

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího       posudek oponenta  
 bakalářské práce       diplomové práce

Autor: Mikuláš Matoušek

Název práce: Srážky elektronů s dvouatomovými molekulami

Studijní program a obor: fyzika, obecná fyzika

Rok odevzdání: 2018

Jméno a tituly vedoucího: RNDr. Karel Houfek, Ph.D

Pracoviště: ÚTF MFF UK

Kontaktní e-mail: Karel.Houfek@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:**

Uchazeč nastudoval základy metod používaných v kvantové chemii a aplikoval je na výpočty potenciálových křivek molekul BeH, OH a jejich aniontů. Provedené výpočty jsou prvním krokem při popisu srážek elektronů s těmito molekulami. Obdržené výsledky budou použity v následných R-maticových výpočtech rozptylu elektronů na pevných jádrech a také pro jadernou dynamiku při těchto procesech.

Práce je napsána přehledně a jazyková i grafická úroveň je velmi dobrá, i když by bylo např. vhodné označit v obrázcích jednotlivé potenciálové křivky příslušným molekulovým termem apod. Také některé testovací potenciálové křivky obsahují drobné nespojitosti, které by pravděpodobně bylo možné odstranit vhodným nastavením kvantově chemických výpočtů, avšak hlavní výsledky, které se budou používat v následných rozptylových výpočtech, jsou v pořádku.

Původním cílem práce bylo i využití získaných výsledků k následným R-maticovým rozptylovým výpočtům, avšak tyto výpočty se ukázali být pro studované molekuly velice časově náročné a vyžadují pokročilé zkušenosti s používáním R-maticových kódů, takže se k nim již uchazeč z časových důvodů nedostal. I tak považuji rozsah výsledků v práci uvedených za dostačující a navrhuji ji uznat jako bakalářskou práci.

### **Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

#### **Práci**

- doporučuji  
 nedoporučuji  
uznat jako bakalářskou.

#### **Navrhuji hodnocení stupněm:**

- výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího: