

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího       posudek oponenta  
 bakalářské práce       diplomové práce

Autor: Ondřej Krejčí

Název práce: Teoretické výpočty stability a elektronové struktury povrchů Si

Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika

Rok odevzdání: 2011

Jméno a tituly oponenta: Mgr. Lucie Szabová

Pracoviště: Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Kontaktní e-mail: szabovalucie@seznam.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:**

Předložená práce Ondřeje Krejčího se zabývá teoretickými výpočty povrchů Si metodou DFT. V první kapitole autor představil teoretické základy metody, v další pak její použití v případě výpočtu vlastností krystalických látek. Třetí kapitola pak popisuje obecné vlastnosti povrchů křemíku a podrobný přehled dosavadních experimentálních výsledků na poli STM, STS a výpočtů těchto povrchů. V dalších kapitolách autor uvádí experimentální metodu STM a použité výpočetní programy Fireball a STM. Šestá kapitola pak obsahuje vlastní originální výsledky výpočtu rekonstrukcí povrchu Si(100). Autor srovnává pásovou strukturu, hustotu stavů, vypočítaná tunelová spektra a simulované STM obrázky pro nerekonstruovaný povrch a pro rekonstrukce 2x1, p(2x2) a c(4x2). Výsledky pak srovnává nejen s dostupnými experimentálními výsledky a teoretickými výpočty, ale i hodnotí vzhledem k bázi a použitým aproximacím.

Výsledky jsou poměrně jasně popsány a velmi dobře graficky zobrazeny. Práci bych vytkla pouze velké množství tiskových chyb a občasné neodpovídající reference na obrázky. Celkově práci hodnotím výborně, je vidět, že Ondřej Krejčí velmi dobře zvládl náročnou metodu ab initio výpočtů.

## **Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

Jakým způsobem (jakou metodou) byly voleny k-body použité v jednotlivých výpočtech?

Co je důvodem vzniku nesymetrických map při použití 8 k-bodů a naopak píků navíc ve spektrech při použití 36 k-bodů?

## **Práci**

- doporučuji  
 nedoporučuji  
uznat jako bakalářskou.

## **Navrhuji hodnocení stupněm:**

- výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

Praha, 30.8.2011