

Mgr. Roman Čurík, PhD.
Ústav fyzikální chemie
J. Heyrovského AVČR, v.v.i.
Dolejškova 3, 18223 Praha 8

OPONENTSKÝ POSUDEK DISERTAČNÍ PRÁCE

Autor práce: Mgr. Michal Tarana

Název práce: Collisions of slow electrons with molecules

Předložená práce je věnována studiu rezonančních procesů, ke kterým dochází při srážkách pomalých elektronů s molekulami. Autor se zaměřil zejména na neelastické srážky, u kterých dochází k vibrační excitaci molekuly nebo k její disociaci. Disertační práce se skládá z úvodu, dvou kapitol a závěru. Každá kapitola, včetně úvodu, obsahuje seznam použité literatury.

První kapitola uvádí čtenáře do problematiky, představuje studované procesy a přehledným způsobem definuje přístupy a aproximace použité v práci. Tady mi chybí shrnutí dosavadních výsledků a přístupů, které byly dosaženy v oboru disociativního záchytu elektronu a vibračních excitací molekul při elektronové srážce.

Druhá kapitola obsahuje tři studie, které se věnují různým aproximacím v řešení elektronové úlohy rozptylu na molekulách F_2 a Li_2 . Kapitulu tvoří z hlavní části tři práce publikované v popředních mezinárodních časopisech. Autor použil dva nástroje k uvedeným studiím. Tyto nástroje jsou dvě různé implementace R-maticové metody pro polyatomické molekuly. První implementaci je tzv. Bonnská implementace v současnosti udržovaná a rozvíjena prof. Nestmannem. Tato implementace je úzce spojena s moderní kvantově chemickou implementací konfigurační interakce, která zahrnuje jednoelektronové a dvoelektronové excitace. Druhým nástrojem je R-maticová implementace pocházející ze skupiny prof. J. Tennysona z UCL v Londýně. Tato implementace taky využívá metodu konfigurační interakce, akorát elektronické excitace nejsou limitovány násobností, ale aktivním prostorem.

Třetí kapitola se již nevěnuje elektronové problematice při rozptylu, ale autor plynule přechází k dynamice molekulových jader. Studovanou molekulou je CF_3Cl . Ambiciózní částí tohoto projektu je zahrnutí dvou vibračních módů. Tady je nutno podotknout, že studium vibrační dynamiky dvou vibračních módů na molekule této velikosti posouvá tento projekt k vrcholu toho, co bylo v daném oboru uděláno. Součástí kapitoly je taky publikace, ve které se autoři zaměřili na disociační kanál. V disociaci je zdůrazněn výrazný vliv tzv. "umbrella" módu na účinný průřez disociace. K podobnému závěru spěje taky druhá část této kapitoly, ve které jsou shrnuty výsledky pro vibrační excitaci. Mírnou slabinou této práce se zdá být odhad polohy ale hlavně šířky rezonance nutné ke konstrukci lokálního komplexního potenciálu. Tato neurčitost v době života této rezonance vede nejspíš k slabé shodě s experimentem, kterou se výsledky vyznačují. Autoři na tento problém poukazují a navrhují přesnější *ab initio* přístup, kterým tyto rozhodující parametry určí. I přes tyto nedostatky ve mne tato kapitola zanechala výjimečný dojem.

V poslední **čtvrté kapitole** jsou přehledným způsobem shrnuty výsledky a závěry sepsaných projektů.

Stěžejní výsledky, které autor zařadil do disertace, byly publikovány ve čtyřech člancích mezinárodní úrovně. Tím je dána vysoká úroveň disertační práce.

Po formální stránce je práce napsána velmi přehledně a srozumitelně. Kladně hodnotím zejména fakt, že se autor věnoval netriviálním projektům, které dosud nebyly uspokojivě popsány v literatuře. Konkrétně, molekula Li_2 představuje nekonečnou sérii problému pro R-maticovou metodu a to nejenom množstvím nízko ležících excitovaných stavů, ale taky difúzním charakterem vázaných orbitalů, kvůli kterým bylo potřeba R-maticovou metodu dotlačit až k její hranicím použitelnosti.

Vzhledem k tomu, že implementaci R-maticové metody osobně znám, dovoluji si tvrdit, že dosažené výsledky jasně prokazují **tvůrčí schopnosti a vědeckou pečlivost studenta a splňují požadavky** kladené na disertační práce doktorského studia. Na tomto základě **doporučuji disertační práci Mgr. Michala Tarany k obhajobě.**

Mgr. Roman Čurík, PhD.

V Praze dne 14. září 2009

Dodatek A

Student v disertaci dobře zvládl vědecký styl a formu publikování. Jedinou věcí, kterou musím vytknout je, že autor několikrát použil netriviální prohlášení, které nevysvětlil ani nepoužil referenci, která vysvětlení obsahovala. Kupříkladu

- a) Kapitola 2, poslední odstavec před publikací, první věta. Proč je metoda CAS CI náročná v případě F_2 molekuly? Je nutný aktivní prostor příliš veliký? Jak veliký a proč?
- b) Sekce 2.2, třetí věta si taky zaslouží krátké objasnění nebo referenci.

Dodatek B

Seznam možných chyb v textu. Zachováno je pořadí v jakém se objevují v práci:

- strana 2, třetí odstavec, první věta. „... vibrationally non-elastic ...“ používá se „... vibrationally inelastic ...“
- strana 6, druhý odstavec, sedmý řádek, „... is the use truncation ...“ by nejspíš mělo být „... is the use of a truncation ...“
- strana 55, druhý odstavec pod obrázkem 3.3, první věta „... cross sections showed above ...“ by mělo být „... cross sections shown above ...“
- kapitola 4, Conclusions. Kapitola obsahuje čtyři odstavce. Každý s těchto odstavců začíná větou, které akční sloveso je vždy „... we are/were dealing with ...“. Obecněji, jedná se o autorovou oblíbenou frázi, protože v celé práci je použita 14 krát.
- kapitola 4, Conclusions, řádek 7. „correaltion“ by mělo být „correlation“.