

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Jan Linhart

Název práce: Nelineární optická spektroskopie molekulárních komplexů

Studijní program a obor: Fyzika, biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2011

Jméno a tituly vedoucího/oponenta: Doc. RNDr. Jakub Pšenčík, Ph.D.

Pracoviště: KCHFO MFF UK

Kontaktní e-mail: psencik@karlov.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/oponenta:

Diplomová práce se zabývá srovnáním dvou metod optické spektroskopie vysokého časového rozlišení: Klasické metody excitace a sondování (pump-probe spektroskopie) a poměrně nedávno zavedené metody 2D koherentní spektroskopie. Druhá jmenovaná má potenciál poskytovat ucelenou informaci o struktuře a dynamice excitovaných stavů studovaných komplexů a především o koherencích mezi energetickými hladinami. Hlavním cílem práce bylo pomocí počítačových simulací ukázat, jak by se v kinetikách naměřených metodou pump-probe projevíly elektronické koherence pozorované v 2D spektrech.

Práce má teoretický charakter a její těžiště leží ve třetí a čtvrté kapitole. Obsahem třetí kapitoly je zdařilé komentované shrnutí výrazů popisujících odezvu látky na interakci s elektrickou složkou elektromagnetického záření s důrazem na polarizaci třetího řádu. Odvozené a zavedené vztahy jsou poté využity ke konstrukci výrazů popisujících pump-probe signál a 2D spektra. Ve čtvrté kapitole jsou presentovány vlastní výsledky simulací pro dva dvouhladinové systémy s různou mírou vzájemné interakce. Ze získaných výsledků je patrné, že koherence mezi elektronovými stavy mohou být teoreticky pozorovatelné nejen 2D spektroskopii, ale i metodou excitace a sondování. V této části jsem postrádal podrobnější charakteristiku obou dvouhladinových modelových systémů. Ty jsou zde popsány pomocí energie přechodu, ale nenašel jsem informaci o přechodových dipólových momentech. Přitom bez jejich interakce by v systému nemohlo dojít k přenosu energie pozorovanému již v první simulaci s nejnižší mírou interakce. Informaci o síle interakce mezi oběma systémy použité v dalších dvou simulacích je uvedena až v Conclusion, ale z textu není patrné o jaký typ interakce vlastně jde. Předpokládám že se jedná o dipólovou interakci právě mezi přechodovými momenty.

Práce je psána slušnou angličtinou, ale místy na mě působil rušivě její až příliš žoviální tón. Věcné chyby se v práci objevují jen občas a vesměs se jedná o méně závažná pochybení, zřejmě způsobená spíše nepozorností nebo časovým tlakem při dokončování, než neznalostí. Např. v rovnici 2.8 chybí faktor '2' ve jmenovateli předposledního členu. V práci jsem nenalezl informaci o používaném systému jednotek, ale pokud by se jednalo o soustavu SI, bylo by nutné poslední tři členy vydělit faktorem ' π ' a pravou stranu rovnice 2.9 faktorem ' 2π '. Na straně 24 je popisován přechod mezi základním a prvním excitovaným tripletním stavem molekuly tetrafenylporfyriu pozorovaným kolem 460 nm. Ve skutečnosti je pro danou molekulu již nejnižší tripletní stav stavem excitovaným a pozorovaný přechod odpovídá triplet-tripletní absorpci.

Přes uvedené drobné výhrady je třeba zdůraznit, že student bezpochyby zvládl pochopení jak poměrně komplikovaného matematického aparátu nutného k popisu 2D spekter, tak i fyzikálních principů, které tento aparát popisuje. Obojí pak dokázal využít k získání originálních výsledků. Doporučuji proto práci přijmout k obhajobě s hodnocením výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- 1) Rovnice 2.9 a 2.10 jsou ve vzájemném rozporu. Můžete tento rozpor vysvětlit?
- 2) Na straně 11-12 píšete, že vysokého rozlišení lze dosáhnout buď v čase nebo v energii, nikoli ale najednou. Přitom právě 2D spektroskopii se daří toto pravidlo obejít. Čeho se přitom využívá?
- 3) Simulovaná transientní spektra dvou dvouhladinových systémů na obrázku 4:6 vykazují v čase $T=0$ při excitaci spektrálně nekonečným pulsem vyšší populaci stavu s vyšší energií. Čím je to způsobeno?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: