

Posudek školitele doktorské práce Michala Tarany nazvané

Collision of slow electrons with molecules.

Tato práce je věnovana teoretickému popisu srážek pomalých elektronů s molekulami. Hlavním cílem bylo studium rezonančních procesů zejména vibrační excitace a disociativního záchytu elektronu na molekule. Výsledky práce lze zhruba rozdělit do dvou skupin: V první části věnované rozptylu elektronů na molekulách se zafixovanými jádry byly studovány hlavně efekty polarizace a korelace elektronů. Výsledky byly publikovány v těchto respektovaných zahraničních časopisech:

1. M. Tarana, and J. Horáček. Correlation effects in R-matrix calculations of electron- F_2 elastic scattering cross sections, *J. Chem. Phys.* 127, 154319 (2007).
2. M. Tarana, and J. Tennyson. Polarisation effects in electron collisions with Li₂: Application of the molecular R-matrix method with pseudostates, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 41, 205204 (2008).
3. M. Tarana, B.M. Nestmann, and J. Horáček. R-matrix calculations of the elastic electron scattering on the Li₂ molecule, *Phys. Rev. A.*, 79, 012716 (2009). Všechny tyto práce obsahují nové poznatky a práce o lithium je zcela unikátní. Tato molekula má totiž enormní polarizabilitu (největší ze známých molekul), její elastický účinný průřez je obrovský a všechny výpočty na této molekule jsou extrémě obtížné protože je velmi slabě vázána.

V druhé části své práce se M. Tarana věnoval studiu jaderné dynamiky (vibrační excitace a disociační záchyt) v případě existence dvou vibračních módů, konkrétně na molekule CF₃Cl. Tato práce byla publikovaná v: M. Tarana, P. Wielgus, S. Roszak, and I.I. Fabrikant. Effects of two vibrational modes in the dissociative electron attachment to CF₃Cl, *Phys. Rev. A.*, 79, 052712 (2009) a představuje první seriozní pokus popisu interakce dvou vibračních modů.

Práce Michala Tarany je vynikající, výborně zvládl jak velice obtížnou teorii Feshbach-Fanovy metody a R-maticové teorie samé, tak i provedení vlastních výpočtů pro reálné molekuly. Toto vše v době tří let. Po celou dobu pracoval velmi samostatně a efektivně. Jasné prokázal, že je schopen zvládat rozsáhlé oblasti teoretické fyziky a nové ideje realizovat. Michal je velice talentovaným a nadějným pracovníkem.

Práce splňuje vrchovatou měrou všechny požadavky na doktorskou práci a to jak kvalitou, tak i kvantitou (další práce publikoval M. Tarana v recenzovaných sbornících) a doporučuji ji k přijetí.

Praha, 24. září 2009

Prof. RNDr. Jiří Horáček, DrSc
Ústav teoretické fyziky
MFF UK Praha