

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

posudek vedoucího X posudek oponenta
X bakalářské práce diplomové práce

Autor: Kateřina Smítalová

Název práce: Kvantově-mechanické výpočty hydridů přechodných kovů; porovnání vibrační analýzy s experimentálními daty

Studijní program a obor: Fyzika, Obecná Fyzika

Rok odevzdání: 2018

Jméno a tituly oponenta: doc. RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.

Pracoviště: KCHFO

Kontaktní e-mail: pospisil@karlov.mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:

X vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

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

Výsledky:

X originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

veliký X standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

vynikající X velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

téměř žádné X vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

X vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky oponenta:

Studentka si zvolila ke zpracování velmi zajímavé téma, se kterým se dle mého názoru výborně vypořádala a výsledkem je velmi zdařilá bakalářská práce jak po formální tak zejména po obsahové

stránce. Práce je velmi dobře rozmyšlena, členěna, je přehledná. Úvodní teoretická část je velmi dobře zpracována i s vhodnými odkazy na literaturu. Jsou zřetelně definovány cíle práce, a proč jsou jednotlivé kroky učiněny. Ve výpočetní části jsou postupně prezentovány jednotlivě provedené výpočty na vybraném vzorku prvků různými metodami a s různými bázemi a je provedeno jejich vyhodnocení formou tabulek a názorných obrázků. Následně jsou provedeny výpočty zvolenou nejvhodnější metodou pro celou skupinu hydridů přechodných kovů ve všech bázích a jsou vyhodnoceny meziatomové vzdálenosti, disociační energie, frekvence kmitů a energie nulových kmitů základního stavu molekuly a nakonec provedeno srovnání s experimentálními hodnotami. Práce se velmi dobře čte, je velmi kvalitně zpracována, snadno se dají dohledat a porovnat jednotlivé výsledky. Uvedený seznam zkratk, tabulek a seznam obrázků považuji za velmi užitečný.

V práci jsem našel několik drobných typografických chyb, které pro informaci dále uvádím:

Na str. 13, řádek 6, překlep hodnotu namísto hodnota.

Na str. 14 nejsou očíslovány výrazy pro funkce pro možné odkazy na ně.

Na str. 18 překlepy v popisku obr. 2.

Na str. 19, 6. řádek odspoda obsahují namísto obsahují.

Na str. 25, překlep v popisku obr. 3, 5 a všech obrázků v příloze 2.

Osy obrázků mají desetinná čísla s desetinnou tečkou namísto čárky.

Na str. 27, řádek 4 bázemi namísto bázem

Posuzovaná bakalářská práce ukazuje velmi dobrý vhled autorky do studované problematiky, její schopnost vhodně interpretovat dosažené výsledky a činit závěry. Autorce se zdařilo prokázat, že při použití báze S2FG lze dosáhnout obdobných výsledků jako s bází SDD5 za mnohem kratší výpočetní čas. Po důkladném přečtení a zhodnocení rozsahu, formální správnosti, prezentovaných výsledků, analýz a závěrů bakalářské práce doporučuji její přijetí k obhajobě a hodnotím stupněm výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Na stránce 30 se v posledním odstavci uvádí, že pokud se připočte anharmonicitu, energie se celkem výrazně sníží, nejvýrazněji u LAN báze. Nicméně z tabulky 12 plyne pokles i pro ostatní báze a to srovnatelný nebo i vyšší.

Nenašel jsem v textu zmínku, proč nejsou v tabulkách 9 až 12 uváděny hodnoty pro chrom, mangan, železo, kobalt, nikl v SDD5 bázi.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta: Praha, 13. 8. 2018

doc. RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.