

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

posudek vedoucího
 bakalářské práce

posudek oponenta
 diplomové práce

Autor/ka: Bc. Matěj Konvalinka

Název práce: Multichannel models of Siegert states in electron collisions with molecules

Studijní program a obor: Teoretická fyzika FTFP

Rok odevzdání: 2024

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Mgr. Zdeněk Mašín, PhD

Pracoviště: Ústav teoretické fyziky

Kontaktní e-mail: zdenek.masin@matfyz.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/opponenta:

Předkládaná práce se zabývá studiem tvorby tzv. Siegertových stavů v kvantově-mechanických systémech. Cílem práce bylo zejména vyvinout a otestovat metodu hledání a manipulace se Siegertovými stavy pomocí tzv. R-maticového přístupu. Jedná se o práci, která rozvíjí studentovu bakalářskou práci.

První část je věnovaná vývoji metody na bázi R-matice pro řešení vícekanálového rozptylového problému, včetně algoritmu pro hledání Siegertových stavů na Riemannově ploše S-matice. K ověření správnosti implementace student použil srovnání s analyticky řešitelným dvoukanálovým problémem. V této části student rovněž úspěšně implementoval metodu odebrání zvoleného Siegertova stavu z Hilbertova prostoru, což umožňuje studium jeho přímého vlivu na pozorovatelné veličiny.

V závěru první části student úspěšně ukázal aplikovatelnost metody i na interakce s dlouhodobou Coulombickou složkou. Toto byl důležitý krok pro budoucí aplikaci metody na fotoionizaci molekul.

Druhá část práce se věnovala implementaci takto otestované metody do výpočetního kódu UKRmol+ pro výpočty srážek elektronů s molekulami a pro molekulární fotoionizaci. Metoda hledání Siegertových stavů již byla v tomto kódu k dispozici, ale pouze v limitované podobě pro neutrální molekuly a pro elastické srážky. Student stávající metodu úspěšně rozšířil na neelastické procesy a Coulombická kontinua. Zde student prokázal schopnost rychle se zorientovat v komplexním výpočetním kódu.

Během řešení celé práce student pracoval samostatně a iniciativně a z mé strany nebyla potřeba téměř žádná asistence s vývojem kódu. Práce byla završena aplikacemi na analýzu Siegertových stavů z výpočtů pro různé molekuly, které jsou současně aktivně studované v naší skupině. Jedná se zejména o molekuly CO₂, N₂O, HCOOH a její dimer. Některé z těchto výsledků zahrneme do právě připravované publikace. Studentem vyvinutý kód najde mnoho aplikací v budoucím výzkumu.

Celkově práci studenta hodnotím jako vynikající a nemám k ní zásadní připomínky. Práce je napsána srozumitelnou angličtinou na úrovni odpovídající diplomové práci.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Do práce jsme nestihli zapracovat výsledky výpočtů pro parciální šířky rezonancí v neelastických výpočtech. Můžete krátce představit výsledky pro modelový systém a pro CO₂?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Praha, 1.6.2024

Místo, datum a podpis vedoucího/opponenta: