

Oponentský posudek na doktorskou disertační práci

Název práce: "Reactions of Hydrogen Molecules with Ions and Recombination of H_3^+ Ions with Electrons at Cryogenic Temperatures"

autor: Mgr. Michal Hejduk

Univerzita Karlova v Praze, matematicko-fyzikální fakulta

posudek vypracoval: Mgr. Ondřej Votava, Ph.D. (ÚFCH-J.H. AV ČR)

Předkládaná disertační práce sestává z textové části o rozsahu 126-ti stran, ke které jsou připojeny kopie devíti (!) publikovaných odborných článků v recenzovaných mezinárodních periodikách, kterých je Michal Hejduk jedním ze spoluautorů. Takový rozsah doložené publikační činnosti je velmi úctyhodný a jednoznačně svědčí o kvalitě práce uchazeče.

Téma práce je vysoce aktuální a jedná se jednoznačně o špičkový vědecký výzkum na mezinárodní úrovni. O tom jednoznačně svědčí nejen množství publikovaných článků, ale zejména kvalita periodik, ve kterých byly tyto práce publikovány. V rámci práce byl vyvinut a otestován nový zdroj para- H_2 a s jeho pomocí studována tvorba a destrukce iontů H_3^+ a NH^+ za velmi nízkých teplot. Předkládaná práce prezentuje velmi významné rozšíření stávajících experimentálních technik, které umožňuje studium klíčových ion-molekulových reakcí za velmi nízkých teplot a specificky studium reaktivity s orto- H_2 a para- H_2 . Význam těchto měření je primárně pro lepší pochopení chemie mezihvězdného prostoru.

Práce je psána v anglickém jazyce. Jazyková úroveň je velmi obstojná, nicméně nedosahuje standartu mezinárodních odborných periodik. Objevují se tu a tam typické gramatické nedostatky, kupříkladu nedodržení slovosledu, nesprávné používání členů a podobně, kterých se kolega jistě s praxí zbaví. Celou řadu těchto drobných nedostatků jsem vyznačil v textu a v případě zájmu je s kolegou Hejdukem konkrétně prodiskutuji. V každém případě je autor na takové úrovni, že může bez problémů komunikovat ve vědecké komunitě.

Po formální stránce je práce kvalitně vypracována, obsahuje minimum typografických chyb, takže je zřejmé, že její přípravě byla věnována patřičná péče. Jednoznačně splňuje v tomto směru náležitosti doktorské disertace. Přesto musím upozornit na některé prohřešky, kterých by bylo dobré se vyvarovat:

- Odkazy na literaturu nejsou v textu uváděny konzistentně. V některých případech je používán formát: [autor, rok], zatímco jindy: autor [rok]. Osobně bych upřednostňoval první variantu, kdy je celý odkaz oddělen závorkami od zbytku textu, každopádně však by měl být používán jeden formát konzistentně v celé práci.
- Některé symboly použité v rovnicích nejsou dobře vysvětlené v textu. Například symboly f_2 a f_3 v úvodu kapitoly 2 nejsou v textu ozřejměny (jsou však uvedeny v seznamu použitých symbolů na stranách 123 – 126. Symboly $D_{(1/2, 3/2, 0, 1)}$ použité v rovnicích pro spinovou algebru v téže kapitole však nejsou vysvětleny ani v textu ani v seznamu symbolů.
- Na str. 23 je použitý symbol k_B pro rychlostní konstantu zpětné reakce. Tento symbol by měl být výhradně používán (v souladu se seznamem použitých symbolů) pro Boltzmanovu konstantu. Tato nekonzistence by mohla být zavádějící.
- Obr. 1.3. na str. 19 je věcně nesprávný a poněkud zavádějící. Šipky znázorňující rozdíly mezi mody v_{2x} a v_{2y} i jejich vysvětlení v popisku k obrázku jednoznačně nejsou správně. Kromě toho se jedná o přesnou kopii obrázku z dřívější doktorské práce J. Varju, včetně popisku obrázku i s gramatickými a věcnými chybami.
- V rovnici 7.12 není specifikováno při jaké frekvenci ν je absorbance A měřena. Zřejmě se jedná o hodnotu na vrcholu absorpční čáry, což však by mělo být v textu specifikováno.

- Uniká mi fyzikální význam zavádění spinové teploty (str. 59), zejména vzhledem k tomu, že spinová výběrová pravidla brání dosažení termodynamické rovnováhy mezi nejnižšími stavy $^{\circ}\text{H}_2$ a $^{\text{p}}\text{H}_2$.

Po stylistické stránce musím konstatovat, že autor mohl věnovat větší péči logické struktuře textu a tomu, jaký prostor je jednotlivým tématům věnován. Například tematice módového sladění (mode-matching) laserového paprsku s optickým rezonátorem CRDS v pododdílu 7.2.1 je věnováno celých 3.5 stránek textu aniž by bylo vysvětleno proč je tento technický detail tak důležitý, případně jak autor přispěl k jeho zlepšení. Na druhou stranu celému oddílu 7.3 (Evaluation of recombination rate coefficients) je věnováno necelých 7 řádek.

Obecně za drobnou Achylovu patu této jinak velmi kvalitní práce považuji fakt, že je pro čtenáře obtížné určit, které části jsou autorovým originálním příspěvkem, a které jsou pouze převzaté z literatury či výsledkem práce ostatních členů týmu. Doporučuji proto aby se autor specificky těmto bodům věnoval v obhajobě.

Každopádně navzdory výše uvedeným drobným výhradám musím konstatovat, že předkládaná práce jednoznačně prokazuje autorovu schopnost samostatné vědecké práce a splňuje náležitosti doktorské disertační práce a doporučuji ji k obhajobě.

V Praze, 16. 8. 2013 Mgr. Ondřej Votava, Ph.D.