

Oponentský posudek doktorské disertační práce

Autor práce: Mgr. Michal Tarana

Název práce: Collisions of slow electrons with molecules

V předložené disertační práci se autor věnuje tématu teoretického popisu nízkoenergetických srážek elektronů s molekulami. Jde o téma, které je zajímavé pro mnoho aplikací v teorii nízkoteplotního plazmatu (fyzika atmosféry a molekulárních mračen, produkce záporných iontů pro ohřev termonukleárního plazmatu či iontový pohon, atd.). Kromě toho se zájem o toto téma v nedávné době značně oživil v souvislosti se studiem mechanismu radiačního poškození biomolekul a se studiem chemických procesů indukovaných svazky elektronů interagujícími s povrchy různých materiálů.

Z teoretického hlediska jde o vysoce netriviální téma. Úspěšná teorie srážek elektronů a molekul v sobě musí obsahovat jak kvalitní kvantově chemický model molekuly tak mnohokanálový elektronový rozptylový problém. A právě zahrnutí elektronového kontinua do kvantově chemického popisu molekuly představuje jednu z hlavních obtíží. Autor této disertační práce se seznámil s jednou z hlavních metod, která se pro její překonání používá, s R-maticovou teorií. Autor se naučil používat a aktivně dále rozvíjet numerické kódy dvou předních skupin z Bonnu a Londýna. V první části práce používá tyto metody pro popis srážek elektronů se dvěma molekulami: F_2 a Li_2 . V obou případech autor svými výpočty zpřesňuje výsledky předchozích prací a studuje vliv zahrnutí elektronové korelace a polarizace na výsledky pro elektronový rozptyl na molekule s fixovanými jádry.

Další obtíží při popisu nízkoenergetických srážek elektronů a molekul je výskyt rezonancí, které způsobují silnou vazbu mezi elektronovou a vibrační dynamikou molekuly nad rámec Bornovy-Oppenheimerovy aproximace. Popis dynamiky vibračního pohybu molekuly se dá efektivně zvládnout pokud se podaří rezonanci v elektronovém rozptylu izolovat pomocí tzv. projekčně-operátorových metod. Tento přístup se používá už řadu let, ale existuje jen málo přímých výpočtů tohoto rozkladu pro konkrétní molekuly. Michal Tarana zde navazuje na předchozí práci Přemysla Kolorenče a provádí rozklad rozptylového problému na rezonanční část a hladké pozadí pro molekulu F_2 s jádry zafixovanými v několika různých vzdálenostech. Za velice instruktivní považují obrázek 10 na straně 14, který ukazuje zanořování vázaného stavu do kontinua diskretizovaného metodou R-maticy a explicitně demonstruje odstranění vyhnutého křížení po použití projekční metody.

Rozklad rozptylového problému na rezonanční část a hladké pozadí je prvním krokem k popisu vibrační dynamiky srážky elektronu s molekulou. Té se autor věnuje v poslední části práce na příkladu molekuly CF_3Cl . Jedná se o velice zajímavou práci, která představuje jednu z mála studií vibrační dynamiky ve srážkách elektronů a molekul s více vibračními stupni volnosti.

Předkládaná práce podstatným způsobem rozvíjí poznání v oboru srážek elektronů a molekul. Podstatně přispívá hned k několika metodám již existujícím a to jak na úrovni čistě elektronové dynamiky, tak při popisu vibrací. Kvalitu prezentovaných výsledků rovněž dokumentuje fakt, že části práce byly přijaty ve formě čtyř článků v prestižních vědeckých časopisech. Autorovy schopnosti vědecké spolupráce lze vyčíst rovněž z faktu, že tyto publikace vznikly částečně během jeho pobytů ve třech vedoucích skupinách v tomto oboru.

Disertační práce se kromě stručného úvodu do problematiky skládá ze dvou hlavních částí. První z nich se soustředí na rozptyl elektronu na molekule se zafixovanými jádry a druhá na vibrační dynamiku. Hlavní objem prezentovaných výsledků je zahrnut ve formě čtyř publikovaných prací autora a tyto články jsou spojeny krátkými úvodními texty vysvětlujícími

problematiku a souvislosti mezi pracemi a také s pracemi jiných autorů. Na závěr je připojeno několik nepublikovaných výpočtů vibrační dynamiky poslední studované molekuly. Práce je napsána přehledně, slušnou odbornou angličtinou a po formální stránce působí dojmem pečlivě odvedené práce. Našel jsem jen pár překlepů, drobných formulačních nepřesností a drobných typografických chyb.

Práci by se snad dala vytknout pouze jistá stručnost – vzhledem k tomu, že se problematice R-matic u nás v tomto rozsahu dosud nikdo nevěnoval, bylo by užitečné, kdyby práce poskytla poněkud obsírnější úvod do této problematiky.

Jde bezesporu o kvalitní disertační práci která prokazuje předpoklady autora k samostatné tvořivé vědecké práci a tuto práci plně doporučuji jako doktorskou disertační práci.

V Praze dne 24. září 2009

A large rectangular area of the document is redacted with a solid light green color, obscuring the signature and any other text that might have been present.

Martin Čížek