

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy v Praze

posudek vedoucího       posudek oponenta  
 bakalářské práce       diplomové práce

**Autor:** Martina Šarmanová  
**Název práce:** Mathematical modeling of vibrational dynamics in electron scattering from molecule

**Studijní program a obor:** Matematické modelování ve fyzice a technice  
**Rok odevzdání:** 2022

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:**

Martina Šarmanová ve své diplomové práci navazuje na úspěšnou bakalářskou práci, v níž se věnovala řešení dynamiky pro model vibrační excitace molekuly se dvěma stupni volnosti srážkou s elektronem. V diplomové práci je model zobecněn na molekulu se třemi vibračními stupni volnosti, což umožňuje plný popis vibrační dynamiky tříatomové molekuly. V úvodu a první kapitole je představen problém kvantového popisu srážky elektronu s molekulou pomocí nehomogenní Schrödingerovy rovnice. Dále diplomantka diskutuje diskretizaci problému rozvojem do báze v prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí a představuje použité iterační metody a různé možnosti pro předpokládání problému. Hlavní částí celé práce jsou kapitoly 4 a 5, v nichž jsou představeny konkrétní parametry pro tři testovací problémy a diskutuje se velké množství variant různých předpokládání a jejich vliv na iterační řešení problému, jak v termínech počtu iterací, tak podle výpočetního času.

Diplomantka se práci věnovala s velkým nasazením. Oceňuji její iniciativní přístup a samostatnost, jak při implementaci jednotlivých metod v programovacím jazyce Fortran tak při práci s literaturou. Martina Šarmanová se rovněž podílela na řešení grantového úkolu pro problém, který zobecňuje výsledky její bakalářské práce jiným směrem než diplomová práce. Výsledky tohoto úsilí nejsou přímo zahrnuty do diplomové práce, ale budou brzy publikovány v odborném časopise a jsou součástí aktuální vědecké práce naší skupiny.

Práce je napsaná pěknou angličtinou. V textu jsem nenašel téměř žádné překlepy a jen malé množství typografických chyb. Také po grafické stránce je velmi pečlivě zpracována.

**Práci doporučuji uznat jako diplomovou.**

#### **Navrhuji hodnocení stupněm:**

výborně    velmi dobře    dobře    neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Velvary 28. 8. 2022