

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Mikuláš Matoušek
Název práce: Srážky elektronů s dvouatomovými molekulami
Studijní program a obor: Obecná fyzika
Rok odevzdání: 2018

Jméno a tituly oponenta: doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D.
Pracoviště: UTF MFF UK
Kontaktní e-mail: Martin.Cizek@mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Původním cílem bakalářské práce bylo provést výpočty rozptylu elektronu na dvouatomové molekule pomocí Londýnské sady programů využívající metodu R-matice. Pokud má být tento výpočet proveden kvalifikovaně vyžaduje značné pochopení jak kvantové chemie, tak mnohokanálové teorie rozptylu. Podle mého názoru šlo o velmi ambiciózní cíl pro bakalářskou práci a plně naplnit by jej dokázalo jen malé procento nejtalentovanějších studentů. Mikuláš Matoušek se zhostil dle mého názoru velmi dobře přípravné fáze pro takový výpočet a to charakterizace dvou studovaných molekul BeH a OH a jejich aniontů pomocí metod kvantové chemie. Přitom diskutoval několik metod a snažil se najít co nejmenší kvantově chemický model, dobře vystihující vlastnosti vybraných molekul, a při tom použitelný pro následovné výpočty elektronového rozptylu. Do těchto výpočtů se již nestihl pustit.

Práce není rozsáhlá, ale dle mého názoru je pečlivě napsaná. Mám několik drobných výtek a trochu jsem váhal mezi návrhem hodnocení stupněm výborně či velmi dobře, ale nakonec jsem se po srovnání se staršími pracemi, které jsem oponoval, přiklonil spíše ke stupni „výborně“.

Podrobnější připomínky a dotazy

- 1) V kapitole, kde posluchač vysvětluje teorii, postrádám jakékoli odkazy na literaturu. Bylo by vhodné, aby posluchač objasnil, z jakých zdrojů čerpal a zda je cituje v seznamu použité literatury.
- 2) V obrázcích potenciálů by bylo vhodné rozlišit různé symetrie, aby se čtenář lépe orientoval. Na obhajobě by mohl ukázat takto rozlišenou verzi některého z obrázků.
- 3) Abstrakt začíná příliš konkrétně. Myslím, že by měl být určen i čtenářům, kteří neví co je R-matice a mluvit v obecnějších termínech.
- 4) Našel jsem pár dalších drobných překlepů a formulačních nepřesností, jejichž seznam mohu na požádání ukázat (jde o jednotky případů, např. v rovnici 1.2 chybí v sumě podmínka $I > J$, v rovnici 1.3 by bylo potřeba jedno x_2 nahradit x_1 , asi ve dvou větách bylo použito množné číslo místo jednotného atd.).

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

Uhy 8. 8. 2018