

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Pavel Šklíba

Název práce: Calculations of photoelectron spectra of small water clusters using the independent molecule model

Studijní program a obor: Fyzika – Obecná fyzika

Rok odevzdání: 2020

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Mgr. Zdeněk Mašín, Ph.D.

Pracoviště: Ústav teoretické fyziky

Kontaktní e-mail: zdenek.masin@utf.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:

Předložená bakalářská práce Pavla Šklíby je psaná v anglickém jazyce. Jejím cílem bylo zformulovat a prakticky implementovat teoretický model jednofotonové ionizace malých vodních clusterů. Jedná se o nový problém motivovaný nedávnými experimentálními výsledky pro úhlové rozdělení fotoelektronů, pro které v současnosti neexistuje teoretický popis. Práce je členěná na tři části: úvod, kde je představena motivace pro práci, dále na kapitolu teorie, kde jsou postupně odvozeny vztahy pro úhlová rozdělení fotoelektronů pro jednu molekulu a pak pro cluster pomocí fotoionizačních amplitud pro jednu molekulu. Poslední kapitola se zaměřuje především na výpočty úhlových rozdělení fotoelektronů pro clustery pomocí vztahů odvozených v předchozí kapitole.

V práci student rozvinul jednoduchý model fotoionizace clusterů navržený školitelem. Tento model je založen na interferenci fotoionizačních amplitud pro jednotlivé molekuly z nichž se cluster skládá. Student tento model následně použil k výpočtům účinných průřezů a úhlových rozdělení fotoelektronů v malých vodních clusterech. Původním cílem práce bylo provést odvození analytických vztahů pro úhlová rozdělení fotoelektronů v clusterech a provést ověření analytických vztahů srovnáním s numerickým výpočtem. Během práce se ukázalo, že zvolený teoretický model není kompatibilní s dostupnými vstupními daty a tedy finální výsledky pro clustery byly vygenerovány studentem numerickou metodou modifikací původního programu ve Fortranu vyvinutého školitelem.

Tato práce vyžadovala důslednost a pečlivost při odvozování složitých vztahů vyplývajících z algebry skládání momentů hybnosti a zároveň zručnost v programování při manipulaci s řadou vstupních dat a implementaci a optimalizaci výpočtu výsledných vztahů. Během práce student prokázal iniciativu a samostatnost při odvozování teoretických vztahů a v implementaci vlastních programů v Pythonu. Také se rychle naučil základy Fortranu a základy výpočtů na počítačových clusterech.

Výsledkem práce je první model fotoionizace clusterů, který je ale příliš jednoduchý na to, aby kvantitativně vysvětlil experimentální data. Obdržené výsledky poslouží zejména jako hypotézy, které budou ověřeny v navazující práci s použitím přesnějších (ab initio) výpočtů.

Práce je psaná srozumitelnou angličtinou a může tedy být zpřístupněna zájemcům v komunitě molekulové a optické fyziky.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze, 24.8.2020