

Posudek dizertační práce Mgr. Jakuba Bendy *Astrophysically important processes in collisions of electrons with hydrogen atoms*

Předložená práce si klade ambiciózní cíl, výpočet amplitudy rozptylu a souvisejících veličin pro rozptyl elektronu na atomu vodíku pro nízko-energetickou (zhruba do 1 keV) oblast energií nalétávajících elektronů pro všechny možné koncové a počáteční stavy atomu vodíku. Tento proces má celou řadu použití, zmíněných autorem v úvodu dizertace, zejména ve fyzice plazmatu. Jedná se o kvantově-mechanický problém tří částic, problém, který je klasický, nicméně stále aktuální a ne zcela vyřešený. Obtížnost problému je dána tím, že elektron-elektronová interakce je v této oblasti energií příliš silná na to, aby byla vzata v úvahu poruchově.

Pro výpočet amplitudy rozptylu zvolil autor metodu exterior complex scaling. Už samo naprogramování této metody je vysoce netriviální záležitost vyžadující značnou programátorskou zručnost, znalost a ovládnutí numerických postupů. Podle mého soudu je ale největší přínos práce autorova vlastní, vysoce efektivní metoda řešení příslušné Schrodingerovy rovnice s příslušnými okrajovými podmínkami, popsána v oddílu 4.3.5.

Práce je napsána přehledně, na vysoké formální a obsahové úrovni, podle mého soudu dobrou angličtinou. Je možno v ní dohledat překlipy a drobné nedostatky, vzhledem k rozsahu práce je však jejich počet zcela přiměřený. V práci se podařilo zreprodukovat jak řadu výsledků získaných v literatuře, tak získat řadu výsledků zcela nových a autor bezpochyby posunul hranice poznání v této oblasti. Celkově se domnívám, že práce spíše přesahuje nároky kladené na dizertační práci a doporučuji, aby autorovi byl přiznán titul PhD.

K autorovi mám několik otázek, rád bych, aby se k nim v rámci obhajoby vyjádřil, nicméně jsou většinou míněny spíše jako podněty k zamyšlení a neočekávám na ně vyčerpávající odpověď.

- 1) V čem je výhoda metody exterior complex scaling oproti convergent close coupling, případně jiným metodám? Je nějaká stránka výpočtů pro které je volba metody klíčová?
- 2) G. Wannier se v článku ve Phys. Rev. **90**, 817 zabýval závislostí celkového účinného průřezu na celkové energii. Z předpokladu, že těsně nad ionizačním prahem je dominantní konfigurace taková, že elektrony odlétávají opačným směrem a jejich vzdálenost od jádra je stejná, pak za pomoci poloklasických argumentů ukázal, že pro E jdoucí k nule jde σ jako $E^{\{1.127\}}$. Co říká nová numerická metoda o tomto starém analytickém odhadu? Je Wannierův výsledek správný? Jsou jeho předpoklady správné?
- 3) Pokud je v počátečním nebo koncovém stavu vodík excitovaný, v důsledku náhodné degenerace bude mít obecně nenulový dipólový moment. Přináší to potíže a jestliže ano, jak jste se s nimi vypořádali?
- 4) Pro pružný rozptyl na základním stavu při velmi nízkých energiích bych očekával problém, že příspěvky mezistavů v kontinuu klesají příliš pomalu. To může mít vliv na konvergenci numerické metody. Je tomu tak?
- 5) Všechny použité přiblížení jsou zcela správné pro zvolený obor energií a požadovanou přesnost s jedinou výjimkou a to je zanedbání spontánní emise. Doba života $2p$ stavu je kolem nanosekundy a připadá mně nerealistické nevzít tuto skutečnost vůbec v úvahu. Navíc je možné, že po spontánní emisi je atom vodíku opět excitován nalétávajícím elektronem, atd. Rozumím tomu, že tato otázka jde za výtčený rámec práce, nicméně s ním úzce souvisí. Máte nějaké vědomosti o výzkumu v tomto směru?