

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Václav Kubíček

Název práce: Modelování kvantové dynamiky v anharmonických potenciálech pomocí modelu interagujících harmonických oscilátorů

Studijní program a obor: fyzika, obecná fyzika

Rok odevzdání: 2022

Jméno a tituly oponenta: doc. RNDr. Karel Houfek, Ph.D.

Pracoviště: UTF 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 oponenta:

Václav Kubíček se ve své práci zabýval kvantově-mechanickými modely v jedné dimenzi. Nejprve na modelu s Morseho potenciálem a s potenciálem, který má dvě minima, otestoval numerickou metodu pro nalezení vlastních energií a stavů, která je založena na rozvoji vlnových funkcí do báze složené z vlastních funkcí lineárního harmonického oscilátoru. Metodu implementoval pomocí vlastního programu a studoval konvergenci vzhledem k velikosti báze. Poté tuto metodu použil k řešení systému dvou vázaných harmonických oscilátorů. Na tomto modelu pak studoval platnost adiabatické aproximace v závislosti na parametrech použitých potenciálů a vazby mezi nimi, přičemž ukázal, že pro studovaný model byla adiabatická aproximace přesnější v případech s větší vazbou.

Kromě úvodu a závěru obsahuje práce dvě kapitoly. V první je stručné shrnutí kvantového popisu molekul, používaných základních aproximací a pojmů a poté jsou představeny jednotlivé jednorozměrné modely, které jsou v práci numericky řešeny a studovány. V druhé kapitole jsou pak shrnuty výsledky numerických testů pro jednodušší potenciály a podrobnější diskuze výsledků pro dva vázané harmonické oscilátory.

Pokud jde o odbornou stránku, chtěl bych zde uvést nepřesnosti v terminologii, které ovšem nemají vliv na obdržené výsledky:

- 1) V sekci 1.2.2 není správně obecně formulován pojem diabatické reprezentace. Elektronické funkce v této reprezentaci nejsou vlastními stavy elektronického hamiltoniánu, ovšem tato vlastnost je využita v rovnici (1.17), která má být výchozím bodem pro odvození rovnic (1.18) a (1.19), které popisují systém v diabatické reprezentaci. Naopak podstatné v této reprezentaci je, že elektronické stavy se pomalu mění s jadernou vzdáleností a lze zanedbat jejich derivace v rovnici (1.17). Takže rovnice (1.17) by měla být v tomto smyslu změněna.
- 2) U modelového systému dvou vázaných harmonických oscilátorů se při porovnání diabatické a adiabatické reprezentace nesprávně používá spojení „porovnání dvou použitých aproximací“. Domnívám se, že model je přesně definovaný a i vyřešený v rámci diabatické reprezentace a lze tedy hovořit pouze o adiabatické aproximaci k tomuto modelu.

Pokud jde o numerické řešení studovaných modelů, domnívám se, že v některých případech nebyla volena báze optimálně (viz otázky do diskuze níže). Je sice podrobně zkoumána rychlost konvergence výsledků vzhledem k počtu bázevých funkcí, ale není diskutována možnost volby jiné báze jakožto vlastních stavů modifikovaného (širšího, posunutého) harmonického oscilátoru. Taková optimalizace báze by mohla významně zredukovat počet bázevých funkcí k získání výsledků s danou přesností, což v jednorozměrných modelech není sice příliš podstatné, ale pro vícerozměrné systémy může jít o zcela zásadní redukci výpočetní náročnosti.

Přestože se předložená práce čte poměrně dobře, objevují se v ní drobné jazykové nedostatky, kterým by se dalo vyhnout opětovným pozorným přečtením celé práce, např. chybějící čárky, záměny předložek „s“ a „z“ nebo použití hovorového „tohle“ apod. Také některé formulace jsou zbytečně komplikované na úkor jasnosti a někdy i přesnosti (např. „[vlnová funkce] nese pouze nepřesnost danou šířením strojové přesnosti“ místo „... danou šířením zaokrouhlovacích chyb daných konečnou strojovou přesností“).

Také prezentace výsledků má několik nedostatků, kterým by se dalo předejít pečlivějším projitím celé práce ještě jednou:

- 1) u několika obrázků jsou příliš malé popisky, téměř na hranici čitelnosti,
- 2) u obr. 2.1 podle mě nesouhlasí popisek s tím, které vlnové funkce jsou ve skutečnosti zobrazeny na jednotlivých panelech,
- 3) na obr. 2.4 by bylo vhodnější ukázat harmonický potenciál pro zvolenou bázi místo harmonického přiblížení v okolí minima,
- 4) na obr. 2.10 se objevuje náhlý pokles funkce ΔE_1 pro $V_{12} = 0.2$, ovšem v tabulce 2.6 je tato funkce rostoucí se zvětšujícím se V_{12} , a není tedy jasné, co je správná hodnota; podobné „skoky“ se objevují v závislostech na obr. 2.8, které se ale zdají být konzistentní s daty v tabulce 2.5, přesto se nabízí otázka, zda tyto „skoky“ odpovídají skutečnosti, nebo jde o zobrazení nesprávných dat,
- 5) popis obr. 2.11 v textu a popisky os (v obou je absolutní hodnota) jsou nekonzistentní se zobrazovanými grafy, které ukazují rozdíl vlnových funkcí (kladné i záporné hodnoty).

I přes výše uvedené drobné věcné a jazykové nedostatky považuji předloženou práci za zdařilou, jejíž výsledky mohou usnadnit pochopení vztahu adiabatického a diabatického popisu jaderné dynamiky molekul. Přestože navrhuji hodnocení velmi dobře především kvůli řadě drobných nedostatků, v případě dobré obhajoby a reakcí na otázky bych se přiklonil k lepšímu hodnocení.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- 1) Při řešení problému s Morseho potenciálem byla použita báze harmonického oscilátoru, který aproximuje tento potenciál v minimu. Vzhledem k malé relativní šířce takto získaného harmonického oscilátoru (viz obr. 2.1) vůči Morseho potenciálu není jasné, proč by toto měla být vhodná báze. Nebylo by efektivnější použít např. bázi harmonického oscilátoru, který by měl minimum uprostřed klasicky povolené oblasti nejvyššího vázaného stavu Morseho potenciálu, který nás zajímá? Je nějaký důvod, proč by měla být báze zvolena v minimu potenciálu?
- 2) Bylo by zajímavé podívat se, jak závisí konvergence výsledků na šířce harmonického oscilátoru definujícího bázi. Např. pro modelový potenciál s dvěma minimy byl zvolen harmonický oscilátor aproximující modelový potenciál v minimu a posunutý do počátku souřadnice. Takový harmonický oscilátor je opět poměrně úzký. Nebylo by výhodnější použít bázi danou širším harmonickým potenciálem? A je opravdu výhodné použít jako bázi v případě systému dvou vázaných harmonických oscilátorů přímo vlastní stavy diabatických potenciálů? Nebylo by i v tomto případě lepší použít bázi posunutou směrem do středu a pro širší harmonický oscilátor?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl

Místo, datum a podpis oponenta: V Praze dne 8. 6. 2022