

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- |   |   |
|---|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> posudek vedoucího | <input type="checkbox"/> posudek oponenta |
| <input checked="" type="checkbox"/> bakalářské práce  | <input type="checkbox"/> diplomové práce  |

Autor: Jiří Kohl

Název práce: Časově závislé výpočty jaderné dynamiky záporných molekulárních iontů

Studijní program: fyzika

Rok odevzdání: 2025

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

Pracoviště: Ústav teoretické fyziky 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 vedoucího:

Jaderná dynamika rezonančních stavů záporných molekulárních iontů, které vznikají při srážkách elektronů s molekulami, je v časově nezávislém kvantovém přístupu obecně popsána nelokálním komplexním a energeticky závislým potenciálem. Ekvivalentní časově-závislý přístup, který často umožňuje hlubší porozumění dynamice těchto procesů a strukturám účinných průřezů, pak obnáší řešit komplikovanou integro-diferenciální rovnici s paměťovým jádrem, což je značně numericky náročné. Je ovšem možná alternativa využít časově nezávislá řešení, která lze v současné době poměrně přímočaře získat pomocí existujících programů, a pomocí Laplaceovy transformace z nich určit časově závislé vlnové funkce.

Cílem práce Jiřího Kohla bylo tento alternativní přístup pro určení časového vývoje podrobně studovat v rámci aproximace jaderné dynamiky pomocí lokálního komplexního potenciálu pro vybrané modely dynamiky dvouatomových molekulárních iontů. V tomto případě je totiž možné s velkou přesností určit numericky časový vývoj oběma metodami a porovnat získané výsledky.

Jiří Kohl nastudoval pokročilou numerickou metodu (metodu konečných prvků v kombinaci s reprezentací diskretní proměnnou a externím komplexním škálováním), kterou lze využít jak pro řešení časově-nezávislé radiální Schrödingerovy rovnice, tak v kombinaci se zobecněnou Crankovou-Nicolsonovou metodou pro přímé a velmi přesné řešení časově-závislé Schrödingerovy rovnice. Napsal vlastní program v Pythonu založená na těchto metodách a otestoval ho na dobře popsaném modelu záporného iontu molekuly  $N_2$ . Poté studoval alternativní přístup pro určení časového vývoje pomocí Laplaceovy transformace jak pro model molekuly  $N_2$ , tak pro model molekuly  $O_2$ , kde jsou výpočty mnohem náročnější vzhledem k úzkým rezonančním stavům, které se objeví během jaderné dynamiky. Na obou systémech podrobně studoval konvergenci testované metody vůči nastavení energetického gridu, kdy se ukázalo, že pro získání zkonvergovaných výsledků je nezbytné zahrnout i řešení odpovídající celkovým energiím pod základním vibračním stavem molekuly a optimalizovat hustotu energetického gridu v okolí úzkých rezonancí.

Jiří Kohl prokázal, že je schopen samostatné práce, především pokud jde o vývoj a testování programů pro numerické řešení dané fyzikální úlohy, ale také pokud jde o matematický rozbor použitých metod a pochopení chování těchto metod v závislosti na různých parametrech. Text práce je na velmi dobré úrovni, a i graficky je práce velmi zdařilá. Věřím, že výsledky práce budou nápomocné především pro studium časového vývoje složitějších víceatomových systémů, kde je nezbytný popis pomocí nelokální teorie.

## Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

### Práci

- doporučuji  
 nedoporučuji  
uznat jako diplomovou.

### Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího:

V Praze dne 9.6.2025

Karel Houfek