

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího       posudek oponenta  
 bakalářské práce       diplomové práce

Autor: Bc. Jan Šenk  
Název práce: Model of coherent electron dynamics in molecules  
Studijní program a obor: Teoretická fyzika  
Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly oponenta: doc. RNDr. Karel Houfek, Ph.D.  
Pracoviště: Ústav teoretické fyziky MFF UK  
Kontaktní e-mail: Karel.Houfek@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:

Jan Šenk se ve své práci zabývá problémem koherentní dynamiky elektronů v molekulách. Práce je motivována procesem fotoionizace molekul ultrakrátkými pulzy, při kterých mohou vznikat koherentní stavy molekulového iontu. V práci je problém dekoherence takovýchto stavů studován na modelovém dvourozměrném systému s jedním elektronovým a jedním jaderným stupněm volnosti, který uchazeč vyřešil numericky pomocí vlastního programu. V rámci tohoto modelu pak mohl přesně spočítat veličiny, které se používají jako míra koherence mezi elektronovými stavy v molekulách.

Práce je napsána přehledně s důrazem na pochopení a ilustraci pojmu koherence kvantových stavů. V první teoretické části jsou vyloženy potřebné pojmy a mechanismy dekoherence, v druhé části je představen modelový systém a podrobný popis jeho numerického řešení a nakonec jsou ve třetí části diskutovány výsledky pro několik modelových případů a modelů pro kationt  $\text{H}_2\text{O}^+$ . Podrobné diskuse výsledků pro různá nastavení parametrů dvourozměrného modelu, která dávají kvalitativně rozdílná chování, považuji za velmi přínosné, neboť umožňují pochopit jednotlivé mechanismy dekoherence jako je např. „dephasing“ a získat tak hlubší vhled do problematiky dekoherence elektronových stavů způsobené jadernou dynamikou v molekulách.

Práce je napsána výbornou angličtinou s velmi malým počtem překlepů a lze jí vytknout jen několik drobností, např.

- nerovnost (2.49) platí pro speciální volbu parametrů  $m$  a  $\omega$ , které však nejsou specifikované,
- ne příliš dobře zvolené barvy v grafech ukazujících míry koherence stavů, kde je někdy obtížné na první pohled určit, která křivka odpovídá které veličině,
- popisky obrázků 3.7, 3.9, 3.11 a 3.12 by měly pro snazší orientaci obsahovat informaci, ke kterému modelu se výsledky vztahují,
- na obrázcích 3.9 a 3.11, panely (c) a (d), jsou, zdá se, použity různé škály, aniž by byly blíže specifikovány, čímž je vyvolán dojem, že jeden ze stavů je výrazně více obsazen než druhý, i když tomu tak nemusí být.

Celkově považuji předloženou práci za velmi zdařilou splňující všechny požadavky na diplomovou práci.

## Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuse:

Pro řešení elektronové části modelového problému byla použita báze skládající se ze dvou sad Hermitových funkcí odpovídajících harmonickým oscilátorům, ze kterých byl zkonstruován interakční potenciál. Výsledná báze je však neortogonální a vede k problému s lineární závislostí. Nezvažoval jste použití báze skládající se pouze z jediné sady Hermiteových funkcí, např. pro harmonický oscilátor umístěný „mezi“ těmi použitými, kde by tyto problémy nebyly? Má použití zvolené báze nějaké výhody?

V kapitole 3.2.2, popisující model s proměnnou minimální energií jedné z jam interakčního potenciálu, je podrobně diskutován pokles a opětovný vzrůst elektronové koherence do času 90 a.u., ale podstatně méně je diskutován náhlý další vzestup koherence s maximem v čase 280 a.u. Lze na základě výsledků uvedených v práci usoudit na příčinu tohoto druhého „návratu“ koherence?

Nakonec jedna obecnější otázka. Jaký význam má dekoherence elektronových stavů vlivem jaderné dynamiky pro experiment? Je možné experimentálně rozlišit, zda v systému dochází k rychlé dekoherenci elektronových stavů, nebo naopak jejich koherence přetrvává?

**Práci**

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

**Navrhuji hodnocení stupněm:**

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl

Místo, datum a podpis oponenta: V Praze dne 2.6.2023