

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Václav Alt
Název práce: Resonant collisions of electrons with diatomic molecules
Studijní program a obor: Teoretická fyzika
Rok odevzdání: 2016

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:

Tato na první pohled skromně (a stručně) vyhlížející práce podle mého názoru skrývá velké úsilí diplomanta, který se musel naučit provést řadu netriviálních kroků vedoucích k tomu, aby zcela bez cizích vstupních dat provedl výpočet účinných průřezů pro vibrační excitaci molekuly kyslíku srážkou s elektronem. Ačkoli výpočty jsou provedeny cizími programy, správné vložení vstupních dat a parametrů výpočtu a vyhodnocení kvality výstupu je vysoce netriviální. Kroky provedené diplomantem zahrnují:

- Výpočet elektronové struktury molekuly (pomocí softwarového balíku MOLPRO) pro různé geometrie včetně správného rozmyšlení grupy symetrie požadovaných stavů a kritické zhodnocení výsledků srovnáním s dostupnými experimentálními daty.
- Výpočet rozptylu elektronu na molekule s fixovanými jádry (pomocí Londýnského balíku programů pro metodu R-matice) a určení polohy a šířky nejnižší rezonance, přičemž velká pozornost je věnována nastavení parametrů výpočtu tak, aby byly výsledky konzistentní s daleko přesnějšími daty z programu MOLPRO.
- Výpočet vibrační rezonanční dynamiky pro modely určené z předchozích dvou kroků, snaha určit nepřesnost výsledných účinných průřezů v důsledku vstupních dat z těchto kroků a kritické srovnání s experimentem.

Rád bych zdůraznil, že podle mého názoru by se na jednom každém z těchto kroků dala založit diplomová práce a diplomant nejen provedl všechny tři, ale navíc ve výpočtu zahrnul spin-orbitální korekce, které jsme zatím v naší skupině do podobných výpočtů nezahrnovali.

Také po formální stránce shledávám práci pečlivě provedenou. Našel jsem jen pár drobných formulačních nepřesností a typografických chyb, které nestojí za podrobnější vypisování. Po jistém rozšíření textové části by práce snadno mohla být publikována v recenzovaném časopise, i když ze závěru je patrné, že ambicí autora je ještě vylepšit část týkající se vibrační dynamiky.

Práci plně doporučuji jako diplomovou.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Pokud bude u obhajoby čas, mohl by diplomant vysvětlit proč v prvním peaku v obrázku 3.3 chybí spin-orbitální rozštěpení.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Uhách dne 14. 8. 2016

Martin Ušák