

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Michal Fečík
Název práce: "Ab initio" studium směsných oxidů Sn-Ce-O
Studijní program a obor: Fyzika, FOF
Rok odevzdání: 2011

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: R.N.Dr. Daniel Mazur Ph.D.
Pracoviště: Katedra fyziky povrchů a plazmatu
Kontaktní e-mail: daniel.mazur@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:

Předložená práce referuje o originálním výzkumu vlivu příměsi atomů cínu na měřitelné vlastnosti oxidu ceričitého pomocí matematického modelování "ab initio". V úvodní kapitole je podán stručný výklad výpočetní metody DFT(+U), použitých aproximací a jejich silných stránek a slabín. Druhá kapitola je věnovaná konvergenčním testům parametrů a výpočtům modelů CeO_2 , Ce_2O_3 , Sn a SnO_2 . Tyto referenční systémy jsou charakterizovány hustotou elektronových stavů (DOS), "bulk modulem", meziatomárními vzdálenostmi a relativními náboji atomů. Modelování systému Sn/ CeO_2 vytvořeného substitucí jednoho atomu Sn za Ce na superbuňku staví na výsledcích modelování referenčních struktur. Byl proveden i výpočet alternativního modelu Sn/ CeO_2 s jednou kyslíkovou vakancí a byl studován vliv této vakance na délky vazeb a rozložení náboje v superbuňce. V práci byl věnován dostatečný prostor konvergenčním testům řídicích parametrů modelů i na druhé straně diskuzi výsledků vzhledem k hodnotám v použité literatuře. Přestože nebyl výpočetní software Quantum ESPRESSO použitý k výpočtům v práci nijak popsán z hlediska implementačního, lze jednoznačně říci, že byl autorem použit s dostatečným pochopením jak jeho funkce tak úskalí vybrané numerické metody. Kvalita dat i způsob prezentace jsou v souladu se standardy v oboru.

Předložená práce je po formální stránce velmi dobrá s minimem věcných nepřesností a překlepů. Grafická prezentace dat je velmi dobrá, jisté vylepšení by bylo přineslo prostorové přiblížení grafů s místy v textu, kde jsou poprvé odkazovány - například Obrázek 2.16 je v textu zmíněn na stránce 17 a vyskytuje se až na stránce 28. Lze doporučit také sjednocení Obrázků 2.4 a 2.5 a lepší využití plochy grafů při prezentaci hustot stavů, jmenovitě v Obrázcích 2.22, 2.26 a 3.5. Zkratka a.u. značící atomovou jednotku délky by měla být vysvětlena dříve než v popisku Obrázku 2.20 na straně 30 nebo zařazena do seznamu použitých zkratk na straně 49.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1. Ve výsledcích konvergenčních testů je občas vidět, že hodnoty parametrů lokálně "odskočí" zcela mimo zjevný trend, např. v Obrázku 2.11 - Závislosti B na ecutwfc . Tyto jevy nejsou v práci nijak komentovány, proto prosím o vysvětlení jejich vzniku a jejich vlivu na závěry, které byly z testů vyvozeny.
2. V práci jsou prezentovány pásové struktury podél lomených čar spojujících význačné body 1. Brillouinových zón - např. podél $\Gamma\text{XULW}\Gamma$ pro CeO_2 . Jak vypadá 1.BZ tohoto krystalu a kde je na ní který význačný bod? V práci takováto vysvětlující grafika chybí.
3. Znáte český výraz pro termín "bulk modulus"?

Práci

- doporučuji
 nedoporučuji
uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze 30.8.2011