

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 Jiří Vackář CSc

Pracoviště: Fyzikální ústav AVČR, Na Slovance 2, Praha 8

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

Použité metody:

nestandardní standardní obojí

Aplikovatelnost:

přínos pro teorii přínos pro praxi bez přínosu nedovedu posoudit

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:

Předmětem práce je numerické řešení radiální Diracovy rovnice ve specifickém případě za účelem dalšího využití při konstrukci *all-electron (environment-reflecting) ab-initio* pseudopotenciálů (viz např. Vackář, Šimůnek, *Phys.Rev.B67 (2003) 125113*) a výpočtech core-level shiftů (např. Šimůnek, Vackář, Kunc, *Phys.Rev B71 (2005) 045110*). Hlavním účelem práce bylo nahradit stávající části kódu pro tyto výpočty novými rutinami, při zachování kompatibility parametrů a prostorových integračních sítí, umožňujícími konsistentně a za identických podmínek generovat jak nerelativistická, tak skalárně relativistická a plně relativistická (včetně spin-orbitální interakce) řešení Kohn-Shamových rovnic. To je důležité z hlediska návaznosti generovaných pseudopotenciálů na různé typy *ab-initio* kódu pro výpočty elektronových stavů a vlastností materiálů v rámci DFT (teorie funkcionálu hustoty).

Autor prokázal schopnost se seznamovat s pro něho dosud neznámými oblastmi teorie (Diracova rovnice, teorie funkcionálu hustoty) i s cizím, pro něho neznámým programovým kódem, a výborně splnil uvedený hlavní cíl práce. Prokázal navíc mimořádný zájem o teorii. Nad rámec nezbytné práce programátorské a práce s vyřešením specifických numerických problémů se nespokojil s pouhým pasivním převzetím rovnic a jejich asymptotiky z literatury. Při snaze o hlubší pochopení objevil v dosud publikované literatuře překvapivé množství mezer, logických skoků, vágních formulací, chyb a doslovného přebírání textu ze starších pramenů včetně zmíněných nedostatků. Tím cennější je v práci prezentované detailní odvození radiální Diracovy rovnice včetně diskuse asymptotického chování kolem počátku a v nekonečnu, které je výsledkem autorovy samostatné mravenčí práce s porovnáváním různých pramenů a překonáváním jejich nedostatků.

Práce je přehledná a čtivá i přes některé drobné nedostatky a omyly, kterých by bylo možno se při větší pečlivosti a dostatku času před odevzdáním práce vyvarovat, které však v daném kontextu jsou většinou nevýznamné (např. nepřesné zjednodušující formulace týkající se teorie funkcionálu hustoty). Místy autor zabíhá do detailních poznámek a postřehů týkajících se dílčích numerických problémů, které pro něho byly nové a překvapivé, které však pro ty, kdo se zabývají pseudopotenciálovými DFT výpočty, jsou chronicky známé a pro ostatní stěží pochopitelné. To však nepovažuji za nedostatek. Jak už jsem uvedl, v jiných případech je právě to, že autor detailně diskutuje body zamlčované nebo vágními formulacemi odbývané v publikacích, významným přínosem zde posuzované práce.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Z pozice vedoucího práce jsem všechny otázky a náměty mohl uplatnit před dokončením práce. Žádné další nemám.

Práci

doporučuji nedoporučuji
uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha 4.9.2006 RNDr. Jiří Vackář CSc