



ZDENĚK BONAVENTURA
Email: zbona@physics.muni.cz

Department of Physical Electronics
Fac. Sci., Masaryk University
Kotlářská 2, 611 37 Brno
Czech Republic

Oponentský posudek dizertační práce Štěpána Roučky:
Laboratory astrochemistry and applications of computer simulations

Dizertační práce se zabývá experimentálním studiem chemie iontů v laboratorních podmínkách, které jsou relevantní pro astrofyziku.

Cílem práce je poskytnout experimentální hodnoty rychlostního koeficientu reakce $\text{H}^- + \text{H} \rightarrow \text{H}_2 + \text{e}$, které by následně mohly sloužit jako vstup pro kinetické modely v astrofyzice a pro modelování průmyslových plazmových zařízení. Experimentální výzkum za účelem stanovení absolutního rychlostního koeficientu příslušné reakce byl proveden v dříve neprozkoumaném teplotním rozmezí.

Autor dále pomocí počítačových simulací navrhuje konfiguraci nového experimentálního zařízení, které má umožnit extrakci elektronů vznikajících v iontové pasti a to bez vlivu na zachycené ionty. Toto zařízení má umožnit měření energie těchto elektronů. Autor dále navrhuje několik způsobů, jak zlepšit energetické rozlišení nově vznikajícího zařízení. Velmi oceňuji schopnost autora efektivně využít počítačové simulace k návrhu a optimalizaci takového zařízení.

Dalším přímým výstupem práce je model chladnutí elektronů v dohasínajícím plazmatu, pomocí kterého je možné analyzovat experimentální data rekombinace H_3^+ .

Studovaná problematika je mimořádně aktuální jak oblastí zkoumání, tak použitými metodami.

Velmi oceňuji schopnost autora úzce navázat počítačové simulace na experimentální výzkum. A to jak při návrhu a optimalizaci nového experimentálního zařízení, tak při tvorbě modelu pro analýzu naměřených dat.

Práce je vypracována velmi pečlivě, je napsána na vysoké odborné úrovni a svým širokým záběrem svědčí o vědeckých a tvůrčích kvalitách předkladatele. Dosažené výsledky jsou prezentovány s vyčerpávající fyzikální interpretací, důraz je přitom kladen na detailní pochopení příslušných fyzikálních procesů. O kvalitě prezentovaných výsledků svědčí i to, že byly publikovány v řadě kvalitních zahraničních časopisů.

K práci mám následující dotaz: V kapitole *Numerical integration of equations of motion* (str. 25) se autor odvolává na alternativní schéma integrace pohybových rovnic a to modifikované rychlostní Verletovo schéma. V příloženém článku (Roučka and Hrach 2011) v rovnici (22):

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{k+1} &= \mathbf{x}^k + \mathbf{v}^k t_{c,k} + \frac{\mathbf{F}}{2m} t_{c,k}^2, \\ \mathbf{v}^{k+1} &= \mathbf{v}^k + \frac{\mathbf{F}}{m} t_{c,k},\end{aligned}$$

se síla \mathbf{F} počítá na začátku globálního časového kroku. Jestli jsem tomu dobře porozuměl, schéma (22) se následně používá na integraci pohybu částic v okolí válcové sondy. Mohl by autor detailněji pospat, jak je toto schéma v případě válcové geometrie implementované? Navrhuji, aby autor stanovil řád přesnosti dané implementace schématu (22) a to na základě integrace sady trajektorií částic pro různé časové kroky (v analytickém poli válcové sondy, bez srážek). Jedná se skutečně o metodu druhého řádu?

Závěrem mohu konstatovat, že autor prokázal schopnost jasně formulovat a řešit složité fyzikální problémy adekvátními metodami a prokázal schopnost samostatné vědecké práce. Proto práci pana Štěpána Roučky doporučuji k obhajobě a navrhuji, v případě jejího úspěšného obhájení, udělit autorovi akademický titul PhD.

V Brně, 16. srpna 2012

Zdeněk Bonaventura