**Oponentský posudek disertační práce Mgr. Jana Dvořáka: Contribution to theory of low-energy electron-molecule collisions**

Předložená disertace se týká aktuální tematiky s cílem vylepšení současného stavu teorie elektronového rozptylu pro vysvětlení mechanismu rozpadu polyatomových molekul nárazem elektronu. Doktorand uvádí v úvodu dva důvody proč je výzkum v této oblasti aktuální. První z nich se týká astrofyziky, konkrétně chemických reakcí v atmosféře nebeských těles, iniciovaných nárazem elektronu do molekul. Samozřejmě výzkum v této oblasti přispívá k obecnému poznání, ale přece jenom jde o poněkud specifický problém. Druhý zmíněný důvod se týká léčby rakoviny. Zde chci jenom připomenout, že pokud jde o léčbu, ozařování paprskem protonů nabo litných iontů je účinnější než ozařovaní paprskem elektronů. Ani experimenty *in vitro* ozařováním vzorku DNA paprskem elektronů, ani počítačové animace trajektorií elektronů ve vodném prostředí nepotvrzují, že proces DEA je tím hlavním reakčním kanálem. V nejmenším nechci snižovat výzkum v těchto dvou oblastech, jenom se domnívám, že je třeba zmínit ještě třetí důvod, a to je přínos teorie elektronového rozptylu pro již prováděné praktické aplikace v nanoelektronice.

Podstatné pro posouzení dizertace je soubor článků publikovaných v renomovanńých časopisech Physical Review A a Physical Review Letters. Lze tedy předpokládat, že tyto články byly oponovány předními specialisty v oboru, Přidávám k tomu jen dva osobní postřehy. Měl jsem možnost a potěšení sledovat vývoj metod na katedře teoretické fyziky postupně od aplikací na modelové potenciály, atomy, na diatomika, nyní na $CO_2$ a i v zatím nepublikované práci o pyrrolu jakožto představiteli opravdového polyatomika.

V Úvodu a v Kapitole 1 je podán přehled dosavadních publikovaných výsledků, na které disertace navazuje. Uvedeny a popsány jsou i nejdůležitější rovnice, což ulehčuje orientaci v publikovaných článcích. Trpělivost doktorandovi zřejmě došla při psaní na konci sekce 1.2 u rovnic (1.11), u které je pouze odkaz oponentovi, aby se o ní poučil v přiložené publikaci [3]. Pro úplnost ještě zmiňuji přehlédnutou chybu na str. 7: $CO_2$ má tří vibrační módy, ne čtyři.

Kapitola 2 je jen krátký odstavec, který odkazuje na publikované články jak v nich se rozšířen model vibrační excitace pro diatomika na $CO_2$. Nejoriginálnější je Kapitola 3, která ukazuje, jak byl vyvinut model pro disociační kanál iniciovaný příjmem elektronu do elektronického systému $CO_2$ (DEA). Jde o pionýrský počin pro přesné výpočty srážkových průřezů DEA. Kapitola 4 pak ukazuje cestu pro aplikace tohoto přístupu pro větší než triatomické molekuly.

**Celkové zhodnocení.**

Pokud je mi známo, přínos doktoranda v publikovaných článcích je dominantní . Dá se z nich usoudit, že jsou výsledkem usilovné práce a nezměrné invence. Cenné na nich je, že pro $CO_2$ poskytly přesné výsledky ve výborné shodě s experimentem. Mohou tak posloužit jako standard pro testovaní zavedení aproximací, nutných k tomu, aby výpočty byly zvládnutelné i pro molekuly větší než $CO_2$. Explicitně to říká věta v práci [3] “The application of the present theoretical treatment to other polyatomic systems is rather straightforward”, i když tak asi ”přímočaré” to nebude. Zřejmě bude třeba ještě hodně práce, jak to naznačuje rozpracovaná studie o pyrrolu, popsaná v kapitole 4. To nic nemění na úsudku oponenta, že jde o vynikající disertaci, která nejspíš bohatě splnňuje kriteria kladená na MFF a zřejmě je i výrazně převyšuje.

**Otázka do diskuse při obhajobě práce:**

Pravý panel (b) v Obr. 3 na straně 28 disertační práce. Doublet $\Pi_u$ resonance, která je v lineární geometrii degenerováná s vertikální energii vůči neutrálu kolem 3.6 eV se při ohybu molekuly štěpí na dvě komponenty, kterých energie jsou zobrazeny zelenou a červenou přerušovanou čárou. Jedná se o Renner-Tellerovský efekt. V okamžiku jak horní (zelená) rezonance překříží neutralní křivku, tak se šířka

rezonance stává nulovou (opticky z obrázku) jak bych očekával pro případ, kdy se anion stává elektronicky vázaným. Toto ale není pravda pro spodní komponentu rozštěpené rezonance, která i pro záporné energie vykazuje nenulovou šířku, jako kdyby měl vázaný stav konečnou dobu života. Mohl by obhajující tento fenomén vysvětlit?

V Praze 4. 11. 2022

Prof. RNDr. Čársky, DrSc