

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího       posudek oponenta  
 bakalářské práce       diplomové práce

Autor/ka: **Daniel Herman**  
Název práce: Elektron-fononová vazba ve finitních systémech s více chromofory  
Studijní program a obor: Fyzika – Obecná fyzika  
Rok odevzdání: 2020

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: **RNDr. Václav Profant, Ph.D.**  
Pracoviště: Fyzikální Ústav UK, MFF UK  
Kontaktní e-mail: profant@karlov.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/opponenta:**

Bakalářská práce pana Daniela Hermana se zabývá studiem otevřených kvantových systémů a konstrukcí nových metodologických přístupů, které by umožnili přesnější výpočty jejich dynamického chování. Otevřené kvantové systémy jsou kvantově mechanické systémy interagující se svým okolím či lázní, které jsou taktéž popsány kvantově. Tyto interakce jsou mnohdy stěžejní pro korektní popis vývoje studovaného systému (kvantová disipace), avšak popis lázně či prostředí musí být kvůli jejich velikosti a komplikovanosti pouze aproximativní. Přesné řešení příslušných pohybových rovnic pro konkrétní systém a prostředí je pak velmi obtížné. Současně používané přibližné metody často jen omezeně popisují relaxaci, přenos energie a dekoherenci indukované vazbou mezi molekulárním systémem a fononovou lázní na subpikosekundové časové škále, což přináší problémy při srovnání s výsledky experimentů nelineární optické spektroskopie.

V předkládané práci se kandidát zaměřil na odvození a následné ověření přesnějšího popisu dynamiky konečných systémů, než jaké poskytují současné přibližné metody. Práce je koncipována jako základní teoretický výzkum a kromě odvození nového modelu obsahuje též implementační část, kde je výpočet na základě nového ansatz pro časový vývoj lázně konfrontován s řešeními pomocí Schrödingerovy a Liouvilleovy-von Neumannovy rovnice. Je zde ještě značný prostor pro další vylepšování, ale získané výsledky pro dimer a trimer jsou velmi slibné.

Práce je zpracována jako tematicky ucelený text, je logicky strukturovaná a má standardní rozsah (52 stran i se všemi přílohami, z toho vlastní text práce 34 stránek). Celkový dojem práce je velmi dobrý. Oceňuji použití angličtiny, která je na velmi dobré úrovni a zpřístupňuje práci i případným zahraničním čtenářům. Práce je psaná srozumitelně a jasně, grafická úroveň odpovídá požadavkům kladeným na práci této úrovně. V textu je možné narazit na menší množství překlepů a interpunkčních chyb (např. „femtosenconds“ a „qauntum“ již na straně 4, atd.), které však nesnižují celkovou hodnotu práce.

Práce je členěna standardně na šest oddílů a doplněna o seznamy použité literatury a zkratk a rozsáhlé přílohy. Chybí zde seznam obrázků, který má být formálně součástí práce. První tři oddíly představují teoretickou část práce a zabývají se postupně úvodem do problematiky otevřených kvantových systémů, popisem používaného formalismu a teoretických nástrojů, a seznámení s používanými modely. Čtvrtá část je věnována kandidátem odvozené teorii - formulaci zjednodušujícího ansatz pro časový vývoj lázně a jeho inkorporaci do výpočetního schématu. Pátá kapitola pak obsahuje výsledky numerických simulací, kde jsou výsledky získané na základě ansatz porovnávány s jinými přístupy. Získané výsledky jsou stručně shrnuty v poslední šesté části práce.

Předkládaná práce vysoce splňuje požadavky kladené na práci této úrovně, a proto ji doporučuji k obhajobě s hodnocením výborně.

## **Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

V obrázku 5.1 kandidát porovnává časovou výpočetní náročnost prvků hamiltoniánu, Franck-Condonových faktorů a celkové dynamiky na velikosti báze. Jaká konkrétně byla výpočetní náročnost dynamik v obrázcích 5.2 až 5.13 při vzájemném srovnání přesných výpočtů (na základě evolučních operátorů a Liouvilleovy-von Neumannovy rovnice) a výpočtu využívajícího ansatz pro časový vývoj lázně?

**Práci** doporučuji nedoporučujiuznat jako ~~diplomevou~~/bakalářskou.**Navrhuji hodnocení stupněm:** výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze 31. srpna 2020