

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Ondřej Čertík

Název práce: Numerical solution of the radial Dirac equation in pseudopotential construction

Studijní program a obor: fyzika

Rok odevzdání: 2006

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: RNDr. Ondřej Šipr, CSc.

Pracoviště: Fyzikální ústav AV ČR, Cukrovarnická 10, Praha 6

Odborná úroveň práce:

X vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

téměř žádné X vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

originální X původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Použité metody:

nestandardní standardní X obojí

Aplikovatelnost:

X přínos pro teorii přínos pro praxi bez přínosu nedovedu posoudit

Rozsah práce:

veliký X standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

vynikající X velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

X vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/opponenta:

Práce se týká numerického řešení radiální Diracovy rovnice, ve formě vhodné pro další použití pro konstrukci pseudopotenciálů. Kromě prezentace (nepříliš velkého počtu) numerických výsledků práce obsahuje velmi podrobné odvození radiální Diracovy rovnice a diskusi některých numerických aspektů – zejména co se týká asymptotiky v počátku i v nekonečnu. V práci jsem nenašel podstatnější věcné chyby, numerické výsledky vypadají rozumně.

Třebaže práce obsahuje původní výsledky (jejichž získání nepochybně vyžadovalo podstatné programátorské úsilí), její hlavní přínos vidím v její úvodní *de iure* kompilační - části. Autor v ní totiž předkládá podrobné odvození radiální Diracovy rovnice, se všemi detaily a „mezivýpočty“, které se ve většině textů velkoryse přehlízejí. Autor se nespokojuje se „standartním“ opisováním rovnic z monografií, nepřejímá předkládaná odvození mechanicky, snaží se odstranit všechny logické skoky. Zejména oceňuji appendix 8.2, který by se mohl stát velmi užitečnou pomůckou pro PhD studenty zabývající se Diracovou rovnicí (i pro jejich školitele). Líbí se mi i srovnání konvencí použitých v různých monografiích.

Práce by mohla být stylově i formálně učešnější: např. autor občas napřed uvede symboly a veličiny a teprve potom je objasní (str.14, 22). Některá vyjádření o teorii funkcionálu hustoty jsou nepřesná [V_{xc} je funkcionálem hustoty a nikoliv její funkcí (str.6), pro popis některých jevů pouze s hustotou nevystačíme (str.8)]. Občasné překlepy či přehlédnutí neruší, ovšem ze třetí rovnice na str.27 by plynulo, že $1 \text{ H} = \frac{1}{2} \text{ Ry}$. Místy trošku drhne angličtina (či obecně styl vyjadřování) – např. poslední odstavec na str.20 mi není obsahově zcela jasný. Jako celek je však práce velmi dobře srozumitelná, místy přímo čtivá.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

V části 6.1 jsou prezentovány výsledky numerických výpočtů. Energie E_2 spočtená nerelativisticky by neměla záviset na vedlejších kvantovém čísle ℓ (jak autor sám píše), přesto však zjevně závisí. Tato závislost je v řádu 10^{-3} a dle všeho je způsobena numerickými chybami. Přijdou mi však poměrně velké - myslím, že dosáhnout lepší přesnosti by neměl být problém. Nebo je v tom něco jiného?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze 29. srpna 2006