

# 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 vedoucího/opponenta: RNDr. Martin Čížek, PhD  
Pracoviště: Ústav teoretické fyziky, MFF UK  
Kontaktní e-mail: cizek@mbox.troja.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:**

Diplomant vytvořil vlastní software pro výpočty elektronických vlastností kovových struktur v rámci *state of the art* modelů těsné vazby. Programy otestoval výpočtem pásové struktury a hustoty stavů v nekonečném krystalu zlata. Hlavním cílem práce bylo provést výpočet povrchových Greenových funkcí pro nekonečný povrch a pro malé klastry kovu na nekonečném povrchu. Greenovy funkce jsou důležitou součástí výpočtu transportních vlastností můstku spojujícího dva vodiče. Výsledky této diplomové práce budou součástí připravovaných publikací. Diplomant v úvodní kapitole poměrně důkladně shrnul současný stav výzkumu takovýchto můstků jak experimentálními tak teoretickými metodami a to pro čistě kovové můstky i pro můstky obsahující jednotlivé organické molekuly (molekulární elektronika). Zcela z vlastní iniciativy a samostatně prostudoval modifikaci metody těsné vazby pro selfkonsistentní popis poklesu potenciálu na můstku a provedl výpočet transmisního koeficientu pro průchod elektronu atomovými řetízky. Dále v jednoduchém modelu diskutoval vliv tvaru funkce lokální elektronové hustoty na transport molekulou.

Po formální stránce je práce vypracována pečlivě a obsahuje jen malé množství chyb, především stylistických neobratností způsobených nezkušeností autora s odborným stylem v angličtině. Práci plně doporučuji uznat jako diplomovou.

### **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: V Praze 24. května 2007

