

Praha, 1. prosince 2021

Oponentský posudek habilitační práce **RNDr. Přemysla Kolorenče, Ph.D.**

na téma

Electronic relaxation of low-energy metastable states of atomic and molecular systems

Habilitační práce Dr. Přemysla Kolorenče se zabývá teoretickými metodami pro studium inter-atomového Coulombického rozpadu molekul či klastrů v metastabilních stavech získaných ionizací nízko ležících valenčních elektronů. Předložená práce je motivována výrazným pokrokem v experimentálních technikách pro studium těchto procesů, k němuž došlo v posledních dvou desetiletích. Autor úspěšně vyvinul a aplikoval teoretické metody dovolující kvalitativně objasnit mechanismy těchto procesů a provést kvantitativní porovnání s experimentálními daty.

Práce se skládá ze tří kapitol věnujících se různým aspektům neradiativního rozpadu a je k ní přiloženo 15 článků publikovaných v letech 2008-2020 v recenzovaných časopisech, přičemž u dvou z nich je P. Kolorenč první autor a u tří je korespondenčním autorem; vesměs jde o články publikované ve kvalitních a špičkových časopisech v oboru.

První kapitola představuje úvod do problematiky práce v časově závislém i časově nezávislém formalismu, zavádí metodu lokálního komplexního potenciálu, studuje interakci energeticky blízkých metastabilních stavů a zavádí popis pohybu jader na časových škálách srovnatelných s procesem rozpadu pomocí molekulové dynamiky. Tématem druhé kapitoly jsou ab initio metody pro výpočet rozpadové šířky, zejména Fanova metoda algebraické diagramatické konstrukce (ADC). Ve třetí kapitole se pak autor zabývá aplikací uvedených teoretických metod na studium rozpadu ve slabě vázaných klastrech atomů vzácných plynů za účelem objasnění mechanismu relevantních elektronických procesů, jakož i role dynamiky jader.

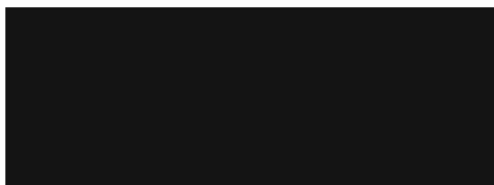
Po formální stránce nemám k práci žádné připomínky, práce je psána výbornou angličtinou, je přehledně organizovaná a přiměřeně srozumitelná i pro čtenáře mimo specializaci autora. Turnitin analýza jednoznačně potvrzuje, že se jedná o originální práci autora, neboť nalezená minimální shoda je hlavně v použité literatuře, která se přirozeně shoduje u více prací.

Při čtení práce mne napadlo několik otázek, které bych rád během obhajoby položil:

- Metoda ADC vychází z předpokladu poruchové teorie, že HF vlnová funkce je kvalitativně správnou aproximací přesné vlnové funkce. Nicméně, v zásadě je asi možné, že ionizovaný stav molekuly s odtrženým valenčním elektronem bude energeticky degenerovaný nebo kvazidegenerovaný a silně korelovaný s více dominantními determinanty. Setkal se autor s podobnými případy, kdy by zřejmě ADC nedalo dobré výsledky?
- Pokud jsem dobře pochopil, autor používá v práci kvantovou dynamiku jader jako vlnových balíků. Pro některé systémy skládající se z relativně těžších atomů (např. klastr Ne) by možná bylo adekvátní (a výpočetně jednodušší, zejména u více než triatomických klastrů) pro popis jader použít klasickou mechaniku. Zkoušel to autor nebo jiní pracovníci v oboru, s jakým výsledkem?

Scientometrický přehled odborných výsledků Dr. Kolorenče na Web of Science udává v době psaní posudku 50 prací, 471 citací (431 bez autocitací) a h-index 16, což považuji za zcela adekvátní výsledky pro habilitační řízení. Nicméně, vzhledem k tomu, že všechny publikace jsou spoluautorské (se seniorními pracovníky v oboru), bylo by vhodné během obhajoby přesněji specifikovat podíl kandidáta na výsledcích předkládaných publikací.

Závěrem bych chtěl konstatovat, že tato habilitační práce prezentuje výzkum na mezinárodně uznávané úrovni a dokládá tak, že kandidát se etabloval jako renomovaný vědecký pracovník a prokázal schopnost vést výzkum v této oblasti. Doporučuji tedy předloženou práci k obhajobě a po jejím úspěšném absolvování navrhuji udělení titulu Docent panu Dr. Kolorenčovi.



Doc. Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat., DSc.
Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.
Dolejškova 3, CZ-18223 Praha