeními, se kterými se shodovali.

[4.] Fázová posunutí a účinné průřezy pro jednotlivé parciální vlny  $l = 0, 1, 2, 3$  při rozptylu na potenciálové studně se silou  $\alpha = 4.8$  pro  $a = m = 1$  jsou vidět na grafu 2 a 3.

(a)  $l = 0$ (b)  $l = 1$ (c)  $l = 2$ (d)  $l = 3$ 

Graf 2: Fázová posunutí pro potenciálovou studnu se silou  $\alpha = 4.8$  pro různé parciální vlny

(a)  $l = 0$ (b)  $l = 1$ (c)  $l = 2$ (d)  $l = 3$ 

Graf 3: Účinné průřezy pro potenciálovou studnu se silou  $\alpha = 4.8$  pro různé parciální vlny



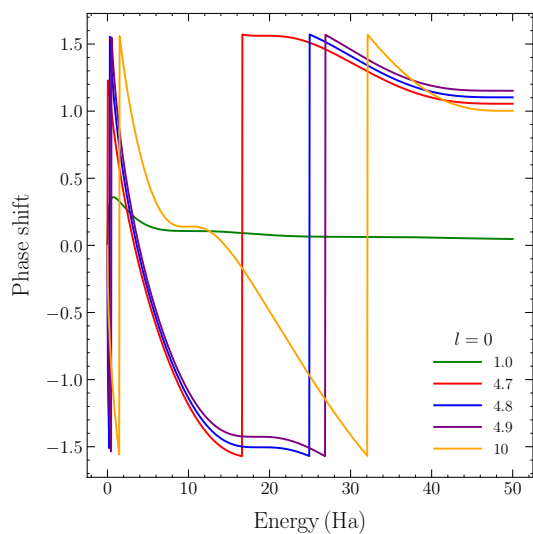
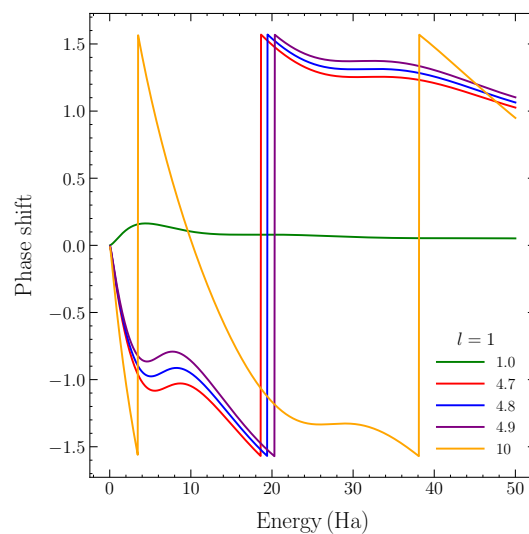
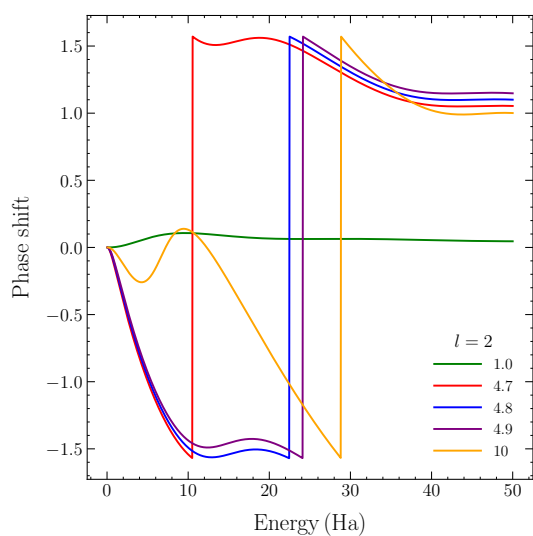
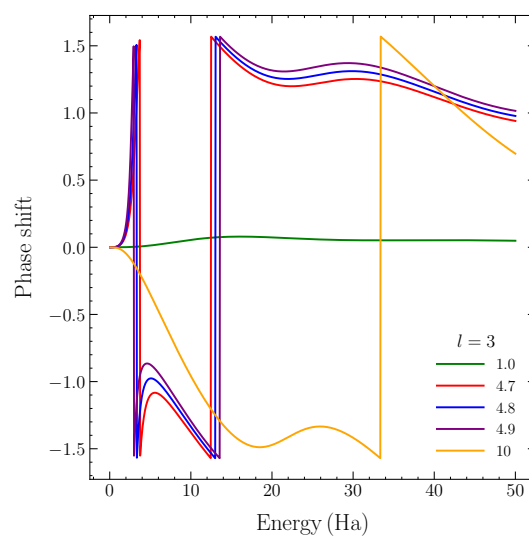
[7.] Závislost fázových posunů a účinných průřezů na síle potenciálové studny můžeme vidět na grafech 5, respektive 6. Z grafů můžeme vidět, že pro menší změny síly potenciálové jámy nedochází k výrazné změně studovaných veličin, pouze k mírnému posunu polohy rezonance a mírné změně výšky a šířky jejího peaku. Podstatnější změna, která však na grafu 6a není pozorovatelná, je limita účinného průřezu pro nízké energie. O ní se však zmíním až v sekci 12.

Z grafů dále můžeme vidět, že pro malou sílu studny  $\alpha = 1$  je její celkový rozptylový efekt zanedbatelný a to až na malé energie  $s$ -vlny. Nepozorujeme pro ni žádné zajímavé jevy jako rezonance.

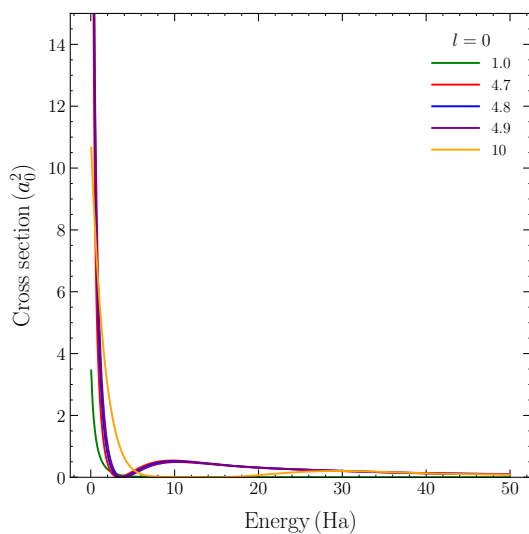
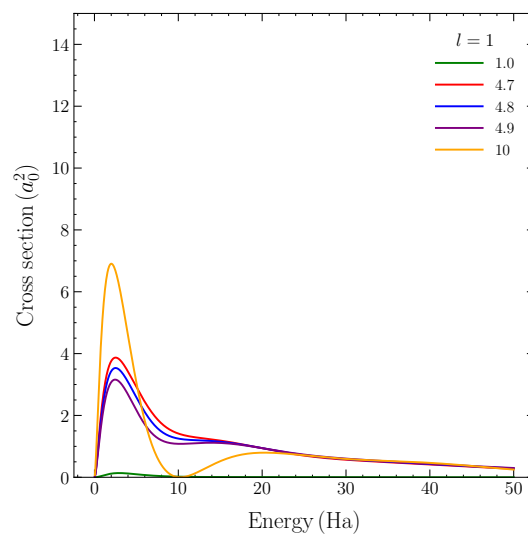
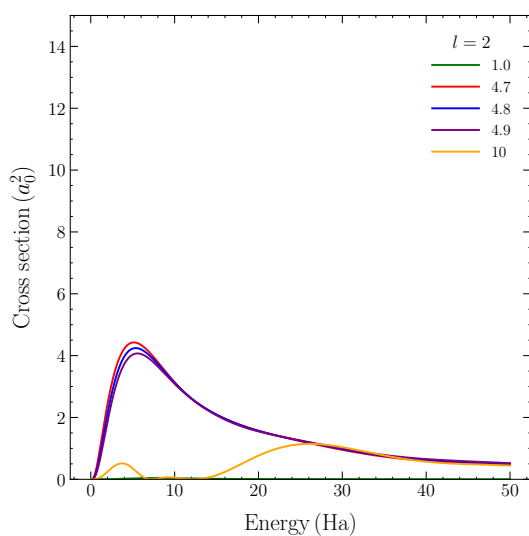
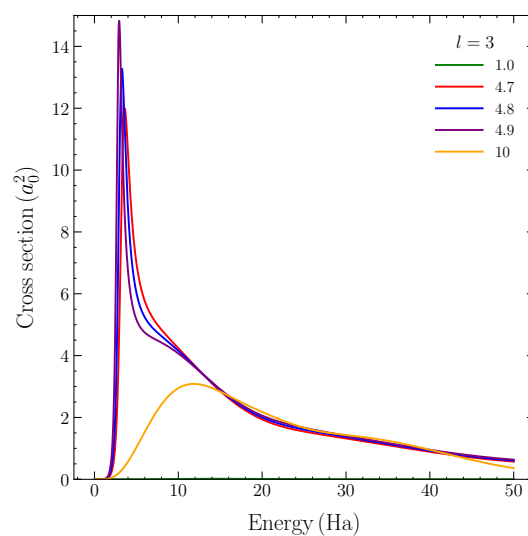
Naopak pro vyšší sílu můžeme vidět zajímavější jevy. U potenciálové jámy se silou  $\alpha = 10$  pozorujeme Ramsauerův-Townsendův efekt navíc i pro první a druhou parciální vlnu, viz grafy 6b a 6c. Tento jev jsme pro ostatní síly potenciálové studny nepozorovali. Zároveň zde již nevidíme rezonanci pro  $l = 3$ . Z grafu 6b bychom pro  $l = 1$  možná peak okolo  $E \approx 2.0$  Ha mohli jako rezonanci interpretovat? V grafu 5b vidíme, že se v okolí této energie fázový posun skutečně prochází hodnotami v intervalu  $(0, \pi)$ , avšak nejsem si jistý, jestli energetický interval není moc široký. Možná bychom tento peak mohli interpretovat jako náznak začínající rezonance, kterou bychom pozorovali pro mírně odlišnou sílu potenciálové jámy?

[8.] Pro  $s$ -vlnu rezonanci nepozorujeme a ani technicky nemůžeme, neboť potenciálová jáma bez odstředivého členu neobsahuje žádnou bariéru, která by umožnila kvazi-zachycení rozptylované částice a tvorbu rezonance.

U vyšších parciálních vln je tato bariéra umožňující rezonance vytvořena odstředivým členem, u potenciálu v druhém úkolu je pak rezonance umožněna i pro  $s$ -vlnu díky tvaru potenciálu.

(a)  $l = 0$ (b)  $l = 1$ (c)  $l = 2$ (d)  $l = 3$ 

Graf 5: Závislost fázového posunutí pro potenciálovou studnu o různých silách pro různé parciální vlny

(a)  $l = 0$ (b)  $l = 1$ (c)  $l = 2$ (d)  $l = 3$ 

Graf 6: Závislost účinného průřezu pro potenciálovou studnu o různých silách pro různé parciální vlny

[10.] Pro zvýšení přesnosti byla jako matching-funkce použit rozdíl centrovaných diferencí, který byl následně namapován na interval  $(-1, 1)$  pomocí funkce  $\tanh$ . Matching-funkce vidíme na grafech 7.

Energie vázaných stavů byly nalezeny jako nuly matching-funkce pomocí bisekce. Jejich chyba je určena částečně chybou centrování difference, tj.  $\mathcal{O}(h^2)$ , kde  $h$  je spacing gridu, ale převážně (ne)správností okrajové podmínky, která se nejvíce projevuje u pomalu klesajících funkcí, tedy pro energie vázaných stavů blízkých nule.

Pro  $l = 0$  byly nalezeny dva vázané stavy s energiemi přibližně  $E_0 \approx -8.202$  Ha,  $E'_0 \approx -0.062$  Ha. Zde můžeme porovnat s analyticky získanými energiemi  $E_0^{\text{exact}} \approx -8.203$  Ha a  $E'_0 \approx -0.063$  Ha, tedy pozorujeme menší odchylku na třetím desetinném místě, přičemž pokus o zlepšení okrajové podmínky ani delší propagace vlnové funkce přesnost nezlepšila. Pro  $l = 1$  a  $l = 2$  byl nalezen vždy pouze jeden vázaný stav s energií  $E_1 \approx -4.83$  Ha a  $E_2 \approx -0.948$  Ha. Pro  $l = 3$  nebyl nalezen žádný vázaný stav.

[11.] Vlnové funkce vázaných stavů jsou zobrazeny na grafech 8.

[12.] V první řadě můžeme zkusit využít výsledky teorie kvantového defektu, podle které by mělo platit:

$$E = -\frac{1}{2a^2},$$

kde  $E$  je energie vázaného stavu blízkého nule a  $a$  je rozptylová délka, kterou můžeme spojit s limitou účinného průřezu pro nulovou energii:

$$\sigma(E \rightarrow 0) = 4\pi a^2$$

Porovnáním těchto dvou hodnot pro potenciálovou jámu se silou  $\alpha = 4.8$  dostaneme s energií volně vázaného stavu  $E'_0 \approx -0.062$  Ha:

$$4\pi a^2 \approx 101.8 a_0^2 \quad \sigma(E \rightarrow 0) \approx 142.8 a_0^2,$$

tedy řádově podobné výsledky lišící se zhruba o 40 %. Tento rozdíl však může být způsoben tím, že stav není dostatečně slabě vázaný. Pro potenciálovou jámu se silou  $\alpha = 4.75$  dostaneme volně vázaný stav s energií  $E'_0 \approx -0.013$  Ha, analogickým postupem pak:

$$4\pi a^2 \approx 494.7 a_0^2 \quad \sigma(E \rightarrow 0) \approx 546 a_0^2,$$

tedy odchylku 10 %. Pro jámu se silou  $\alpha = 4.73$  s volně vázaným stavem s energií  $E'_0 \approx -0.0027$  Ha dostaneme:

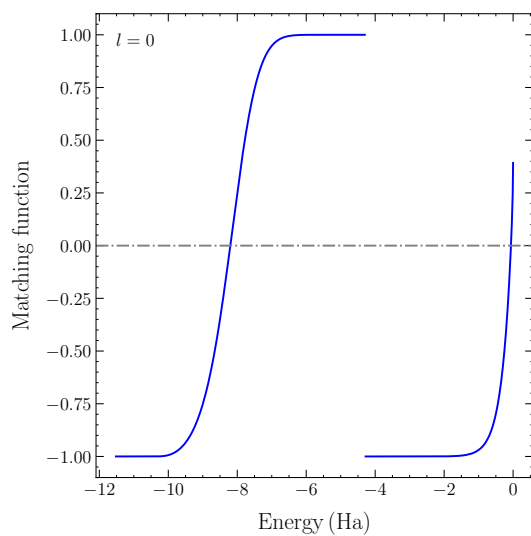
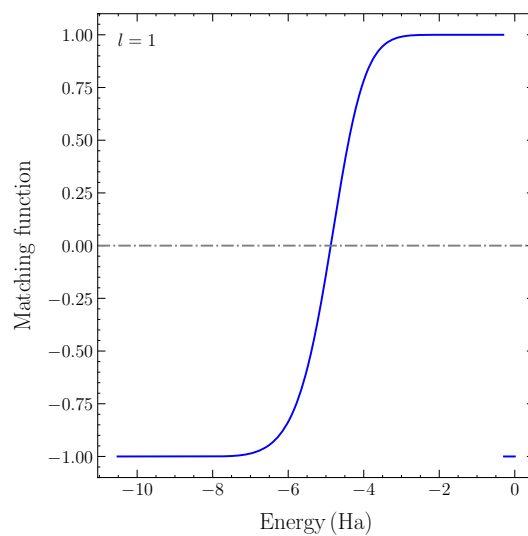
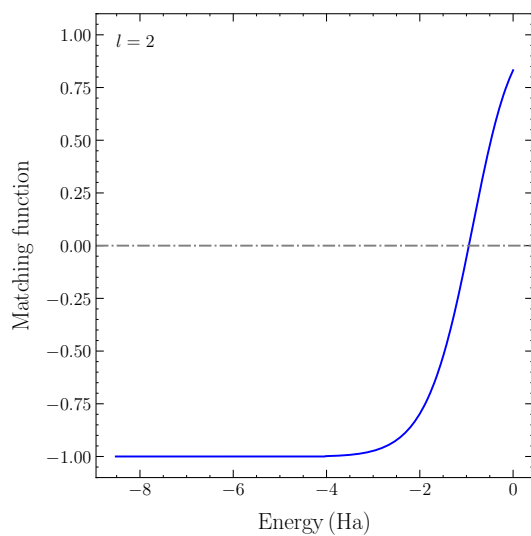
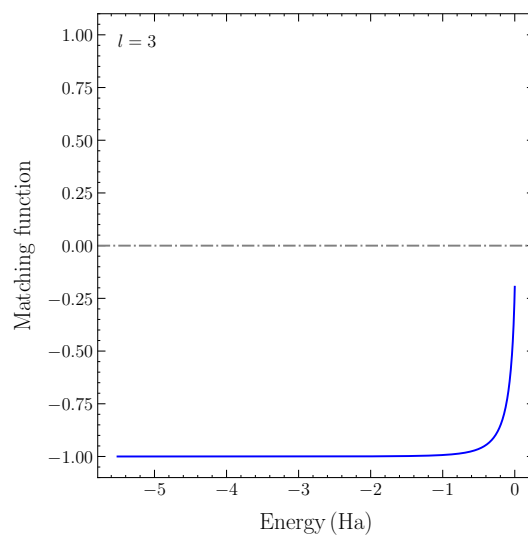
$$4\pi a^2 \approx 2310.0 a_0^2 \quad \sigma(E \rightarrow 0) \approx 2124 a_0^2,$$



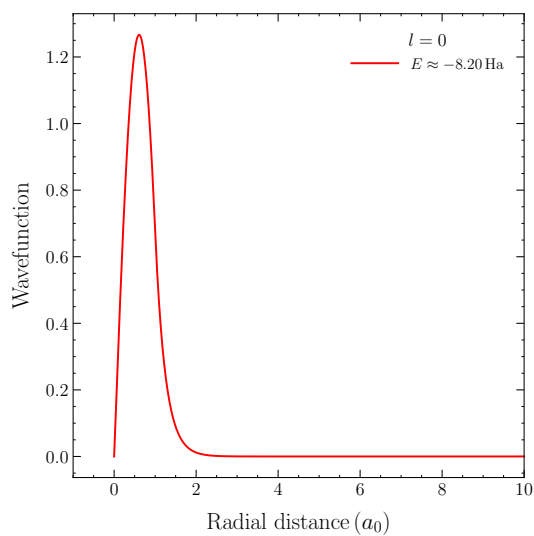
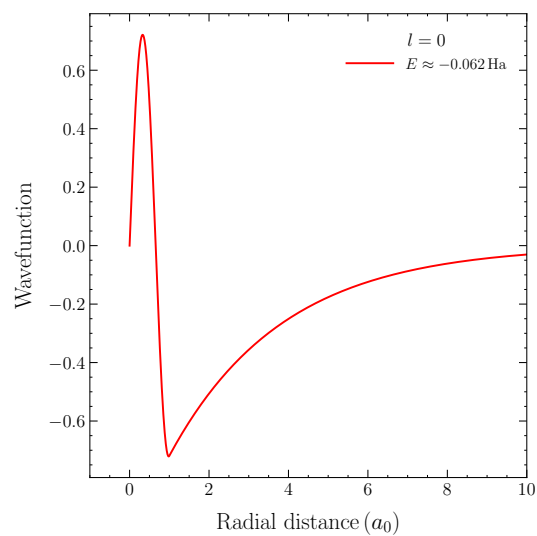
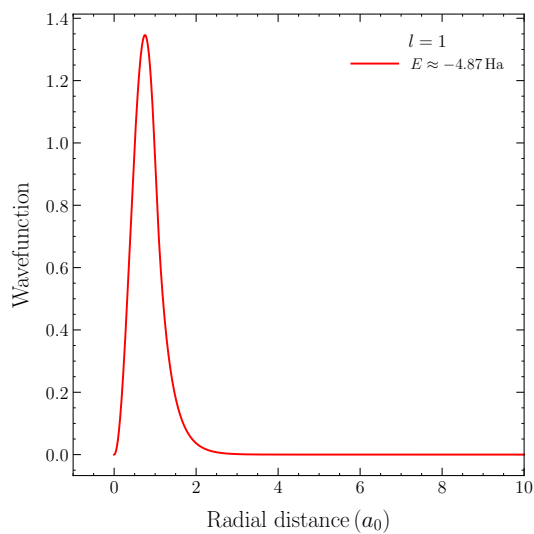
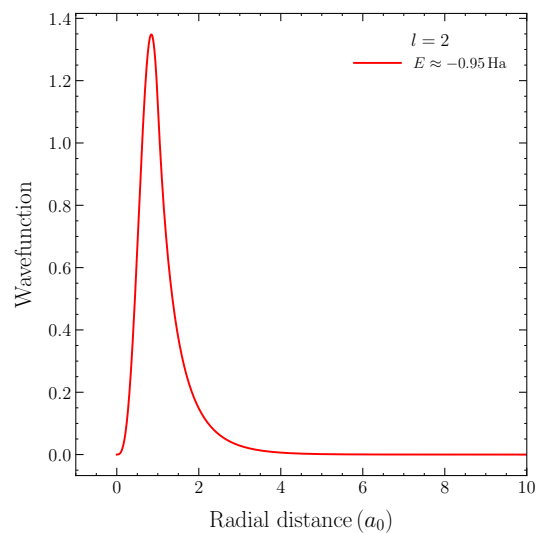
tedy odchylku 8 %, která už v těchto případech může být z části způsobena chybou ve stanovení energie vázaných stavů.

U tohoto bodu se také vrátím k diskuzi ze sekce 7. Z uvedených hodnot účinných průřezů pro limitu nulové energie můžeme vidět, že ačkoliv malá změna síly potenciálové jámy neměla výrazný vliv na polohu rezonance, má tato změna výrazný vliv na účinný průřez při nízkých energiích, což je přímo způsobeno přítomností volně vázaného stavu, který se při drobných změnách síly potenciálové jámy posunuje blíže k nulové energii.

Z grafu 7d můžeme dále vidět, že pro  $l = 3$  je potenciálová jáma se silou  $\alpha = 4.8$  velmi blízko vytvoření vázaného stavu. Tento fakt by mohl být příčinou rezonance, kterou pro třetí parciální vlnu pozorujeme.

(a)  $l = 0$ (b)  $l = 1$ (c)  $l = 2$ (d)  $l = 3$ 

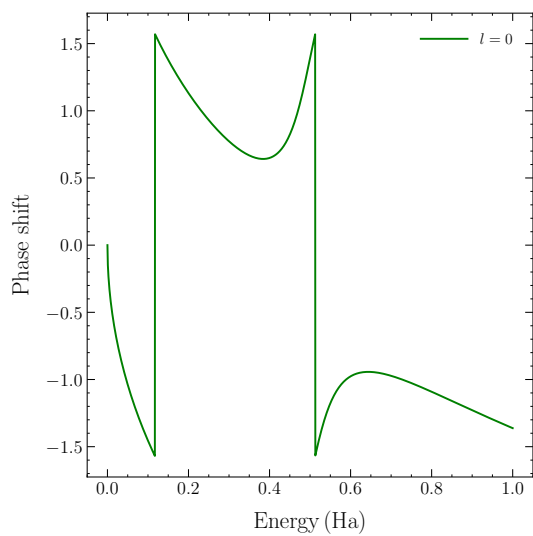
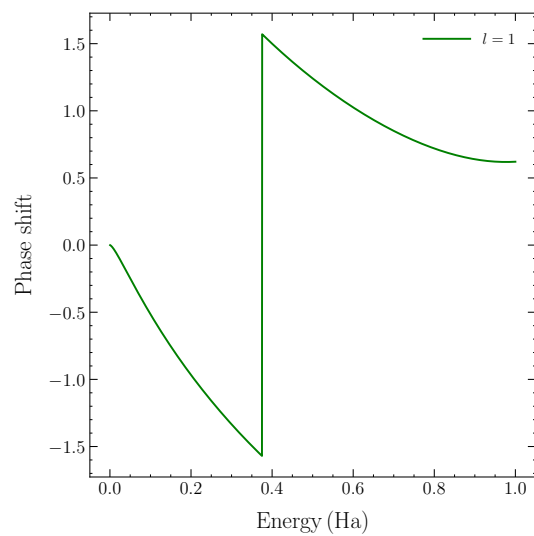
Graf 7: Matching-funkce pro jednotlivé parciální vlny

(a)  $l = 0$ (b)  $l = 0$ (c)  $l = 1$ (d)  $l = 2$ Graf 8: Vlnové funkce vázaných stavů pro potenciálovou jámu se silou  $\alpha = 4.8$

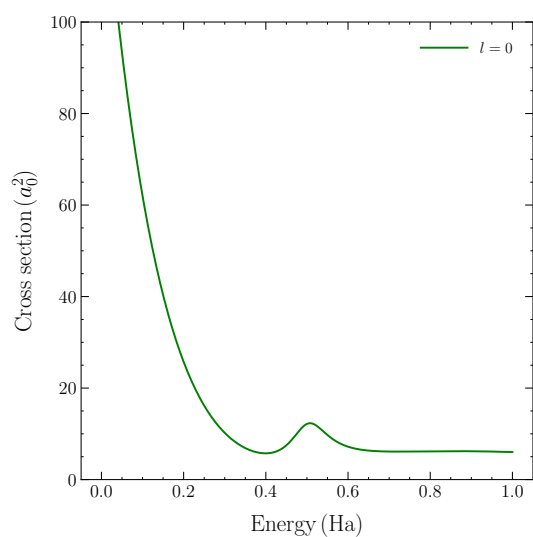
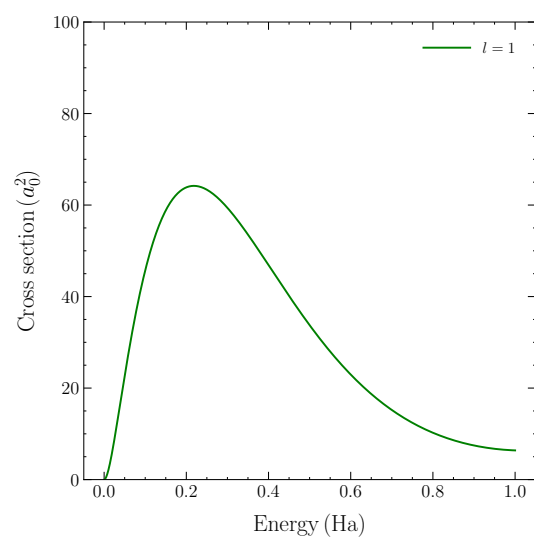
## 2 Exponenciální potenciál

Data fázových posunutí a účinných průřezů vidíme na grafech 9 a 10. U exponenciálního potenciálu již pozorujeme rezonance pro  $s$ -vlnu, konkrétně náznak rezonance pro energii  $E \approx 0.5$  Ha, viz graf 10a. Zároveň z grafu  $s$ -vlny 9a vidíme rychlou změnu fázového posunutí v okolí  $E \approx 0.1$  Ha, zde by se také mohlo jednat o rezonanci v blízkosti nulové energie? Nepozorujeme Ramsauerův-Townsendův efekt.

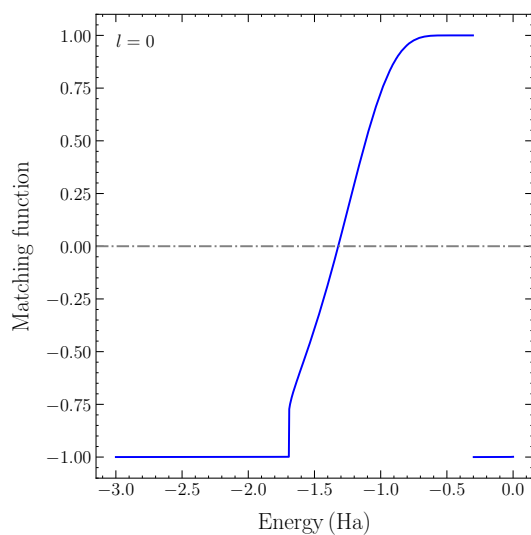
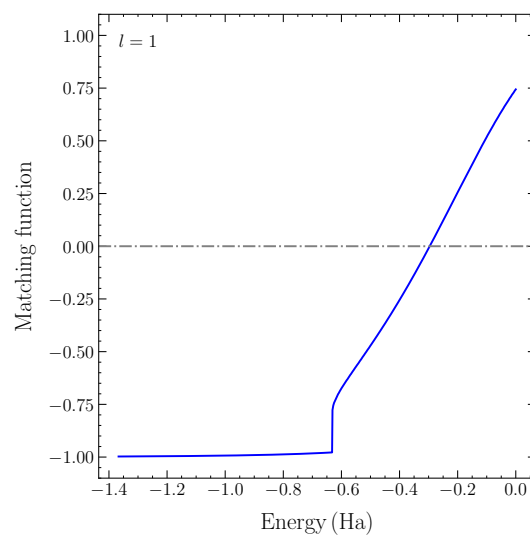
Pro obě parciální vlny jsme podle grafu 11 našli jeden vázaný stav, přičemž ani jeden z těchto vázaných stavů není volně vázaný, což znemožňuje interpretaci rozptylové délky pomocí energie volně vázaného stavu. Vlnové funkce odpovídající těmto vázaným stavům jsou zobrazeny na grafu 12.

(a)  $l = 0$ (b)  $l = 1$ 

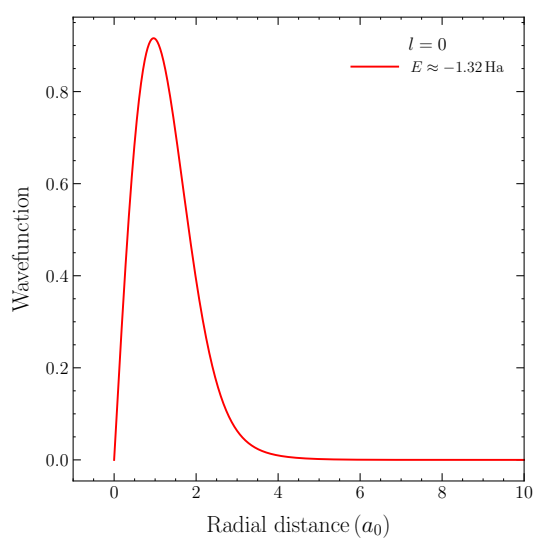
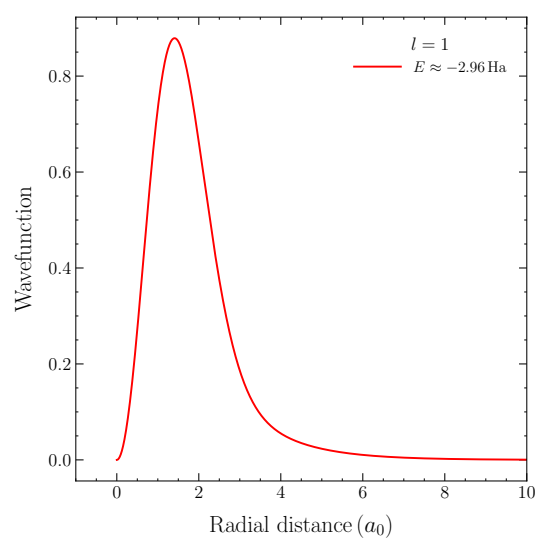
Graf 9: Fázová posunutí pro exponenciální potenciál

(a)  $l = 0$ (b)  $l = 1$ 

Graf 10: Účinné průřezy pro exponenciální potenciál

(a)  $l = 0$ (b)  $l = 1$ 

Graf 11: Matching-funkce pro jednotlivé parciální vlny v exponenciálním potenciálu

(a)  $l = 0$ (b)  $l = 1$ 

Graf 12: Vlnové funkce vázaných stavů v exponenciálním potenciálu