

I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

Název práce:	Kvantově-mechanický popis mnohaelektronového souboru v kulových nanočásticích
Jméno autora:	Michael Píro
Typ práce:	diplomová práce
Fakulta:	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská (FJFI)
Katedra:	Katedra fyziky
Oponent práce:	Pavel Jelínek
Pracoviště oponenta práce:	Fyzikální ústav AV ČR

II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

Zadání	náročnější
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce.</i>	
Cíle diplomové práce jsou dostatečně náročné a jejich splnění vyžaduje prokázání dobrých znalostí kvantové mechaniky a numerických metod pro řešení Schrodingerovy rovnice.	

Splnění zadání	splněno
<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>	
Předložená diplomová práce splnila zadání. V rámci diplomové práce byl vytvořen numerický model, který umožňuje simulace základního stavu v kulových nanočásticích. Byly provedeny numerické simulace pro různé varianty kulových nanočástic a porovnány různé varianty pro nanočástice s interagujícími a volnými elektrony.	

Zvolený postup řešení	vhodný
<i>Posuďte, zda student zvolil správný postup nebo metody řešení.</i>	
Zvolený postup řešení je odpovídající danému problému.	

Odborná úroveň	výborná
<i>Posuďte úroveň odbornosti závěrečné práce, využití znalostí získaných studiem a z odborné literatury, využití podkladů a dat získaných z praxe.</i>	
Diplomová práce je na vysoké odborné úrovni. Předložený numerický model je originální a jeho implementace dokazuje dobré znalosti autora.	

Formální a jazyková úroveň	výborná
<i>Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku.</i>	
Diplomová práce je napsána velmi dobře, jsou dodrženy všechny formální zvyklosti. Zejména oceňuji fakt, že je práce napsána v anglickém jazyce.	

Výběr zdrojů, korektnost citací	průměrné
<i>Vyjádrěte 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>	
Seznam literatury je poměrně stručný, obsahuje pouze 10 referencí.	

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.

Práce je na vysoké úrovni a obsahuje značné množství vykonané práce. Chybí mi obecný úvod, který by práci zasadil do širšího kontextu.

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.

Jedná se o velmi kvalitní diplomovou práci, kde autor musel prokázat velmi dobré znalosti kvantové mechaniky a numerických metod pro její řešení. Bylo dosaženo originálních výsledků. Na druhou stranu postrádám obecný úvod do problematiky a jaký je potenciální přínos modelu pro studium nanočástic.

Otázky:

1. Proč byla zvolena pro popis mnohačásticových interakcí elektronů metoda HF místo metody založené na elektronové hustotě? Pro kovové systémy se zdá být metoda založená na funkcionalu hustoty přímočařejší.
2. Co je původem nemonotónního tvaru celkové elektronové hustoty prezentované v obrázku 4.7?
3. Bylo by možné porovnat dosažené výsledky pro malé nanočástice s DFT výpočty za účelem testování kvality navrženého numerického řešení pro realistické nanočástice?

Předloženou závěrečnou práci hodnotím klasifikačním stupněm **A - výborně**.

Datum: 15.5.2023

Podpis:

