

# 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: Fyzika, Teoretická fyzika (FTFP)  
Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly vedoucího: doc. RNDr. Přemysl Kolorenc, Ph.D.  
Pracoviště: Ústav teoretické fyziky, MFF UK  
Kontaktní e-mail: premysl.kolorenc@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:

Cílem práce bylo vytvoření a implementace jednoduchého, numericky exaktně řešitelného modelu pro studium problému dekoherence elektronové dynamiky v molekulách v důsledku interakce s vibračními stupni volnosti. V původním plánu bylo vytvořit model s jedním elektronovým a dvěma vibračními stupni volnosti. Toto se z časových důvodů nepodařilo naplnit, implementována byla jen varianta „1+1“. Tento nedostatek však byl více než vykompenzován úrovní kvalitativního rozboru problému dekoherence, který byl s použitím modelu proveden.

V první kapitole práce kandidát prezentuje obecnou teorii užívanou v literatuře ke studiu daného problému, především formalismus operátoru hustoty, a diskutuje vlastnosti a vzájemnou komplementaritu různých veličin použitelných jako míry koherence. Pozornost je věnována také důsledkům a nejednoznačnostem spojeným s různými možnostmi volby elektronové báze (diabatická vs. adiabatická). Dále kandidát prezentuje tři hlavní známé mechanismy dekoherence elektronové dynamiky v důsledku vazby na pohyb jader - depopulaci elektronových stavů v důsledku neadiabatické vazby, ztrátu překryvu vibračních vlnových balíků, a „rozfázování“. Hodnota této kapitoly je především v netriviální kritické syntéze dostupné literatury, ve které výše zmíněné nejednoznačnosti typicky diskutovány nejsou, ačkoliv se přístupy různých autorů liší.

Druhá kapitola se věnuje popisu modelu a technickým detailům jeho numerického řešení. Jádrem práce s hlavními původními výsledky je potom kapitola třetí, ve které je kód aplikován na různé modelové situace. Práce dokumentuje, že vytvořený model je schopen dobře popsat všechny tři mechanismy dekoherence. Na příkladu jednotlivých vibračních módů molekuly vody demonstruje, že je model dostatečně flexibilní, aby alespoň semi-kvantitativně popsal i realistické systémy. Hlavní hodnota modelu je v této fázi nicméně v možnosti kompletního rozboru a vizualizace řešení. V tomto směru bych vyzdvihl užitečnost Wignerovy distribuce, s jejíž pomocí práce objasňuje do té doby (alespoň pro mě) poměrně esoterický mechanismus „rozfázování“.

Uchazeč vypracoval projekt zcela samostatně, konzultace se postupně zaměřovaly pouze na diskuse zajímavých fyzikálních problémů, způsobu jejich řešení ani technickým aspektům jsme se věnovat nemuseli. Jazyková i grafická forma práce je na vynikající úrovni a plně odpovídá požadavkům na diplomovou práci. Navrhuji hodnocení stupněm výborně.

### Práci:

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

### Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl

Místo, datum a podpis vedoucího:



Praha, 29. května 2023