

## I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

<b>Název práce:</b>	Elektronová struktura nízkodimenzionálních uhlovodíkových systémů
<b>Jméno autora:</b>	Bc. Zdeňka Sosnová
<b>Typ práce:</b>	diplomová práce
<b>Fakulta:</b>	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská (FJFI)
<b>Katedra:</b>	fyziky
<b>Oponent práce:</b>	Mgr. Jaroslav Hamrle, Ph.D.
<b>Pracoviště oponenta práce:</b>	Katedra inženýrství pevných látek (KIPL), FJFI, ČVUT

## II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

<b>Zadání</b>	<b>náročnější</b>
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce.</i>	
<b>Práce popisuje chování elektronů a jejich vlastnosti v řetězcích grafénových nanopásků. Jedná se o současnou nejednoduchou problematiku, který autorka dobře pojala.</b>	

<b>Splnění zadání</b>	<b>splněno</b>
<i>Posudte, zda předložená závěrečná práce splňuje zadání. V komentáři případně uveďte body zadání, které nebyly zcela splněny, nebo zda je práce oproti zadání rozšířena. Nebylo-li zadání zcela splněno, pokuste se posoudit závažnost, dopady a případně i příčiny jednotlivých nedostatků.</i>	
<b>Práce splňuje zadání.</b>	

<b>Zvolený postup řešení</b>	<b>vhodný</b>
<i>Posudte, zda student zvolil správný postup nebo metody řešení.</i>	
<b>Použité modely k popisu elektronové struktury a jejich vlastností jsou vybrány dobře.</b>	

<b>Odborná úroveň</b>	<b>výborná</b>
<i>Posudte úroveň odbornosti závěrečné práce, využití znalostí získaných studiem a z odborné literatury, využití podkladů a dat získaných z praxe.</i>	
<b>Odborná úroveň textu je vynikající.</b>	

<b>Formální a jazyková úroveň</b>	<b>výborná</b>
<i>Posudte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posudte typografickou a jazykovou stránku.</i>	
<b>Jazyková a typografická úroveň je velmi dobrá. Oceňuji kvalitně provedené ilustrace a grafy.</b>	

<b>Výběr zdrojů, korektnost citací</b>	<b>výborné</b>
<i>Vyjádřete se k aktivitě studenta při získávání a využívání studijních materiálů k řešení závěrečné práce. Charakterizujte výběr pramenů. Posudte, zda student využil všechny relevantní zdroje. Ověřte, zda jsou všechny převzaté prvky řádně odlišeny od vlastních výsledků a úvah, zda nedošlo k porušení citační etiky a zda jsou bibliografické citace úplné a v souladu s citačními zvyklostmi a normami.</i>	
<b>Zdroje a jejich citování je použito řádně.</b>	

<b>Další komentáře a hodnocení</b>
<i>Vyjádřete se k úrovni dosažených hlavních výsledků závěrečné práce, např. k úrovni teoretických výsledků, nebo k úrovni a funkčnosti technického nebo programového vytvořeného řešení, publikačním výstupům, experimentální zručnosti apod.</i>

Výsledky práce jsou velmi zajímavé. Jedná se o současnou tematiku. Vědecké výsledky jsou publikovatelné a částečně již publikovány.

### III. CELKOVÉ HODNOCENÍ, OTÁZKY K OBHAJOBĚ, NÁVRH KLASIFIKACE

*Shrňte aspekty závěrečné práce, které nejvíce ovlivnily Vaše celkové hodnocení. Uveďte případné otázky, které by měl student zodpovědět při obhajobě závěrečné práce před komisí.*

Diplomová práce Bc. Zdeňky Sosnové se věnuje teoretickému popisu elektronovému stavu nízkodimensionálních proužků grafenu (GNR = graphene nanoribbon), se zaměřením na jejich topologické vlastnosti (Zakova fáze) a strukturní stabilitu (Pseudo Jahn-Tellerova distorze). Práce velice dobře uvádí a zavádí vlastnosti nízkorozměrných analytických sloučenin, které jsou v práci popsány jak pomocí DFT simulací, tak pomocí metody těsné vazby (tj. lineární kombinace atomových orbitalů). Jejich topologické vlastnosti jsou zavedeny pomocí SSH modelu. Autorka pak podrobně diskutuje elektronovou strukturu, topologické vlastnosti (např. winding number) a stabilitu různých GNR molekul, lišících se počtem uhlíkových atomů v neperiodickém směru molekuly. Práce je dobře a jasně napsána. Cením kvalitní a přehledné grafy a ilustrace. Výsledky jsou inovativní, které částečně již jsou publikovány ve vědeckých časopisech. Práci doporučuji k obhajobě a navrhuji ohodnotit známkou A – výborně. K diskusi navrhuji následující body: 1) jak byste zapsala chemické vazby sigma a pi vazby v jazyce kvantové mechaniky (pomocí vlnových funkcí)? Předpokládám, že tyto chemické vazby lze zapsat v bázi s- či p- atomových orbitalů. Dále, v případě molekul obsahující střídající se dvojně a jednoduché vazby (např. v případě polyacetylenu (Obr. 15) nebo GNR), jedná se skutečně o střídající se dvojně a jednoduché vazby, nebo o kvantovou superpozici dvojně a jednoduché vazby současně? 2) rovnice (64), (65) definují překryvový integrál mezi sousedními atomy pro SSH model, vyjádřené proměnnými  $v$ ,  $w$ . Z demonstrovovaných vlastností těchto proměnných vyplývá, že  $v$ ,  $w$  jsou reálná čísla. Je fyzikální důvod, proč by tyto překryvové integrály měli být reálné? 3) jak byla počítána Berryho (Zakova) fáze? (a) Byla počítána přímo pro elektronovou strukturu určenou z DFT, nebo byla počítána z SSH modelu? (b) Byl k výpočtu použit vztah  $-1/\pi \int A dk$  (75) nebo byl použit jiný vztah? Ptám se, protože numerické použití vztahu (75) může mít problém s určením Berryho potenciálu  $A$ , protože obsahuje derivaci vlnové funkce (derivaci vlastních stavů), což může být numericky obtížně získatelná proměnná, protože vlastní stavy jsou počítány s náhodnou fází. 4) při určení stability kvantového stavu (rovnice 78, pseudo Jahn-Tellerův jev) je stabilita struktury vyjádřena pomocí proměnné  $K_0 + K_v$ . Proč v rovnici (78) chybí člen  $\langle \psi' | H | \psi' \rangle$ , kde  $|\psi'\rangle$  je derivace  $|\psi\rangle$  podle  $k$ ,  $|\psi'\rangle = d|\psi\rangle / dk$ ? Je tento člen nulový, nebo zanedbatelný?

Předloženou závěrečnou práci hodnotím klasifikačním stupněm A - výborně.

Datum: 26.5.2023

Podpis:

