

## Posudek doktorské disertační práce

**Autor práce:** Jan Dvořák

**Název práce:** Contribution to theory of low-energy electron-molecule collisions.

**Autor posudku:** doc. RNDr. Martin Čížek, PhD (školitel)

Předložená doktorská disertační práce rozvíjí téma tradičně studované na Ústavu teoretické fyziky ve skupině založené prof. Jiřím Horáčkem, které sem přinesl ve spolupráci s prof. Wolfgangem Domcke, jenž za svůj příspěvek k rozvoji naší skupiny dostal čestný doktorát University Karlovy. Jde o teoretický popis neelastických srážek elektronů s molekulami, které hrají roli v mnoha procesech důležitých v technologických procesech nebo při formování rozmanitých molekul v různých astrofyzikálních prostředích. V naší skupině jsme vyvinuli numerické nástroje pro velice přesný popis těchto srážek pro diatomické molekuly, ale v podrobnějším popisu polyatomik jsme zatím prováděli jen nesmělé pokusy, které spočívali v restrikci na jeden vibrační stupeň volnosti. Práce Jan Dvořáka vnesla do tématu opravdový průlom a jsem přesvědčen, že její výsledky nám umožní popis mnoha zajímavých jevů ve srážkách elektronů s většími molekulami.

Samotný text práce je rozdělen do tří hlavních částí, které jsou seskupeny kolem kapitoly dvě, jež je tvořena třemi publikacemi v časopise *Physical Review*. Úvodní kapitola vysvětluje základy teorie vibrační dynamiky anionu po srážce elektronu s molekulou založené na projekčním formalismu. Tento úvod je velmi stručný, protože detailní popis dynamiky včetně zahrnutí vibronického kaplingu je součástí článků v kapitole 2, ale přidává ukázky 2D „electron-energy loss“ spekter (EELS) na jednoduchých příkladech dvouatomových molekul a na případu dynamiky dvou svázaných vibračních módů na potenciálových površích propojených přes „conical intersection“. Ačkoli je tato kapitola poměrně stručná, považuji ji za cenný příspěvek, protože neexcituje žádná publikovaná práce systematicky se zabývající popisem 2D EELS.

Jak už jsem poznamenal, těžištěm práce je kapitola dvě, která je prostým přetiskem tří publikací, z nichž první vyšla jako **Physical Review Letter**, druhá vyšla v časopise **Physical Review A** a třetí je v recenzním řízení ve stejném časopise. Ačkoli práce mají větší množství autorů, příspěvek Jana Dvořáka na všech byl naprosto dominantní. Skupina z Heyrovského ústavu fyzikální chemie přispěla k experimentální části a k popisu anharmonických jevů a Karel Houfek nám vypočetl rozptylová data pro sestavení modelu, ale po počátečních diskusích všeobecných principů provedl doktorand veškeré sestavení modelu a výpočty dynamiky sám. Rovněž text teoretické části zmíněných tří publikací je z 90% jeho dílem. Co se týče kvality této práce, dovolím si ocitovat z posudku anonymního recenzenta druhé z nich: *„In my opinion this paper definitely belongs in Physical Review Letters. It reports the results of a tour-de-force of experiment and theory that probes the behavior of coupled metastable states at a level of detail and clarity so far beyond what has been done to treat this problem that it is a qualitative departure from the previous literature. I say that even though that literature is extensive. The key here is that the metastable states (states of the CO<sub>2</sub> anion) are coupled in such a way that the idea of the nuclei moving on potential surfaces with local couplings is simply not applicable. The presence of the virtual state, formally problematic to treat alone, in the coupled set of three metastable states precludes any such simpler treatment. Add the fact that the key result here observes and explains the excitation of vibrational states with 19, 20 or 21 quanta of excitation and one can see that this work breaks the new ground.“*. Jan Dvořák věnoval rovněž velkou pozornost přípravě obrázků ve zmíněných publikacích, které jsou také výlučně jeho prací. O tom, že odvedl dobrou práci, svědčí i to, že oba už vyšlé články byly speciálně vyčleněny, jako „**editors choice**“.

Poslední dvě kapitoly prezentují část práce směřovanou do budoucnosti, k dalšímu zobecnění přístupu pro větší molekuly a pro molekuly s disociujícími stupni volnosti. Doktorand jednak zobecňuje numerický popis, tak aby bylo možno zahrnout disociaci, a dále se pokouší konstruovat modely pro disociaci molekuly pyrolu. Tato snaha je úspěšná ve zobecnění numerických metod a v textu jsou prezentovány výpočty účinných průřezů pro vibrační excitaci a disociační záchyt v rámci dvourozměrného modelu. Poslední část zatím nebyla publikována, protože pokračuje práce na výběru správných stupňů volnosti relevantních pro skutečnou dynamiku molekuly, ale představuje velmi úspěšný počátek dalšího rozšíření přístupu.

Před závěrečným shrnutím svého posudku bych rád ještě komentoval část práce, která se nedostala do finálního textu. Jan Dvořák začal své doktorské studium rozšířením tématu své diplomové práce a zkonstruoval nelokální model pro popis asociativního odtržení elektronu při srážkách  $\text{Li} + \text{H}^-$  a  $\text{Li}^- + \text{H}$ . První část jsme publikovali v časopise **The European Physics Journal D**, kde se obrázek doktoranda dostal na titulní stranu čísla. Druhou část doktorand sepsal do formy publikace, ale stále čeká na moje finální úpravy, protože jsem ji chtěl rozdělit na dvě části, z nich druhá by prezentoval data ve formě použitelné v modelech chemie raného vesmíru. Doktorand sice tyto publikace nezahrnul do disertační práce, protože se chtěl v práci soustředit na jedno téma, ale přesto bych rád tuto práci připomněl, jako součást výsledků jeho doktorského studia. Další část, která se dostala do práce jen okrajově, je rozsáhlá parametrická studie 2D EELS spekter, kterou Jan Dvořák zkompiloval a analyzoval, ale která zůstala stranou ve formě tištěné zprávy, kvůli zajímavým experimentálních výsledkům pro  $\text{CO}_2$ , jejichž vysvětlení jsme vzali jako prioritu. Kromě těchto aktivit Jan Dvořák přispíval jako (neoficiální) konzultant v práci dalších studentů, především v bakalářské a poté diplomové práci Martiny Šarmanové a bude spoluautorem publikace, kterou z této práce připravujeme. S Martinou Šarmanovou rovněž získal **projekt GAUK**, který velmi svědomitě vedl (po předchozí spoluúčasti na projektu GAUK Václava Alta). Doktorand rovněž několikrát prezentoval výsledky své práce na mezinárodních konferencích a **byl pozván přednést přednášku** o své práci o dynamice aniontu  $\text{CO}_2^-$  **na konferenci POSMOL (XXI International Workshop on Low-Energy Positron and Positronium Physics and XXIII International Symposium on Electron-Molecule Collisions and Swarms)** v létě příštího roku v Kanadském Notre Dame.

Na závěr bych rád uvedl, že Jan Dvořák patří bezesporu k nejlepším studentům, s nimiž jsem se během své kariéry setkal. Kombinuje v sobě schopnosti vystihnout podstatné informace ze studijní literatury, efektivně používat a kombinovat různé výpočetní nástroje a v neposlední řadě rovněž přehledně a logicky formulovat výsledky svojí práce ve výstižných obrázcích a v odborném textu. Ke své práci přistupuje pečlivě a zodpovědně, je velmi samostatný a projevuje iniciativu problémy dotáhnout do konce a hledat další možnosti rozvoje. Jednoznačně prokázal schopnost samostatné vědecké práce. Předložená práce dle mého názoru plně splňuje nároky kladené na doktorskou disertační práci.

V Praze 7. listopadu 2022

Doc. RNDr Martin Čížek, PhD