

Oponentský posudek na disertační práci Daniela Šimsy „*Subtle Effects in Atoms and Molecules*“

Disertační práce D. Šimsy se zabývá dvěma specifickými tématy atomové a molekulové fyziky, jejichž pojítkem je právě názvem práce zdůrazněná subtilnost studovaných kvantových efektů. Prvním tématem je zpřesnění výpočtu radiačních korekcí (oprav k energiím daným nerelativistickou kvantovou teorií započtením efektů kvantové elektrodynamiky) v mionovém vodíku (tj. vázané soustavě protonu a mionu). Druhým tématem je jemné rozštěpení základního stavu určitého typu organických molekul vlivem oscilací mezi dvěma konfiguracemi, které lze vysvětlit jako tunelování elektronu mezi dvěma potenciálovými jámami.

Disertace je založena na třech relativně rozsáhlých publikacích v respektovaných mezinárodních časopisech se solidním impaktním faktorem. První („*Vacuum polarization in Coulomb field revisited*“) vyšla v časopise *Annals of Physics* na počátku roku 2017 a autor disertace je druhým z jejích dvou autorů. Druhá („*Nonrelativistic QED expansion for the electron self-energy*“) vyšla v časopise *Physical Review A* taktéž na počátku roku 2017, autor disertace je zde druhým ze tří spoluautorů. Konečně třetí publikace („*Quantum effects and quantum chaos in multidimensional tunneling*“) vyšla v časopise *Physical Review E* na konci roku 2017 a autor disertace je druhým ze dvou autorů. Mám za to, že již jen úspěšné absolvování náročných recenzních řízení v těchto časopisech vypovídá o míře validity a relevantnosti v disertaci dosažených výsledků.

V první části práce se autor zabývá zpřesněním výpočtů kombinovaného efektu self-energie mionu a vakuové polarizace v coulombickém poli jádra na energetické stavy miovodíku. Tohoto tématu se týkají první dvě autorovy publikace. Prezentovaná analýza je založená na sofistikované aplikaci kvantové elektrodynamiky v podmínkách konečného systému a na obecné úrovni vede ke zlepšení aproximací radiačních korekcí v mioatomech. Jedním z konkrétních výsledků je zpřesnění předpovězené hodnoty Lambova posunu pro stavy $2p$ a $2s$ miovodíku o cca 8 % vzhledem k poslední referenční publikaci. Motivací pro analýzy tohoto typu je rozpor na úrovni cca 5σ v hodnotách protonového nábojového poloměru určeného modelově závislou analýzou dat z elektronového a mionového vodíku. Autorem dosažené výsledky tento rozpor neodstraňují, nicméně bezesporu pomáhají vnést do problému více světla. Ověřují a zpřesňují dříve získané teoretické výpočty, čímž pomáhají zúžit spektrum možných příčin diskrepance nábojových poloměrů.

Druhým tématem je tunelování elektronu mezi dvěma jámami dvourozměrného potenciálu simulujícího vazbu vodíku ke dvěma kyslíkovým atomům v některých organických molekulách, např. v malonaldehydu. Tomuto tématu se věnuje třetí z autorových publikací. Cílem analýzy v tomto případě je odvodit semiklasickými technikami co nejpřesnější výraz pro rozštěpení energie téměř degenerovaného základního stavu elektronu v modelovém dvoujámovém potenciálu. Stejně jako v předchozím tématu jsou i v tomto případě výpočty prováděny na nejvyšší úrovni současného „*state of art.*“ Výsledkem analýzy je semiklasická formulka pro rozštěpení hladin závislá na parametrech potenciálu, která je prezentována s důrazem na zjištěnou exponenciální závislost štěpení na lineárním parametru potenciálu

v blízkosti jisté kritické hodnoty. V diskusi tohoto poněkud překvapivého zjištění jsou jako možné vysvětlení zmíněny efekty kvantového chaosu.

Autor práce a jeho školitel jsou stoupenci tzv. „drsné školy,“ což se projevuje absencí jakýchkoliv obrázků v publikovaných člancích (na rozdíl od četných tabulek). Tím více oceňuji snahu autora v disertaci vysvětlit studovanou problematiku na názornější úrovni. Části disertace věnované oběma výše popsaným tématům obsahují velmi pěkný nástin motivace a rozsáhlý popis použitých teoretických technik, a to i s použitím několika obrázků! Autor se zjevně nespokojil s existencí publikovaných článků (jak tomu u jiných disertačních prací někdy bývá), ale dal si práci se shrnutím metod a výsledků v kompaktní a přehledné formě. To zajistí pomůžou jeho následníkům a případným dalším zájemcům při pronikání do náročné problematiky.

K první části disertace (radiační korekce v miovodíku) nemám dotazů ani odborných připomínek. Pokud jde o druhou část, věnovanou tunelování v dvoujámovém potenciálu, myslím, že autorova interpretace exponenciální citlivosti energetického štěpení v blízkosti kritické hodnoty parametru pomocí kvantového chaosu není zcela na místě. Zaprvé, analýza chaosu není v práci prováděna. Je sice zřejmé, že systém není integrabilní, v dané energetické a parametrové oblasti však nemusí být chaotický. Zadruhé, citlivá závislosti základního a jemu blízkých stavů na lineárních parametrech hamiltoniánu (měřená např. pomocí kvantové fidelity) bývá často projevem kvantové kritičnosti, tj. náhlé změny charakteru základního stavu při určité hodnotě řídicího parametru systému. Tento efekt v popsaném potenciálu zjevně nastává – z dvoujámového potenciálu se v kritickém bodě parametru $\bar{\gamma}$ stává potenciál s nekonečně degenerovaným dnem. Lze tedy předpokládat, že divergující část výrazu pro energetické štěpení souvisí spíše s touto kvalitativní změnou systému. Neanalytické závislosti různých pozorovatelných veličin na lineárním parametru hamiltoniánu v blízkosti kritického bodu lze chápat jako projev hromadění nehermitovských degenerací (tzv. *exceptional points*) hamiltoniánu s komplexně rozšířeným parametrem v blízkosti reálné osy. Tento jev, který se v kritických systémech určitým způsobem škáluje s velikostí systému (zde inverzní Planckovou konstantou), může být ve studovaném případě abnormálně silný v důsledku nekonečné degenerace kritického potenciálu. To by mohlo být příčinou pozorovaného exponenciálního chování.

Přes tento dílčí nesouhlas (týkající se navíc jen interpretační roviny druhé části práce) pokládám předkládanou disertační práci za velmi zdařilou. Autor udělal obrovské množství netriviální práce, své výsledky spolu se spoluautory publikoval v relevantních časopisech a připravil velmi detailní a přehledný disertační spis. Práce jednoznačně posouvá poznání ve studovaných oblastech a prokazuje předpoklady autora k samostatné vědecké práci. Doporučuji, aby mu po úspěšné obhajobě byl udělen titul PhD.

V Praze, 4. 4. 2018

Prof. Pavel Cejnar, DSc.
Ústav částicové a jaderné fyziky MFF UK
V Holešovičkách 2, Praha 8