

Posudek dizertační práce

Milan Šimánek: Přesné výpočty energií elektronových hladin atomů

Reálná možnost měření frekvencí atomových a molekulových útvarů na 15 desetinných míst v širokém spektrálním oboru se jeví jako velice slibný základ velmi levných alternativ ekonomicky enormně náročných částicových urychlovačů a to jak pro testování platnosti základních fyzikálních teorií a premis na nichž jsou tyto teorie založeny, tak i pro zpřesňování základních konstant fyziky. Avšak, úplné fyzikální porozumění naměřeným frekvencím vyžaduje jejich úplnou teoretickou racionalizaci a ta se tak může snadno stát limitujícím faktorem pro využití jejich informačního potenciálu. Jako zcela zásadní se v daném případě jeví otázky spojené s numerickou stabilitou použitelných numerických postupů. Bohužel, kromě celé řady technických omezení, stávající postupy čelí i řadě aplikačních omezení majících mnohem hlubší charakter. Např., problémy generované Coulombickými singularitami a numerickými nestabilitami jdoucím na vrub oscilačnímu charakteru funkcí vytvářejících báze pro variační postupy. Překonání problému numerických nestabilit je zřejmě kategoricky nutnou podmínkou pro získání nové fyzikální informace a je tak zásadním fyzikálním problémem. Jinými slovy, zadání předložené dizertace je vysoce aktuální a žádoucí.

Centrálním cílem dizertace je nalezení obecné strategie pro překonání numerických nestabilit, jež jsou generovány radiální částí funkcí používaných pro řešení Schrödingerovy rovnice. Zvolenou cestou je přeformulování obvyklého matematického postupu do tvaru, který dovoluje traktování radiální části problému nenumerickým způsobem, který je podobný bezproblémovému traktování angulární části celkového problému. Vlastní postup, spočívající zejména v linearizaci součinnu radiálních funkcí a nalezení numericky stabilních rekurentních relací pro počítané integrály, je vysoce originální a rovněž tak obecný. Jeho aplikace dovoluje nejenom žádoucí algebraické traktování radiálního problému, ale i počítačově vynikající možnost paralelizace výpočtu potřebných integrálů. Ač netriviální, budování metodiky zvoleného postupu je provedeno velice elegantně a nebylo by pro mne překvapivé, kdyby našlo rychlé uplatnění i v jiných fyzikálních souvislostech. S vysokou pravděpodobností lze také očekávat velmi rychlé využití metodiky vyvinuté pro numericky stabilní výpočet hypergeometrických funkcí, který je klíčově důležitý pro stabilitu navrženého postupu.

Úspěch vypracovaného postupu je doložen aktuálním výpočtem energetických hladin atomu

helium. Vhodnost tohoto atomu jako obecného modelu je dána zejména faktem, že maticové elementy potřebné pro studium mnoho-elektronových atomových útvarů jsou pouze jedno či dvouelektronové maticové elementy. Úspěch postupu v případě atomu helia tak principiálně zaručuje jeho úspěch i v případě komplexních atomových útvarů. Jinými slovy, cíle dizertace považují za splněné a vytvořenou metodiku za vynikající fyzikální nástroj. Vlastní prezentace formou matematicky strohého úvodu pro tři rozsáhlé publikace ve vysoce prestižních časopisech je dostačující i po formální stránce.

Jako recenzent považuju za vhodné nejenom posoudit vědecký přínos dizertace, ale i její posouzení v širším pohledu čtenáře. V tomto ohledu shledávám dizertaci daleko méně vynikající než je tomu v případě hlediska vědeckého. Domnívám se, že by ji prospěl kritický rozbor potenciálu, který nepochybně vytváří, a to jak pro testování základů fyziky tak i pro silně aplikační kvantovou chemii. Rovněž se domnívám, že by bylo pedagogicky žádoucí předložený postup konfrontovat s postupy založenými např. na pokrocích v numerickém traktování silně oscilujících funkcí (viz např. IMA J.Num.Anal. **26**,213-227(2006)) či použití hypersférických souřadnicích (viz např. J.Phys.B: At.Mol.Opt.Phys. **32**,429-441(1999)).

"Požadavek" širší diskuze jde nepochybně za meze zadání práce a je ho třeba chápat jako námět pro diskuzi v rámci obhajoby, nikoliv jako kategorický požadavek. Práci považuju za vynikající a ucelené dílo a autorův aktivní podíl na jeho vytvoření jako zcela dostačující podklad pro udělení vědecké hodnosti PhD.

4.2.2008 Praha

Biomolekuly a komplexní molekulární systémy
Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i,
Akademie věd České republiky
Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6

