

Posudek diplomové práce Jindřicha Krčmáře

Theory of electron-phonon interaction in a model of open quantum system

Práce se zabývá modelem molekuly se dvěma elektronovými hladinami silně vázanými na vibrační mód termalizovaný lázní. Výběr detailů modelu je veden cílem získat analytické řešení. V prvním kroku autor ukazuje, že pro termalizaci v přiblížení jednoho relaxačního času lze přesné řešení volně relaxujícího systému z nerovnovázné počáteční podmínky vyjádřit přes řešení bez lázně. Analytické řešení systému bez lázně je odvozeno v limitně velkého rozestupu elektronových hladin, kdy lze zanedbat vliv vysoce excitovaných vibračních stavů dolního elektronového stavu na nízce excitované vibrační stavy horního elektronového stavu. Dále autor uvažuje obecně silnou elektron – fononovou vazbu, omezuje se však na lineární a kvadratické členy, aby vibrace při obou elektronových stavech byly harmonické. Vlastní řešení je pak konstruováno pomocí překryvových elementů dvou harmonických oscilátorů s různými středy i frekvencemi oscilací. Přesné řešení je využito k testu kinetické rovnice odvozené ve druhém řádu bezkonvolučního rozvoje metodou projekčních superoperátorů.

Je zřejmé, že srovnání přesného řešení s přibližným vyžaduje značné množství formálních teoretických prostředků. Právě přehlcenost práce teoretickým aparátem je její největší slabina. Autor zavádí několik bází a reprezentací pro popis vibronických stavů zahrnujících vibrační i elektronové stupně volnosti. Některé z nich využívá pouze v průběhu odvození postupných kroků, takže by bylo možné je odsunout do doplňků nebo zavádět motivovaně v místě využití. Autor se rozhodl zavést všechny báze a reprezentace v přípravné kapitole, což bez patřičných motivací klade velké nároky na čtenářovu trpělivost. Ještě zrádnější je odvození dvojné projekce dělící nejprve systém na lázeň a molekulu a poté molekulu na elektronové a vibrační stupně volnosti. S touto částí teorie se však autor vypořádal poměrně čtivým způsobem.

Autor sepsal diplomovou práci v angličtině. Je zřejmé, že si při volbě jazyka neuvědomil úskalí, která přináší formulace dlouhého textu. Pro čtenáře je nepříjemné, když se stále opakuje stejná gramatická vazba.

Předkládaná práce prohlubuje pohled na dvouhladinové systémy se silnou elektron – fononovou interakcí a dává i určitý vhled do slabin kinetických rovnic. Splňuje nároky kladené na diplomovou práci a doporučuji ji k obhájení.

V Praze, 3. 5. 2011

doc. Pavel Lipavský, CSc.

Otázka: Proč analytická polarizace na obrázku 6.8. není zatlumená?