

Mgr. Roman Čurik, PhD.
Ústav fyzikální chemie
J. Heyrovského AVČR, v.v.i.
Dolejškova 3, 18223 Praha 8

OPONENTSKÝ POSUDEK DISERTAČNÍ PRÁCE

Autor práce: Mgr. Jiří Eliášek

Název práce: Nízkoenergetické procesy při srážce $H + H^-$

Předložená práce je věnována studiu srážek neutrálních atomů vodíku s jejich zápornými ionty. Součástí práce je studium následujících procesů, ke kterým při zmíněných srážkách dochází: asociativní odtržení, kolizní odtržení, přenos náboje a nakonec elastický rozptyl. Práce představuje rozšíření předchozí práce školitele tím, že do svého fyzikálního modelu zahrnuje nový rezonanční (a vázaný) stav $^2\Sigma_g^+$. Disertační práce se skládá z úvodu, tří kapitol a závěru v podobě výhledů pro budoucnost a vylepšení použitých metod. Práci uzavírají 2 přílohy a DVD s detailními daty provedených výpočtů.

Úvodní kapitola uvádí čtenáře do problematiky, představuje studovaný systém a přehledným způsobem shrnuje experimentální a pak teoretické práce v oblasti srážek neutrálních atomů se zápornými atomovými ionty. Text plynule přechází k studované srážce $H + H^-$ a taky srozumitelně definuje předchozí výsledky, na kterých bude tato práce stavět. Kapitola dokazuje, že doktorand provedl pečlivou rešerši odborné literatury a získal dobrou orientaci v problematice.

Druhá kapitola sumarizuje teoretický aparát, který se k řešení srážky $H + H^-$ použije. Jedná se o komplikovaný, neadiabatický, elektronicko-jaderný problém, který se řeší ve 2 krocích. V prvním kroku se řeší elektronická část Hamiltoniánu při zafixovaných jádrech. Autor navíc, v rámci nelokálního modelu, ukazuje jak se elektronický prostor za pomoci projekční techniky separuje na dvě ortogonální části. Tady se osobně poprvé setkávám s formulací s více než jedním diskrétním stavem, i když pak se pak z důvodu symetrie diskrétních stavů celý problém separuje na dva nezávislé výpočty. Ve druhém kroku je poměrně detailně popsáno řešení nukleárního Hamiltoniánu. K tomu je použit rozvoj do parciálních vln a soustavy Lippmann-Schwingerových rovnic jsou řešeny kombinací Schwingrovho variačního principu a Lanczosovy iterativní metody. Tato metodika byla v minulosti vyvinuta ve skupině školitele. Tuto kapitolu by výrazně vylepšil komentář doktoranda, ve kterém by specifikoval jakým způsobem přispěl k rozšíření již existujících kódů ve skupině.

Třetí a čtvrtá kapitola představují numerické modely pro $H + H^-$ a jejich využití ve formě výpočtů a výsledků. Výsledky jsou uvedeny pro asociativní odtržení, kolizní odtržení, izotopický efekt, přenos náboje a elastický proces. Zkoumána je také závislost účinných průřezů na energii odtržených elektronů a na konečném momentu hybnosti molekuly. Autor se snaží fyzikálními argumenty objasnit charakter dosažených výsledků. Dal si práci a svoji argumentaci podporuje i pomocnými a dodatečnými obrázky. Velice pozitivně působí jeho úspěšný pokus o klasický odhad účinných průřezů asociativního odtržení. Kapitola je poměrně detailní a osobně ji považuji za velice povedenou. Jedinou výtkou snad je nepřítomnost obrázku, který by přehledně shrnul prahy různých kanálů a tím zjednodušil orientaci ve výsledcích.

V poslední, **páté kapitole** jsou přehledným způsobem shrnuty závěry společně s popisem

výhledových studií a rozšíření metody.

Práce obsahuje nové a originální výsledky pro různé mechanismy, které hrají roli v procesu $H + H^-$. Poprvé vůbec se v ní diskutuje vliv energeticky vyššího stavu iontového stavu $^2\Sigma_g^+$. Výsledky práce naleznou uplatnění především v modelech chemie ranného a současného vesmíru. Některé z výsledků byly publikovány ve dvou člancích mezinárodní úrovně. Tím je dána slušná úroveň disertační práce. Myslím si, že mnoho z výsledků doktorské práce ještě nebylo publikováno a v práci nacházím dostatek materiálu pro alespoň jednu kvalitní teoretickou publikaci.

Po formální stránce je práce napsána přehledně a srozumitelně. Autor se vyhnul rozsáhlým popisům teorie, která by pak nebyla v praktických výpočtech použita. Formálních chyb a překlepů je poměrně málo. Vědecky, předložená práce reprezentuje excelentní výzkum na předních okrajích toho, co bylo pro asociativní odtržení (společně s kolizním odtržením a nábojovým přenosem) teoreticky zkoumáno. Dovolím si tvrdit, že výsledky uvedené v práci představují nejpřesnější teoretické data pro danou reakci. Práce dokazuje **tvůrčí schopnosti a vědeckou pečlivost studenta a splňuje požadavky** kladené na disertační práce doktorského studia. Na tomto základě **doporučuji disertační práci Mgr. Jiřího Eliáška k obhajobě.**

Mgr. Roman Čurík, PhD.

V Praze dne 11. dubna 2014

Dodatek A

Dvě otázky pro studenta:

- 1) Obr. 4.1: Souhlas prezentované teorie a experimentu je lepší pro energie nad cca. 0.05 eV. Máte vysvětlení, proč je souhlas horší pro energie nižší?
- 2) Obr. 4.5: Předpovídáte ostré struktury ve spektrech odtržených elektronů. Jedná se o nefyzikální rezonanční strukturu v důsledku diskretizace kontinua, nebo tyto oscilace mají fyzikální původ? Podpořte svoje argumenty obrázkem s polohou energií diskretních stavů kontinua (slovo „diskretní stav“ tady nemá význam diskretního stavu v nelokálním rezonančním modelu), nebo prahů jednotlivých rotačních kanálů molekuly, atd'.

Dodatek B

Seznam nalezených formálních chyb (bez překlepů a korekcí anglické gramatiky):

- str. 13, 2. řádek zdola: stav H_2^- je doublet. Tj. ($X^2\Sigma_u^+$)
- str. 14, 2. řádek pod obr. 2.1: stav H_2^- je doublet. Tj. ($X^2\Sigma_g^+$)
- str. 18, 1. řádek pod rovnicí (2.27): once \rightarrow ones
- str. 30, 6. řádek zdola: neumím najít kroužky v obr. 3.1
- str. 43, popis k obr. 4.7: Je uvedeno, že se jedná o srážku $H+D^-$, ale v textu na stejné straně, 6. řádku zdola se píše $H+H^-$.
- str. 49, 2. odstavec, 5. řádek: nesrozumitelné číslo obrázku. Pravděpodobně chyba v TeXu.