

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Dávid Hvizdoš

Název práce: Dvourozměrný model disociativní rekombinace

Studijní program a obor: Fyzika, teoretická fyzika

Rok odevzdání: 2016

Jméno a tituly oponenta: Mgr. Roman Čurík, PhD

Pracoviště: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AVČR, v.v.i.

Kontaktní e-mail: roman.curik@jh-inst.cas.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 práce se věnuje přesnému výpočtu disociativní rekombinace modelu, který reprezentuje kationt H_2^+ . Kationt H_2^+ se rozpadá přes tzv. nepřímou disociaci, při které neexistuje déle žijící neutrální stav, ve kterém by se nalétávající elektron mohl zachytit při nízkých srážkových energiích. Nepřítomnost této tzv. rezonance byla dlouhodobě v literatuře považována za příznak nízkých účinných průřezu a výsledné nedůležitosti tohoto procesu. Velké překvapení přinesly až experimenty uskutečněné v posledních dvou dekádách, které ukázaly, že nepřímá rekombinace je stejně důležitá, jako proces přímý.

Teoretické modelování nepřímé rekombinace není v žádném případě rutinní záležitost. Vyžaduje hluboké vědomosti z kvantové mechaniky a teorie rozptylu. Všechny výsledky publikované v literatuře jsou postavené na určitých aproximacích, zejména aproximacích obsažených v metodě zvané „Multi-Channel Quantum Defect Theory“ (MQDT). Cílem projektu diplomové práce je ověřit platnost těchto aproximací za pomoci numericky řešitelného modelu, který neseperuje nukleární a elektronické stupně volnosti. Výpočetní technika posuzovaného projektu využívá metodu „Exterior complex scaling“ a dle mých vědomostí se jedná o první aplikaci této metody na kationty s Coulombickou asymptotikou.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- 1) V tabulce 2.1 na straně 17 je uvedeno, že nukleární vlnová funkce se propaguje v komplexně otočené souřadnici až do vzdálenosti 10.000 bohrů. Asymptotické chování potenciálu je $1/R^4$. Proč je taková vzdálenost potřebná a co definuje rychlost vymizení nukleární vlnové funkce?
- 2) V grafech 2.4 a 2.5 na stranách 21 a 22 je vidět, že se spočtené výsledky stabilizují pro kvadratury s 6 body. Co definuje stabilitu výsledků? Je to vztah řádu kvadratury s řádem polynomu v DVR bazi (definovaném parametrem n_q), nebo jsou to oscilace vlnové funkce, které se zintenzivní pro vyšší energii?
- 3) Z obrázků 2.7 a 2.8 na straně 24 je vidět, že u překryvu vibračních Feshbachových rezonancí (to je název pro struktury v grafech) dochází ke zvednutí disociační pravděpodobnosti o několik řádů. Nejspíš se jedná o konstruktivní interferenci dočasných stavů systému. Pozoroval jste, u vyšší energii, nebo v jiném kanálu, případ interference destruktivní?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

V Praze, 19/08/2016

