

## I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

<b>Název práce:</b>	Kvantově-mechanický popis mnohaelektronového souboru v kulových nanočásticích
<b>Jméno autora:</b>	Michael Píro
<b>Typ práce:</b>	diplomová práce
<b>Fakulta:</b>	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská (FJFI)
<b>Katedra:</b>	fyziky
<b>Vedoucí práce:</b>	Mgr. Jaroslav Hamrle, Ph.D.
<b>Pracoviště vedoucího práce:</b>	Katedra inženýrství pevných látek (KIPL), FJFI, ČVUT

## II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

<b>Zadání a motivace k jeho vypsání</b>	<b>náročnější</b>
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce a krátké průvodní slovo k motivaci pro zadání práce.</i>	
<b>Cílem práce bylo popsat mnoha-elektronový systém nanočástic, což je aktuální tematika s mnoha aplikacemi. Jedná se o obtížnou tematiku, s náročnými analytickými i numerickými modely.</b>	

<b>Splnění zadání</b>	<b>splněno</b>
<i>Posuďte, 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>Zadání diplomové práce bylo splněno. V zadání předpokládaný model elektronů se ukázal jako numericky nestabilní, a byl tedy vyvinut nový, složitější model, který již je stabilní.</b>	

<b>Aktivita a samostatnost při zpracování práce</b>	<b>výborná</b>
<i>Posuďte, zda byl student během řešení aktivní, zda dodržoval dohodnuté termíny, jestli své řešení průběžně konzultoval a zda byl na konzultace dostatečně připraven. Posuďte schopnost studenta samostatně tvůrčí práce.</i>	
<b>Diplomant pracoval kreativně a samostatně. Velice cením pečlivost a přesnost v náročných analytických výpočtech, kdy veškeré předchozí výsledky byly přepočítány a nové objeveny.</b>	

<b>Odborná úroveň</b>	<b>výborná</b>
<i>Posuďte úroveň odbornosti závěrečné práce, využití znalostí získaných studiem a z odborné literatury, využití podkladů a dat získaných z praxe.</i>	
<b>Odborná úroveň práce je vynikající. Práce obsahuje inovativní postupy, modely a výpočty. K jejich publikaci zatím nedošlo, z důvodu nedostatku času.</b>	

<b>Formální a jazyková úroveň</b>	<b>výborná</b>
<i>Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku.</i>	
<b>Formální a jazyková část práce je zcela v pořádku.</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. Posuďte, 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>	

Vědecké zdroje jsou řádně citovány.

**Další komentáře a hodnocení**

*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.*

**Výsledky práce považuji za vědecky vynikající a zajímavé. K jejich publikaci zatím nedošlo kvůli nedostatku času.**

**III. CELKOVÉ HODNOCENÍ A NÁVRH KLASIFIKACE**

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

Diplomová práce Bc. Michaela Píro se zabývá teoretickým popisem mnoha-elektronového stavu nanočástic. Elektronový popis nanočástic je většinou řešen pomocí kvantově hydrodynamických rovnic (QHD). V průběhu práce Bc. Píro ukázal, že numerická řešení QHD rovnic jsou numericky nestabilní, což odráží špatně předpokládaný výměnný potenciál pro elektrony mimo nanočástici (spill-out), kde se zdá, že LDA aproximace selhává. Proto Bc. Píro navrhl nový unikátní typ mnohaelektronového popisu stavu nanočástic z více fundamentálního pohledu, založeném na popisu mnohaelektronové systému ve sféricky symetrickém potenciálu pomocí Hartree-Fockovy aproximace mnohaelektronové vlnové funkce, s aproximací náboje iontů atomů spojitě rozprostřené v objemu nanočástice (jellium model). Tento model je podobný mnohaelektronovému popisu elektronů v atomu, a výsledkem jsou tedy stejná kvantová čísla (hlavní, orbitální, magnetické). Byl určen základní stav elektronů a určena posloupnost energií v závislosti na kvantových číslech. Tento model nanočástice považuji za velice inovátorský, a věřím, že by se mohl rozšířit, mohl by přinést nový vhled či pozorovatelné vlastnosti do elektronové struktury nanočástic, či opravit výměnný potenciál pro QHD rovnice. Velice oceňuji schopnost Bc. Píra analyticky vyřešit a posléze i numericky popsat komplikované vztahy popisující mnoha-elektronový systém ve sférickém potenciálu. Práci považuji za zdařilou, doporučuji k obhajobě a navrhuji ohodnotit známkou A – výborně.

Předloženou závěrečnou práci hodnotím klasifikačním stupněm A - výborně.

Datum: 26.5.2023

Podpis:

