

Oponentský posudek doktorské práce Mgr. Ondřeje Maršálka nazvané

„Structure and dynamics of electronic defects in liquid water“.

Tato doktorská práce je založena na souboru šesti prací, které Mgr. O. Maršálek publikoval se spolupracovníky v letech 2010-2012. Vůdčím motivem této práce je studium ultrarychlých procesů inicializovaných fotoionizací kapalné vody.

První kapitola práce je věnována úvodu a vysvětlení problematiky, druhá kapitola popisuje použité výpočetní metody. Těžiště práce je ve třetí a čtvrté kapitole. Výsledky jsou shrnuty v části páté.

Studovaná problematika je velmi aktuální a velmi důležitá a to nejen po stránce základního výzkumu, tj. pochopení dějů probíhajících po fotoionizaci, ale i po stránce praktické pro svou bezprostřední vazbu například na radiační poškození biologických struktur. Studovat dynamiku elektronu v kapalné vodě je velmi komplikovaný a obtížný problém. Jedná se o popis kvantového jevu na němž se podílí velké množství částic. Aby bylo možné tento proces vůbec nějakým způsobem modelovat, je nutné vytvořit složitou kombinaci různých přibližných výpočetních metod zahrnujících například molekulární dynamiku, kvantově chemické výpočty potenciálových povrchů při různých stupních aproximace, použití DFT teorie, různých statistických přístupů a dalších technik. Každá z těchto technik vnáší jistou chybu do popisu těchto ultrarychlých procesů.

Proto bylo nutné nejprve otestovat vhodnost a důvěryhodnost výše uvedených technik na menších modelových systémech (1-3 molekuly vody). Na těchto modelech bylo možné studovat například dynamiku elektronu v závislosti na teplotě klastru a bylo například ukázáno, že dynamika studených klastrů je velmi odlišná od klastrů s pokojovou teplotou (práce 120). Poté bylo možné přistoupit ke studiu větších vodních klastrů (32 molekul vody).

Předložená práce obsahuje velmi aktuální výsledky a je velice důležitá pro řadu problémů. Velice zajímavá jsou například simulovaná elektronická spektra (práce 118). To, že následný experiment nepotvrdil teoretickou předpověď může být dobrým odrazovým můstkem pro další studium.

K předložené práci mám dva dotazy.

Zprvé bych se rád dotázal, zdali je možné odhadnout souhrnnou přesnost dosažených výsledků. Přístup použitý v této disertaci totiž obsahuje řadu zanedbání a aproximací, počínaje Born-Oppenheimerovu aproximací, přes použití DFT teorie, metod kvantové chemie a klasické mechaniky, atd. Chyby těchto a dalších aproximací se mohou kumulovat tak, že získané výsledky mohou mít případně pouze jen kvalitativní charakter. Pro porozumění studovaných dějů je to zřejmě dostačující, ale kvantitativní odhad přesnosti by byl jistě zajímavý. Dají se například odhadnout nepřesnosti v určení VIP energií studované v práci 123? Jsou skutečně přesné na tři platné cifry?

Zadruhé: Problematika řešená v této disertaci je velice rozsáhlá a je výsledkem práce týmu spolupracovníků. Z předložené disertace mi ale není jasné, v čem spočíval vlastní přínos doktoranda O. Maršálka. Jelikož u většiny prací je uveden jako první autor je jeho přínos je patrně nezanedbatelný. Toto by ale bylo dobré v průběhu obhajoby upřesnit.

K práci nemám žádné zásadní připomínky, práce je psána velmi pečlivě, velmi dobrým jazykem a počet překlepů je minimální. Autor má zřejmě dobré formulační schopnosti.

Podle mého názoru je předložená práce velmi kvalitní a splňuje požadavky kladené na doktorskou práci. Autor předložené práce bezpochybně prokázal schopnost samostatné vědecké práce a **doporučuji, aby mu byl po úspěšné obhajobě udělen titul PhD.**

V Praze, 14. 8. 2012

Prof. RNDr. Jiří Horáček, DrSc.

Ústav teoretické fyziky MFF UK Praha