

Posudek habilitační práce

Mgr. Michal Fárník, Ph.D., DSc.: *Molecular beam investigations of free clusters and nanoparticles: Processes of atmospheric and biophysical relevance*

Habilitační práce je koncipována jako soubor 16 prací publikovaných v posledních letech v předních fyzikálně chemických časopisech jako je Phys. Chem. Chem. Phys. nebo J. Phys. Chem. Publikace jsou uvedeny poměrně podrobným souhrnem, který vysvětluje metody používané v laboratoři Dr. Fárníka a poskytuje náhled na hlavní výsledky v pěti kapitolách.

Výzkum Dr. Fárníka lze rozdělit na vývoj nových metod pro studium klastrů a fyzikálně-chemických procesů v klastrech a na samotné aplikace. Dr. Fárník vyvinul nový přístup na studium dynamiky klastrů (Velocity Map Imaging, kapitola 3.1). Jeho práce v oblasti detekce klastrů pomocí sodíkového dopování přispěly k porozumění tohoto procesu a ukázaly, že pro atmosféricky relevantní procesy studované v klastrech bude nutné hledat jiné způsoby detekce (kapitola 3.2). Část práce je také věnována studiu vzniku a růstu klastrů (kapitola 3.4). Výsledky ukazují fundamentální rozdíly mezi klastry tvořené vzácným plynem a klastry tvořené vodou. Na jedné straně máme nepolární sférické částice a na druhé straně nepravidelné útvary tvořené polárními molekulami, což se zásadním způsobem projevuje v jejich interakci s externími molekulami a ovlivňuje chemii, kterou lze na nanočásticích pozorovat. Aplikační studie bych rozdělila do dvou částí. Znamější práce jsou z oblasti studia fotochemie halogenovodíků v klastrech, které byly poslední době rozšířeny na studium freonů (kapitola 3.3). Druhou oblast tvoří práce věnované studiu organických aromatických molekul (kapitola 3.5).

Myslím, že práce z laboratoře Dr. Fárníka lze jasně identifikovat a lze říct, že tvoří ucelenou „školu“. Lze očekávat, že studium chemie, která probíhá v klastrech, nebo na jejich povrchu, se bude rozvíjet a že studie Dr. Fárníka budou tvořit základ pro volbu metod a pro správně zvolený postup i v jiných laboratořích. K habilitační práci nemám žádné námítky a doporučuji ji k obhajobě. K obhajobě mám následující otázky:

1. V kapitole 3.5 je povrch potenciální energie anilinu přirovnáván k úvodnímu příkladu s pyrrolem. Do jaké míry se změnil charakter $\pi\sigma^*$ stavu a jakou roli hraje $n\pi^*$ stav u anilinu ve srovnání s pyrrolem?

2. Otázka se týká distribuce kinetické energie eliminovaných vodíkových atomů po fotoexcitaci pyrrolu. Velmi zjednodušeně lze říct, že kinetická energie H atomů po excitaci více energetickými fotony ($\lambda = 193$ nm) je nižší než kinetická energie H atomů vzniklých po excitaci méně energetickými fotony ($\lambda = 243$ nm), což je vysvětleno vznikem fragmentu v excitovaném stavu v prvním případě. Bylo uvažováno, že H atom se může odštěpit také z uhlíku? Jak by vypadala distribuce KE v tomto případě?
3. Záchyt (“pickup”) molekul vodnými vs. argonovými klastry: Bylo by možné udělat zobecnění pro předpověď záchytu molekul na klastrech v závislosti na jejich polárnosti? Pokud vodné klastry nemají tendenci zprostředkovávat příležitost pro chemické reakce mezi absorbovanými molekulami, jaké jiné klastry mohou být relevantní? Chystáte se na výzkum tímto směrem?

V Neratovicích, 31. prosince 2015

Jana Roithová