

Posudek doktorské disertační práce

Autor: Mgr. Martin Váňa

Název práce: A model of resonant collisions of electrons with molecules and molecular ions

Autor posudku: RNDr. Karel Houfek, Ph.D. (školitel)

V této práci se Martin Váňa věnoval teoretickému studiu dvourozměrného modelu nízkoenergetických rezonančních srážek elektronů s dvouatomovými molekulami a molekulárními ionty, při kterých dochází k vibrační excitaci molekul a k disociačnímu záchytu elektronu. Tento model umožňuje přesné numerické řešení a je vhodným nástrojem k testování přibližných metod, které se používají při studiu těchto procesů, a k analýze struktur objevujících se v účinných průřezích a jejich interpretaci.

Martin se ve své práci zaměřil především na časový vývoj těchto srážek v rámci dvourozměrného modelu, který je podrobně popsán v první kapitole včetně postupů, jak z časově závislého řešení získat elementy S matice a účinné průřezy. V druhé kapitole jsou pak popsány použité numerické metody.

Hlavní výsledky práce jsou obsaženy v třetí a čtvrté kapitole. První z nich je věnována modelu srážek elektronů s neutrálními dvouatomovými molekulami N_2 , NO a F_2 . Martin nejen úspěšně vyřešil časově závislý problém a napočítal konečné účinné průřezy, ale především své výsledky využil k úplné interpretaci asymetrických interferenčních struktur v účinných průřezích vibrační excitace. Tyto výsledky byly publikovány v časopise *Physical Review A*.

Čtvrtá kapitola je věnována modelu disociační rekombinace na iontu H_2^+ , přičemž jde o první model, který umožňuje výpočet účinných průřezů do jednotlivých konečných Rydbergových stavů. Martin tento model jako první úspěšně numericky vyřešil v rámci časově závislé formulace a provedl interpretaci účinných průřezů, jejichž struktury dosud nebyly takto podrobně studovány. Výsledky jsou v současné době připravovány k publikaci.

Martin pracoval vždy velice iniciativně. Jeho znalosti programování a práce s grafickými výstupy mu umožnily vytvořit kompletní balík programů pro přesné řešení dvourozměrného modelu a zobrazení jeho dynamiky pomocí animací, které sklidily ohlas na několika zahraničních konferencích, neboť usnadňují pochopení dynamiky studovaných procesů. Předložená práce je podle mne na velmi dobré jazykové i grafické úrovni. Proto ji doporučuji, aby byla po úspěšné obhajobě uznána za doktorskou disertační práci.

V Praze dne 11. 9. 2017

RNDr. Karel Houfek, Ph.D.