

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Jaroslav Hofierka
Název práce: Convergence of the embedding scheme
Studijní program a obor: Fyzika, Teoretická fyzika
Rok odevzdání: 2019

Jméno a tituly vedoucího: 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:

Výpočty adsorpčních (vazebných) energií atomů a molekul se hojně využívají při studiu katalytických vlastností materiálů nebo pro pochopení přírodních procesů, jako je (de)mineralizace. Získat vysoce přesnou hodnotu adsorpční energie je stále velmi obtížné. V současnosti je možné dosáhnout vysoké přesnosti v podstatě jen s použitím metody vnoření (embedding). Pro její kvalifikované použití je důležité porozumět, jak rychle konverguje adsorpční energie v závislosti na velikosti vnořeného klastru, a jak je konvergence ovlivněna elektronovou strukturou substrátu. Pro pochopení této konvergence jsme s panem Hofierkou zvolili dva přístupy k řešení elektronové struktury, a to model těsné vazby a ab initio metody. První z nich je v principu jednoduchý, nicméně získání adsorpční energie je pro něj obtížnější, než jsem odhadoval. Proto se v této části práce pan Hofierka zaměřil hlavně na studium konvergence hustoty stavů pro různé 1D a 2D systémy a vliv započtení okolí pomocí self-energie na hustotu stavů. Nicméně byl schopen získat výraz i pro výpočet adsorpčních energií, které jsou prezentovány na konci třetí kapitoly. Z mého pohledu bylo zajímavé otestování různých metod pro přibližnou self-energii okolí, a také ukázání rozdílů v hustotě stavů mezi systémem, kde se adsorbovaný adatom váže vazbou podobnou té v substrátu a systémem, kde se váže silně. Musím dodat, že systémů a různých cest testoval pan Hofierka velké množství a do výsledné práce se dostala jen ta hlavní část.

Ve čtvrté kapitole jsou prezentovány výsledky pomocí ab initio metod. Pro započtení okolí je zde použit jednoduchý model dispersních korekcí, který se zdá být docela efektivní. Také v této části projevil pan Hofierka velkou pracovitost, schopnost zvládnout problémy, analyzovat data a přicházet s vlastními nápady.

Diplomová práce je psána velmi dobrou angličtinou a obsahuje jen minimum typografických chyb, kvalita grafů a ilustrací je též velmi dobrá. Pro výpočty v třetí kapitole napsal pan Hofierka vlastní programy, pro výpočty ve čtvrté pak efektivně využíval superpočítač Salomon. Ještě dodám, že zimní semestr 2018/2019 strávil pan Hofierka v Lovani, kde studoval adsorpci na vrstevnatých materiálech, tyto výsledky nejsou součástí diplomové práce.

Na závěr konstatuji, že s prací pana Hofierky jsem byl velmi spokojen, byl schopen samostatně nastudovat rozsáhlé množství původní literatury a využít je k získání výsledků a jejich vysvětlení. Obdržené poznatky nám pomáhají pochopit výsledky pro reálné systémy a obsah kapitoly 4 je základem připravované publikace. Celkově práci doporučuji uznat za diplomovou práci.

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: 13. 6. 2019, Praha

