

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy v Praze

- 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:** Obecná fyzika  
**Rok odevzdání:** 2020

**Jméno a tituly oponenta:** doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D.  
**Pracoviště:** UTF MFF UK  
**Kontaktní e-mail:** Martin.Cizek@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:**

Pavel Šklíba se ve své práci věnuje teoretickému popisu fotoionizace molekul, kterou pro jednu molekulu popisuje v dipólové aproximaci a pro molekulární klastr uvažuje koherentní sumu příspěvků od jednotlivých molekul, které se ale navzájem neovlivňují („independent molecule model“). Těžištěm práce je odvození vzorců pro průměrování přes všechny možné orientace molekuly (klastru) a testování výsledných vzorců na příkladu molekulárních klastrů vody. Práce rovněž diskutuje srovnání s publikovanými experimentálními výsledky. *Rád bych podotkl, že autor se pěkně vypořádal s klíčovými odvozeními, která jsou poměrně dlouhá a pro posluchače bakalářského studia obtížná.*

*Práce je poměrně rozsáhlá, je napsaná pěknou angličtinou a také po grafické stránce působí pečlivým dojmem. Obsahuje jen malé množství překlepů a typografických chyb. Drobné překlepy jsou například v rovnicích na straně 8 a v rovnici 1.40 na straně 14. V rovnici 1.60 na straně 17 jsou nesprávně umístěná některá znaménka sumace. V obrázcích 2.8-10 jsou některé čáry špatně viditelné kvůli nevhodné volbě barvy. Jedná se vesměs o drobnosti a navzdory jim se dle mého názoru jedná o vynikající bakalářskou práci.*

*Předložený text plně doporučuji uznat jako bakalářskou práci.*

### **Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuse:**

- 1) Nepochopil jsem, proč se v textu na straně 41 a v obrázku 2.8 zdůrazňuje energetický rozsah, když v tomto případě jde o základní stav, tj. energii 0. Naopak v kapitole 2.4.4 už bude energie důležitá. Umíte říci, jak se projeví nenulová teplota klastru? Jakou teplotu má klastr v citovaném experimentu?
- 2) Účinný průřez fotoionizace závisí v prvním přiblížení lineárně na velikosti klastru (viz např. obrázek 2.8). To je pochopitelné v modelu nezávislých molekul. Existuje nějaký experiment studující tuto závislost?
- 3) V kapitole 2.4.5 chybí kontext. Proč se zde studuje nesprávný analytický model? Existují nějaké předešlé výpočty s tímto modelem? Nebo to má prostě ilustrovat důležitost správného započtení posunutí?

### **Práci**

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

### **Navrhuji hodnocení stupněm:**

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Velvary 25. 8. 2020