

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Jiří Klimeš

Název práce: Inelastic transmission of current through molecular bridge

Studijní program a obor: Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2007

Jméno a tituly oponenta: Prof. RNDr. Lubomír Skála, DrSc.

Pracoviště: KCHFO

Kontaktní e-mail: skala@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:

- velký 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:

Práce je zaměřena na zajímavou a aktuální problematiku z molekulární elektroniky, zkoumají se povrchové a transportní vlastnosti různých zajímavých modelů. Předložená práce je vynikající, autor se velmi dobře vypořádal jak s teoretickým úvodem do problematiky a popisem metod, tak s provedením konkrétních výpočtů. Grafická úroveň práce i úroveň angličtiny je rovněž velmi dobrá. Stálo by za to uvažovat o publikaci některých výsledků. V práci se počítá mimo jiné hustota stavů pro krychlové částice zlata s FCC mříží. Za zmínku stojí, že pro poněkud jednodušší problém s funkcemi báze s-typu (HMO) je takový problém řešitelný dokonce analyticky [O. Bílek, L. Skála, From finite to infinite crystals: Analytic solution of simple tight binding model of finite SC, FCC and BCC crystals of arbitrary size, Czech. J. Phys. B28(1978), 1003-1019.]

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Zobecněný vlastní problém typu $Hc=ESc$, (2.7)-(2.9), se obvykle řeší rozkladem S na součin dvou trojúhelníkových matic (známé algoritmy `reduc1` a `rebaka`), což je rychlejší a přesnější než rozklad s pomocí odmocnin matic. U problémů nepříliš vysokého řádu na tom samozřejmě příliš nezáleží.

Zkoumané problémy by bylo možné řešit i s pomocí standardních přesnějších kvantově-chemických metod. Uvažuje se o tom?

Závislost vlastností systému na jeho tvaru je zajímavá otázka, ve které lze dospět k některým vzorcům dosti obecného charakteru [viz např. H. Muller, C. Opitz, L. Skála, The Highly Dispersed Metal State - Physical and Chemical Properties, J. Mol. Catalysis 54(1989), 389-405]. Bude se autor těmito problémy i nadále zabývat?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: 15.5.2007 Lubomír Skála

