

Oponentský posudek disertační práce ”Subtle Effects in Atoms and Molecules”

Předložená disertační práce Mgr. Daniela Šimsy je věnována teoretickému studiu jemných posunů kvantovaných energetických hladin v atomárních a molekulárních systémech. Disertace má dvě nezávislé části: *i*) radiativní korekce energetických hladin muonického vodíku; *ii*) studium tunelovacího rozštěpení základního vibračního stavu v molekulách. Obě témata *i*), *ii*) představují aktivní oblasti současného výzkumu kterým je dlouhodobě věnována velká pozornost (tématu *i*) v komunitě teoretiků kvantové elektrodynamiky, tématu *ii*) v komunitě chemických fyziků). Práce doktoranda na části *i*) vedla ke dvěma publikacím (*Annals of Physics*, *Physical Review A*), část *ii*) vedla k jedné publikaci (*Physical Review E*).

Rozdělení disertace na dvě vzájemně nesouvisející témata lze chápat jednak jako pozitivum (doktorand prokázal schopnost proniknout do dvou odlišných a velmi náročných oblastí kvantové teorie), jednak jako negativum (práce není jednolitým celkem, ale spíše heterogenním agregátem). U mě osobně převažuje výše zmíněný pozitivní pohled na situaci.

Nyní mi dovoluete se podrobněji vyjádřit k části *i*). Jednalo se zde o poruchový výpočet různých typů radiálních QED korekcí (tzv. ”self-energy” (SE) korekce, ”vacuum polarization” (VP) korekce, a kombinované SE+VP korekce) pro muonický vodík, za použití nové sofistikované metody založené na Laplaceově transformaci, hypergeometrických funkcích, a konceptu tzv. zobecněného Betheho logaritmu. Cílem bylo srovnat vypočtené korekce s výsledky publikovanými v literatuře, které byly ovšem získány za použití méně spolehlivých (a dost možná i kontroverzních) metod. Výpočty Mgr. Šimsy prokázaly dobrou shodu s daty známými v literatuře (odchylka v řádu 1% v případech SE a VP, 8% v případě SE+VP). Domnívám se, že takovéto nezávisle a přesněji provedené výpočty velmi komplikovaných efektů kvantové elektrodynamiky mají značnou badatelskou cenu. Nehledě na to, že doktorand Mgr. Šimsa tímto prokázal svoji schopnost proniknout do neobyčejně obtížných partií teoretické fyziky a převtělít získané znalosti do implementace konkrétních výpočetních algoritmů.

Mám-li vznést nějakou kritickou připomínku týkající se části *i*), zmíním že popis použité metodiky na stránkách 12–26 mi připadá až příliš stručný. Konkrétně, fundamentální a neobyčejně obtížný problém renormalizace je diskutován pouze velmi okrajově. Je trochu škoda, že Mgr. Šimsa nepřispěl do své disertace výrazně delším, čtivějším a pedagogičtějším popisem celé problematiky, tak aby práce mohla sloužit jako hodnotný zdroj informací a inspirace pro budoucí další studenty kteří chtějí proniknout do tohoto oboru.

Pokud jde o část *ii*), jednalo se o teoretické studium tunelovacího rozštěpení ΔE základního stavu nerelativistické částice pohybující se v 2D potenciálu (obsahujícím bariéru). Zmíněný potenciál je adekvátní pro popis přenosu protonu v molekule malonaldehydu. Variační (numericky exaktní) výpočet ΔE je dosti elementární záležitostí. Mám proto trochu dojem, že Mgr. Šimsa věnuje příliš mnoho prostoru explicitnímu popisu tohoto variačního výpočtu, na úkor jiných, zajímavějších partií které by si zasloužily podrobněji rozvést. Teoretické studium ΔE vychází z tzv. Lifshitz-Herringovy formule (právě zde bych uvítal podrobnosti, konkrétně ohledně definice veličiny Ψ pomocí (2.36)). Následuje poruchový výpočet normalizačního faktoru N a WKB výpočet ”pravděpodobnostního proudu” J , tyto dvě veličiny jsou následně zkombinovány do finálního vztahu (2.80) pro ΔE . Domnívám se, že právě uvedený postup představuje zdařilou a velmi originální kombinaci standardní poruchové teorie a WKB metody. Výsledný rozvoj (2.80) pro ΔE obsahuje členy úměrné vyšším a vyšším mocninám Planckovy konstanty \hbar , a neobsahuje žádnou aproximaci (v rámci uvažovaného

modelu).

Mám-li vznést nějaké další kritické připomínky či dotazy týkající se části *ii*), zmínil bych následující: *a*) Nakolik mohu vidět, výpočet faktorů g_j vstupujících do (2.80) je prováděn poměrně komplikovaným numerickým algoritmem. Není tu zřejmé, zda je tento postup výpočetně výhodnější než přímý variační výpočet ΔE . *b*) Není zřejmé, jaké fyzikální náhledy může výsledný rozvoj (2.80) nabídnout. Lze jednotlivé termy (2.80) vhodně interpretovat, např. v termínech semiklasické teorie? *c*) Bylo by velmi vhodné *graficky* srovnat předpověď (2.80) s exaktním variačním výpočtem - tedy *vykreslit* ΔE versus R . Je poněkud překvapivé, že Mgr. Šimsa do své disertace nezahrnul žádné obrázky tohoto typu. *d*) Stálo by za to diskutovat robustnost použité metody – tedy její aplikovatelnost na jiné potenciály, případně ve více dimenzích. *e*) V průběhu obhajoby bych uvítal krátkou diskusi týkající se spojení mezi tunelováním a kvantovým chaosem.

Celá disertační práce je psána solidní angličtinou a má dobrou grafickou úpravu (až na absenci obrázků!). Jediný typografický překlep který jsem zahlédl je "pontential" na str. 23.

Souhrnně vzato, předložená disertační práce Mgr. Šimsy je velmi kvalitní a já ji s radostí doporučuji k obhajobě. Mgr. Šimsa se jeví jako dobrý fyzikální teoretik kterému nechybí solidní znalosti potřebné pro samostatnou vědeckou práci.

Praha, 28. března 2018

Milan Šindelka