

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- | | |
|------------------------------------------------------|------------------------------------------------------|
| <input type="checkbox"/> posudek vedoucího | <input checked="" type="checkbox"/> posudek oponenta |
| <input checked="" type="checkbox"/> bakalářské práce | <input type="checkbox"/> diplomové práce |

Autor/ka: Jaroslav Hofierka
Název práce: Lattice energies of molecular solids
Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika
Rok odevzdání: 2017

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: RNDr. Ota Bludský, CSc.
Pracoviště: Ústav organické chemie a biochemie AVČR, v.v.i.
Kontaktní e-mail: ota.bludsky@volny.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 bakalářská práce se zabývá srovnáním dvou teoretických přístupů pro výpočet vazebných energií molekulových krystalů: kvantově-mechanického přístupu s použitím periodických okrajových podmínek a fragmentační metody spoléhající se na rychlou konvergenci vícečásticových příspěvků (dimery, trimery, tetramery, ...) pro tyto systémy. Zřejmou výhodou druhého přístupu je možnost využití velmi přesných a spolehlivých kvantově chemických metod, které nejsou z důvodu velké výpočetní náročnosti použitelné pro periodický model (např. metoda coupled cluster – CCSD(T)).

Z jazykového i odborného hlediska je práce na velmi dobré úrovni, určité výhrady mám k některým pasážím teoretického úvodu. Jako příklad mohu uvést nepříliš zdařilé zavedení Born-Oppenheimerovy aproximace, včetně vyjádření celkové energie systému v rovnici (1.3), které považuji v případě interagujících částic za nekorektní. Definiční vztah fragmentačního přístupu (2.1) je rovněž formálně nepřesný. Nutno zdůraznit, že tyto formální nedostatky nemají vliv na výsledkovou část práce, kterou naopak považuji za vynikající a jistě nebude obtížné výsledky této práce převést do kvalitní publikace.

Bakalářskou práci doporučuji k obhajobě s hodnocením **výborně**.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha, 31.5. 2017