

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Jaroslav Hofierka

Název práce: Lattice energies of molecular solids

Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika

Rok odevzdání: 2017

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Mgr. Jiří Klimeš, Ph.D.

Pracoviště: Katedra chemické fyziky a optiky, MFF UK

Kontaktní e-mail: klimes@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/oponenta:

Ve své práci se pan Hofierka zabýval výpočtem vazebných energií molekulárních krystalů pomocí kvantově-chemických metod. Pro tyto výpočty je možné použít buď periodické okrajové podmínky, nebo tzv. fragmentový přístup, kdy se celková energie sečte z vazebných energií dvojic a korekcí trojic, čtveřic, atd. molekul. V principu by měly oba přístupy vést ke stejnému výsledku, v praxi je však velmi obtížné nalézt shodu v publikovaných datech a ta se liší i o desítky procent. Pro pochopení toho, proč tomu tak je, vypočetl pan Hofierka vazebné energie čtyř různých krystalů pomocí obou přístupů a dvou různých kvantově-chemických metod: Hartree-Fock a poruchové teorie v druhém řádu (MP2). Ukázal, které příspěvky je nutné zahrnout, a které parametry je nutné zkonvergovat, aby obdržel shodu. Tyto poznatky jsou nesmírně důležité a budou následně využity. Navíc výsledky, které pan Hofierka obdržel představují vůbec první spolehlivé vazebné energie molekulárních krystalů pro metodu MP2 s využitím periodických okrajových podmínek. Pomocí fragmentového přístupu dále pan Hofierka vypočetl vazebnou energii pro metodu spřažených klastrů (CCSD(T)), kterou není možné použít v periodických okrajových podmínkách vzhledem k její vysoké výpočetní náročnosti. Ukázal tak, jakým způsobem je možné obdržet vazebné energie o referenční kvalitě.

Při řešení pracoval pan Hofierka samostatně, bezproblémově a sám nastudoval a použil některé pokročilé techniky pro kvantově-chemické výpočty. Samostatně si také nastudoval použití přiblížení náhodné fáze, kterou bylo nutné použít pro obdržení zkonvergovaných MP2 energií v periodických okrajových podmínkách. Výpočty na superpočítači Salomon zvládl také bez obtíží. Nakonec bych rád vyzdvihl vysokou úroveň angličtiny pana Hofierky.

Práce přinesla řadu cenných výsledků, které nebude obtížné publikovat v kvalitním časopise, a tudíž ji hodnotím stupněm výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha, 12. 6. 2017