

Oponentský posudek habilitační práce RNDr. Karla Houfka, Ph.D.

Těžištěm předložené habilitační práce je soubor 15 příložených publikací. Tematem prvních 12 z nich je vibrační excitace a disociace molekul nárazem elektronu (DEA, dissociative electron detachment). Práce 13-15 se týkají čemu se v angličtině říká associative electron detachment (AED), což v české terminologii znamená tvorbu molekuly srážkou iontu s neutrální molekulou a následným uvolněním elektronu. Cítím se kompetentní vyjádřit se pouze k prvním 12 publikacím. Domnívám se však, že to není na újmu relevance mého posudku, protože na process AED se dá nahlížet jako na obrácený proces DEA. Podstata teoretického modelu je pro oba procesy stejná, a tak aplikant využil své expertízy, získanou při vývoji teorie pro DEA, i pro určení reakčních rychlostí pro proces AED. Deset z prvních dvanácti prací bylo publikováno v časopise Physical Review A, což je to pravé místo, protože právě zde jsou publikovány nejzávažnější články v oboru. Řada článků je výsledkem spolupráce s předními odborníky z renomovaných zahraničních pracovišť. Z nezávislých zdrojů vím, že i v těchto případech byl aplikantův přínos podstatný. To vše dokazuje vysokou odbornou úroveň habilitační práce i velký rozsah získaných výsledků.

Potřebné je se zmínit o závažnosti zvolené tematiky. Správně o ní uchazeč píše v úvodu své habilitační práce, že je důležitá z teoretického pohledu, protože výsledkům experimentálního zkoumání elektronového rozptylu nelze rozumět bez pomoci teorie. Dále uchazeč zmiňuje jak tato pomoc teorie je žádoucí při výzkumu atmosféry hvězd, mezihvězdných oblaků, či v modelování nízkoenergetické plasmy. Jako pravý teoretický fyzik je však mimovolně povznesen zmínit důležitější aplikace jako je průmyslová výroba nanostruktur různého typu pro nejrozmanitější použití. Závažnost zvolené tematiky považuji za vyšší než jak je to uvedeno v úvodu habilitační práce. Sympatické však je, že práce 13-15 byly vypracovány ve spolupráci s experimentální skupinou z téže fakulty. Chválím také plány pro další výzkum, který se má týkat rozšíření modelu vypracovaného pro diatomika na větší molekuly. Osobně si nemyslím, že takto vyvinutý rigorózní model bude pro svou výpočtovou náročnost použitelný pro praktické aplikace na polyatomové molekuly v dohledné době. Jeho význam vidím spíše v tom, že bude sloužit jako standard pro testování aproximativních a výpočtově méně náročných metod u diatomik a vybraných malých molekul.

Z práce [6] jsem se dozvěděl, že potenciální křivky byly nejdříve počítány metodou coupled clusters (česky spřažených klastrů v nepoužívané české nomenklatuře) a později metodou multireferenční konfigurační interakce. Zajímalo by mě, co je pro přesnost výpočtu srážkových průřezů důležitější - jestli přesnost potenciálových křivek anebo nutnost použití rigorózního nelokálního modelu.

Mám několik poznámek a otázek k úvodní kapitole 1, přesněji k její části 1.1. Aplikant v této části napsal, že podrobný popis modelu je obsažen v příložené publikaci [1], a že se proto omezí jen na jeho základní popis. Myslím, že mohl být napsán přístupnějším způsobem pro komfortnější čtení oponenta a případných dalších zainteresovaných čtenářů. Pomohlo by přidání pár vět o interačním potenciálu v rovnici (1.7). Těžce se pokračuje ve čtení po rovnici (1.10), kde se píše, že základním předpokladem nelokální teorie je možnost popsat molekulový ion pomocí vlnové funkce φ_d . Pomohlo by hned zde vysvětlit pomocí obrázku 1.4, proč je třeba přepnout potenciál V_{res} na V_d pro kratší meziatomové vzdálenosti. A dále, že vlastně nepotřebujeme znát explicitní tvar funkce φ_d , protože stačí znát její maticové element V_{dk+} , které navíc se aproximují pomocí Γ . Chybí mi vysvětlení, jak se Γ získá a s jakou přesností. Podrobnější popis by prospěl i ke komfortnějšímu čtení původní práce [1].

Celkově mohu říci, že všech 15 prací uchazeče patří k tomu nejlepšímu, co bylo publikované v oboru v posledních letech a proto ji doporučuji k dalšímu habilitačnímu řízení. Lze si jen přát, aby i na jiných vysokých školách byly předkládány habilitační práce podobně vysoké odborné úrovně.

9. srpna 2018

Prof. RNDr. Petr Čársky, DrSc.