

POSUDEK OPONENTA BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Název: Rezonance pro modelové potenciály v kvantové mechanice

Autor: Petr Rašek

Shrnutí obsahu práce

Práce spočívala ve vytvoření a testování numerického kódu pro výpočet potenciálových rezonancí. Jde o řešení radiální Schrodingerovy rovnice s energií analyticky prodlouženou z fyzikální kladné reálné poloosy na celou komplexní rovinu. Právě kladná reálná osa energie představuje pro mnohé rozptylové funkce řez a rezonance je potřeba hledat za ním pomocí prodloužení na tzv. nefyzikální list Riemannovy plochy energie. Student vytvořil vlastní implementaci metod dříve používaných školitelem a otestoval je pro několik tvarů potenciálu. Postup spočívá v kombinaci metody konečných prvků s polynomiálními prvky vysokého řádu s Gauss-Lobatovou kvadraturou. Analytické prodloužení pak je implementováno vyhnutím oblasti, na níž se integruje Schrodingerova rovnice, do komplexní roviny, čímž se odcházející okrajová podmínka převede na Dirichletovu podmínku dostatečně daleko od počátku. Student pečlivě testuje nastavení parametrů numerického výpočtu, aby se ujistil, že dostává velmi přesné řešení problému. Na závěr práce se věnuje systematickému zkoumání parametrů rezonancí, které lze obdržet ze studovaných modelových potenciálů z hlediska jejich použití pro modelování konkrétních molekulárních systémů. Výsledkem práce je navíc softwarový balík, který je dobře dokumentovaný a k dispozici pro další použití.

Celkové hodnocení práce

Téma práce. Na bakalářskou práci jde o poměrně náročné téma. V úvodních kurzech kvantové mechaniky se studenti s rezonancemi většinou nesetkávají. Napsáním, odladěním programu a jeho použitím na studované modely student plně naplnil zadání práce.

Vlastní příspěvek. Vlastním příspěvkem autora je především vytvoření funkčního numerického programu a jeho dokumentace a důkladné testování. Metody samotné byly vyvinuty dříve jinými autory a v podobné podobě též testovány (v jiné implementaci) školitelem. Rád bych však zdůraznil, že jejich podrobné nastudování studentem bakalářského studia do takových detailů, aby je sám implementoval, považuji za vysoce netriviální.

Matematická úroveň. Jistou slabinou práce je formulace samotného textu práce. Metody jen naznačuje a někdy z textu nejsou zcela jednoznačně jasné principy, z nichž jsou odvozené. Ale jde o rešerši, ne odvození všech metod, které autor použil, nebo s problémem souvisí, takže to nepovažuji za takový problém, protože text je doplněn citacemi na původní zdroje. Nutno dodat, že podrobný popis všech metod by byl příliš rozsáhlý a nad rámec práce. Popis samotné implementace a testování programu už je v pořádku. Celý text trochu působí jako technická zpráva.

Práce se zdroji. Autor na patřičných místech vhodně cituje původní práce a učebnice na daná témata. Samotný text je zřetelně původní prací autora a neobsahuje převzaté pasáže.

Formální úprava. Po formální stránce je práce pečlivě zpracována. Nenašel jsem téměř žádné překlepy. Jedinou formální výtka mám k velikosti popisků obrázků v závěrečné 4 kapitole, které jsou příliš malé, v některých případech až na hranici čitelnosti. V seznamu použité literatury chybí čísla stran pro práce [6] a [7] a v některých položkách by bylo vhodné použít blokování automatického převodu textu na malá písmena (například zkratky 3D nebo JSON).

Připomínky a otázky

1. U rovnice (1.5) uvádíte, že použití této formule pro hledání parametrů rezonance není příliš přesné. Umíte popsat situaci, kdy by se tato formule přesto dala použít?
2. Formulace věty kolem rovnice (2.19) o tvaru vlnové funkce pro rezonanci je trochu zavádějící a působí dojmem, že jde o rovinou vlnu. Mohl byste tuto formulaci upřesnit.

3. V obrázku 2.4 nejsou popsány žádné osy a ani z popisu není zcela jasné co má obrázek vyjadřovat.
4. Ve větě na přechodu mezi str. 34 a 35 se tvrdí že rezonanci pro molekulu CO nelze modelovat potenciálem s konstantním b . Připadá mi, že z citovaného obrázku to není zjevné (nakolik jsem schopen rozlišit, leží všechny body přibližně na jedné čáře). Mohl byste to lépe doložit?

Závěr

Navzdory drobným výtkám výše považuji práci za zdařilou a doporučuji ji uznat jako bakalářskou práci.

Návrh klasifikace oponent sdělí předsedovi zkušební (sub)komise.

doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D.
Ústav teoretické fyziky, MFF UK
14. června 2024