

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Václav Kubíček
Název práce: Modelování kvantové dynamiky v anharmonických potenciálech pomocí modelu interagujících harmonických oscilátorů
Studijní program a obor: Obecná fyzika
Rok odevzdání: 2022

Jméno a tituly vedoucího: doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D.
Pracoviště: UTF MFF UK
Kontaktní e-mail: Martin.Cizek@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:

Cílem této práce bylo studovat adiabatickou aproximaci pro model dvou či několika vibronicky interagujících harmonických potenciálů. Student se naučil nezbytné pojmy z teorie popisu vibrací molekul a naučil se numericky přesně řešit problém na stacionární stavy v potenciálové jámě či v několika vibronicky svázaných potenciálových jámách. Výsledky poté porovnával s Bornovou-Oppenheimerovou aproximací pro stejný model. Oproti původnímu plánu, který směřoval více k aplikacím a studiu aproximací se student z vlastní iniciativy více věnoval detailnímu studiu numerické přesnosti implementovaných numerických metod.

S prací kolegy Kubíčka jsem byl spokojen. Samostatně implementoval všechny numerické metody, velice pečlivě je testoval a iniciativně si hledal další informace v literatuře.

Práce je pečlivě napsána jen s malým množstvím překlepů a rovněž grafické stránce prezentace výsledků byla věnována patřičná pozornost snad s výjimkou některých popisků os obrázků, které by se ještě mohli trochu zvětšit. Samotnému textu práce by prospěla ještě jedna iterace korektur. Některé nepřesnosti jsme ještě úplně nevychytili, ale s výjimkou vysvětlení rozdílu mezi adiabatickou a diabatickou reprezentací v odstavci 1.2.2 jde vesměs o méně podstatné detaily.

Celkově u mě převažuje dobrý dojem z práce, a práci plně doporučuji uznat jako bakalářskou a hodnotit stupněm výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Na konci strany 4 se objevuje věta: „U Morseho potenciálu ... je možné sledovat pro nízké N šestnáct stavů, vyšší stavy se začínou objevovat až s velkým počtem bázových funkcí.“ Mohl byste vysvětlit, případně ilustrovat čísla či obrázkem? Matice hamiltoniánu přece musí mít tolik vlastních čísel kolik je rozměr báze, takže by jich mělo být N . Co se děje s vyššími stavy?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze 20. 5. 2022