

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Ondřej Tkáč
Název práce: Fotodisociace molekul ve volných nanočásticích
Studijní program a obor: Biofyzika a chemická fyzika
Rok odevzdání: 2010

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Dr. Petr Kužel
Pracoviště: Fyzikální ústav AVČR, v.v.i.
Kontaktní e-mail: kuzelp@fzu.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/opponenta:

Diplomová práce se zabývá studiem problematiky ultrafialové fotochemie klastrů chromoforů pyrrolu, imidazolu a pyrazolu, klastrů $(\text{HBrN})_n$ a fotodisociací molekuly HI v klastrech vody a argonu. Jednou z důležitých částí diplomové práce je též studium molekulových paprsků a procesu formování klastrů v těchto paprscích.

Práce je psána anglicky; na několika místech bych doporučil drobné stylistické nebo jazykové úpravy, nicméně takových míst je velmi málo a příliš neubírají práci na celkové jasnosti a srozumitelnosti. Velmi jsem ocenil teoretický úvod (Kapitola 2), který je psaný velmi jasně a s nadhledem předkládá motivaci pro daný výzkum a použité metody studia. Kapitola 3 obsahuje velmi detailní popis experimentální aparatury; to je zdůvodněno faktem, že poměrně významná část experimentální práce je věnována studiu supersonické expanze a formování klastrů v molekulových svazcích (Sekce 4.1). Tuto část považuji za velmi přínosnou; problematice vytváření klastrů v molekulových svazcích (tj. de facto „přípravě vzorků“) se zevrubně věnuje jen velmi málo prací. Kapitola 4 rozebírá část experimentálních výsledků, která se týká se klastrů HBr a chromoforů. Výsledky získané na klastrech HBr mají zjevný přínos jako kalibrační měření pro laboratoř, kde diplomová práce vznikla; studium chromoforů pak úzce navazuje na jednu z předchozích diplomových prací. V 5. kapitole se autor orientuje na nové chemické systémy a předkládá výsledky studia fotodisociace HI a HNO_3 ve vodních a argonových klastrech. Experimenty, v nichž některé vodíky v systému $\text{HI}(\text{H}_2\text{O})_n$ byly nahrazeny deuteriem, považuji za vhodně zvolené, neboť velmi přímočaře umožnily načrtnout představu procesu fotolýzy studovaného systému.

V závěru (kapitola 6) jsou shrnuty všechny dosažené výsledky. Některé části závěru nejsou napsány zcela jasně, např. 3. odstavec začínající slovy „The experimental velocities of...“ je zřejmě špatně anglicky formulován a vyznívá zcela nejednoznačně. Dle mého názoru by měl znít: „The experimental velocities of neon, argon and krypton produced from a rare gas cluster source lie below the theoretical velocities within the investigated range of the nozzle temperature. The theoretical curve was calculated with the assumption that the initial stagnation enthalpy H_0 of the gas is completely converted into directed translational motion. Since a residual temperature of the rare gas monomers has been clearly detected in all these experiments, an incomplete enthalpy conversion should have occurred in agreement with the lower value of the observed velocity.“

Souhrnem lze říci, že předložená práce má (i přes pár drobných výše uvedených nedostatků) vynikající úroveň. Autor dobře zvládl náročnou experimentální techniku molekulových paprsků, charakterizoval supersonickou expanzi v dané aparatuře a formování klastrů v molekulových paprscích. Podařilo se mu významně přispět k získání originálních výsledků, na jejichž základě vznikla publikace, kde je druhým autorem. Doporučuji diplomovou práci k obhajobě a — pokud bude mít též vlastní obhajoba odpovídající úroveň — navrhuji ji klasifikovat stupněm výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Zaujala mě metoda pseudonáhodné modulace. Při jejím odvození se předpokládá, že autokorelační funkce pseudonáhodné sekvence modulace je rovna Dirakově δ -funkci. Do jaké míry je to pravda u provedených experimentů, tj. z kolika segmentů sestává použitý chopper a jak široká je jeho skutečná autokorelační funkce?

Na obr. 36 pozorujeme hlavní maximum u nízkých energií odpovídající „pomalým“ vodíkům vzniklým disociací H_3O nebo HI . Menší maxima u 0,6 a 1,2 eV odpovídají dle autora artefaktům experimentu („nedostatečné odečtení pozadí“). Je možné toto tvrzení blíže komentovat? Je možné se těmito artefaktům vyhnout lepším zpracováním dat? Za jakých okolností bych bylo možné tvrdit, že se skutečně experimentálně pozorují rychlé vodíky?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: V Praze dne 30.4. 2010



