

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího       posudek oponenta  
 bakalářské práce       diplomové práce

Autor/ka: **Bc. Kamila Moriová**  
Název práce: Investigation of photodissociation dynamics implementing the velocity map imaging technique  
Studijní program a obor: Fyzika - Optika a optoelektronika  
Rok odevzdání: 2021

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: **RNDr. Václav Profant, Ph.D.**  
Pracoviště: Fyzikální ústav UK, MFF UK  
Kontaktní e-mail: profant@karlov.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:**

Předkládaná diplomová práce Bc. Kamily Moriové se zabývá zkoumáním vlivu změny délky řetězce a polohy chloru na fotodisociační dynamiku vazby C-Cl chloroalkanů pomocí metody rychlostního mapování fragmentů (Velocity map imaging, VMI). Autorka se zaměřila na studium tří různých chloroalkanů (1-chloropropan, 2-chloropropan a 1-chloropentan) a své výsledky srovnávala s již dříve studovaným chlormetanem. Práce je koncipována jako základní experimentální výzkum a obsahuje řadu experimentů laserové fotochemie, které jsou v rámci ČR naprosto ojedinělé. Vyhodnocením těchto experimentů získala autorka cenné výsledky popisující o povaze pozorovaných elektronových přechodů a mezi-systémových křížení. Podařilo se zjistit, s narůstající délkou a větvením alkylového řetězce dochází k nárůstu pravděpodobnosti přímé absorpce do tripletního stavu a že alkylové skupiny jsou schopny absorbovat 40 až 60 procent energie dostupné při fotodisociaci do vibračních a rotačních excitací.

Práce je zpracována jako tematicky ucelený text, má kratší ale pro diplomovou práci dostatečný rozsah (67 stran i se všemi přílohami, z toho výsledková část tvoří 17 stránek) a je logicky strukturovaná. Celkový dojem práce je velmi dobrý. Oceňuji použití angličtiny, která je na velmi dobré úrovni a zpřístupňuje práci i případným zahraničním čtenářům. Práce je psaná srozumitelně a jasně, grafická úroveň odpovídá požadavkům kladeným na práci této úrovně. V textu je možné narazit na menší množství překlepů a interpunkčních chyb (např. „photodissocition“ již na straně 3, aj.), které však nesnižují celkovou jazykovou úroveň práce.

Práce je členěna standardně na pět základních částí a doplněna o seznamy použité literatury, použitých zkratk a přílohy. Oproti pokynům ale chybí seznamy obrázků a tabulek. První část se věnuje teoretickému popisu fotochemie molekul a klastrů se zaměřením na chemické procesy probíhající v atmosféře, které mají za následek ztenčování ozonové vrstvy. Zevrubně také popisuje dynamiku fotodisociace a interakci světla s molekulami. Ve druhé části jsou na devatenácti stranách obsáhle popsány využívané experimentální techniky a jejich vyhodnocení. Zároveň jsou zde popsána i kalibrační měření aparatury AIM a výsledky měření velikosti laserových ohnisek a fotonového toku, která by mohla být i na začátku výsledkové části. Ve třetí části autorka čtenáře seznamuje se studovanými molekulami chloroalkanů a provádí rešerši dosavadního výzkumu těchto molekul. Čtvrtá část pak poměrně stručně (na 17 stranách) představuje získané poznatky a jejich diskusi. Získané výsledky jsou stručně shrnuty v poslední páté části práce – závěru, na který ještě navazuje výhled, kudy by se mohl ubírat navazující výzkum.

Dohromady práce dává velmi dobrý příklad mezioborového výzkumu na pomezí optiky, chemické a vakuové fyziky. Autorka si osvojila jak řadu experimentálních technik, tak i teoretické postupy pro jejich vyhodnocení. Výsledky v práci prezentované se staly součástí publikace vyšlé v letošním červnu v renomovaném impaktovaném časopise PCCP (Physical Chemistry Chemical Physics), přičemž Kamila Moriová zde figuruje mezi autory na čtvrtém místě. Oproti článku však práce neobsahuje téměř žádná data navíc, ač je zřejmé, že experimentů bylo provedeno více. Výsledková část práce sice obsahuje značné množství tabulek (12), ale jen 5 obrázků, přičemž u některých dat je i výslovně zmíněno, že v práci nejsou ukázána (str. 42). Kdyby byla výsledková část bohatší a výsledky o něco podrobněji diskutované, řadila by se tato práce mezi nadprůměrné. I takto se však jedná o kvalitní práci navíc psanou v anglickém jazyce.

Závěrem tedy mohu konstatovat, že předkládaná práce splňuje požadavky kladené na práci této úrovně, a proto ji doporučuji k obhajobě.

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

K práci jako celku nemám zásadní výhrady. Připojuji jen několik komentářů, připomínek a doplňujících otázek.

## Komentáře a připomínky

1. Konec první kapitoly je věnován polarizaci absorpčních přechodů a jsou zde uvedeny parametry koeficientu  $\beta$ , jehož hodnota -1 odpovídá polarizaci příčné a hodnota 2 polarizaci podélné. Ve výsledkové části (na str. 39 a znovu na str. 53) jsou však tyto hodnoty prohozené, což dělá diskuzi úhlového rozdělení fragmentů poněkud nepřehlednou.

2. V tabulce 4.3 není zřejmé, která hodnota pochází z jaké citované publikace.

3. V kapitole 4.4 není zvoleno vhodné řazení výsledků a jejich diskuse. Nejprve je rozebírán případ, kdy uvažujete extrémní hodnoty parametru  $\beta$ , pak je zde vložena část s přepočítanými hodnotami  $\beta$  na základě simulací (Slavíček, Suchan) a na konci je opět srovnání s extrémním případem. Vhodnější by bylo nejprve kompletně rozbrat extrémní modelový případ (Townsend et al. 2004), a pak pojednávat o jeho upřesnění na základě simulovaných hodnot  $\beta$ .

### Doplňující otázky:

1. Na str. 40 je zmíněno, že příčný absorpční přechod do  $^3Q_1$  stavu je zanedbatelný ve srovnání s příčným přechodem do  $^1Q_1$  stavu a podélným přechodem do  $^3Q_0$  stavu, a proto je možné jej dále neuvažovat (s odkazem na Townsend et al. 2004). Mohla byste lépe ozřejmit, proč tomu tak je? Zůstává toto tvrzení v platnosti i pro chloroalkany s delším řetězcem?

2. Teplota rezervoáru chloroalkanů při koexpanzi s heliem uvedená v Tabulce 4.1 se pohybuje od 22 do -24.5 °C. Jaký byl důvod pro takto rozdílnou volbu teploty?

3. Na str. 42 píšete, že větvičí poměry  $[Cl^*]/[Cl]$  pro jednotlivé chloroalkany je možné získat nejen z grafů rozdělení kinetické energie (KED), což je později v práci ukázáno, ale také přímo ze zdrojových dat rychlostního mapování fragmentů. Vyhodnocovali jste tento druhý přístup, a pokud ano, jakou jste dostali shodu?

4. Na str. 45 je prezentováno TOF hmotnostní spektrum 1-chlorpentanu. Byla stejným způsobem změřena i hmotnostní spektra pro ostatní chloroalkany? Pokud ano, jaký jste získali výsledek pro 2-chloropropan, který má dle VMÍ dat tendenci klastrovat?

### Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

### Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze 3. září 2021