

Posudek práce
předložené na Přírodovědecké fakultě JU

☐ posudek vedoucího	☒ posudek oponenta
☒ bakalářské práce	☐ diplomové práce

Autor: Lukáš Hronek

Název práce: Teorie nekoherentních nábojových přenosů a její využití pro popis elektronového transportu

Studijní program a obor: Fyzika

Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly oponenta: doc. RNDr. Milan Předota, Ph.D.

Pracoviště: Katedra fyziky PřF JU

Kontaktní e-mail: predota@prf.jcu.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 oponenta:

Lukáš Hronek shrnul a vylepšil teorii nekoherentního přenosu elektronů nositele Nobelovy ceny R. A. Marcuse. Pokud by bakalářské práce končila kapitolou 3.7, jednalo by se o vynikající teoretickou bakalářskou práci (a nic ta tom nemění pár věcných připomínek, které jsou navíc v počtu velmi malém k rozsahu práce).

Student navíc na stěžejní teoretickou část navazuje praktickou simulační částí. Podrobná diskuse těchto výsledků a zejména popis modelování zvolených značně odlišných systémů by bezpochyby mohly tvořit druhou samostatnou plnohodnotnou bakalářskou práci. S ohledem na již tak vysoký rozsah práce (se zohledněním vysoce netriviální náročnosti teoretické části) chápu, že zde byl simulační částí věnován omezený prostor – ukázky použití Marcusovy teorie a reprezentativních

výsledků. Bakalářskou práci doplňuje i Pythonovský program na výpočet proudů v modelových systémech, vytvořený studentem.

Teoretická náročnost práce je vysoká, zejména propojováním vztahů a vlastností v rovnovážných a nerovnovážných stavech, elektronových a jaderných vlastností atomů a souvisejících nábojových hustot a elektrických potenciálů klade nároky na kombinaci správných vztahů pro jednotlivé kombinace. Student velmi účelně vybudovává potřebný aparát množstvím odvozených vztahů, které jsou následně propojovány k dosažení výsledných vztahů pro reakční kinetiku přenosu elektronu.

Práce je psána velmi dobře srozumitelnou češtinou a plně se soustřeďuje na vybudování Marcusovy teorie s využitím původních vědeckých prací a vlastní úpravou do formulace pomocí elektrických potenciálů místo elektrických polí. Na dlouhé úvody není v práci místo, takže čtenář si musí případně pro něj neznámé pojmy dohledat v odkazované literatuře (např. Franck-Condonův princip; skutečnost, že optická permitivita je elektronovou permitivitou). Jedinou výtkou jsou některé zbytečné a nevhodné anglicismy, např. „Tímto příspěvkem se zabývám separovaně v části 2.12.“; „prefaktor“ ($3\times$) – i když uznávám, že nahrazení slovem „součinitel“ ztrácí část významu a náhrada za „normovací koeficient“ zase není jazykovou výhrou; „Fermiho levely“ místo „Fermiho hladiny“ nebo „populace i -tého místa“ místo „obsazení i -tého místa“.

Dílčí výtky:

- 1) Z textu a rovnic částí „3.5.1 Skok na elektrodu“ a „3.5.2 Skok z elektrody“, včetně značení k_{ij} jako rychlostní konstanty přeskočů $j \rightarrow i$ (kde bych osobně upřednostnil opačné pořadí indexů) je patrné, že názvy těchto částí jsou prohozeny. Následně i ve větě na str. 36: „Rychlostní konstanty k_{iM} podle (3.6) a k_{Mi} podle (3.7) už obsahují pravděpodobnosti (Fermiho rozdělení (3.1) a jeho doplněk $1 - f(E)$), proto tyto členy jsou násobeny pouze P_j , resp. $1 - P_j$.“ je pořadí členů P_j , resp. $1 - P_j$ prohozeno. Následné rovnice jsou však správně.
- 2) Kapitola „3.9 Optimalizace závislosti proudu na teplotě“ nevysvětluje, jaká optimalizace byla prováděna, teprve závěr objasňuje „Provádím optimalizaci na minimální teplotní závislost proudu“.
- 3) Popis svislé osy Obrázku 3.9(b) je chybný.
- 4) Poznámky k popisu svislých obrázků 3.10(c), 3.11(c), 3.12(c):
Logaritmus lze počítat pouze z bezrozměrné veličiny, tj. vhodnější je zápis např. $\log(I/I_0)$, kde $I_0 = 1$ A.
Proč je v jednom případě použit logaritmus dekadický a v ostatních přirozený? To mi připadá nepřirozené.

Matematické výtky:

- 5) Na str. 5 by ve větě „dielektrikum se skládá z objemovým elementů dV o dipólovém momentu μ “ mělo být „ $d\mu$ “.
- 6) V druhé rovnici pod rovnicí (2.32), str. 13, nemá být index „ v “ v „ $\delta\rho_v$ “.
- 7) Za rovnicí (2.33), str. 13, by místo „Jednou možností, jak toto splnit je ...“ mělo být „Jednou možností, jak splnit $\delta F = 0$, je ...“.
- 8) V rovnici (3.10), str. 37, chybí závorky naznačující, že se součty týkají obou uvedených členů.
- 9) V rovnici (3.11) i předcházející neočíslované trojici, str. 37, chybí uvedení, že prostřední vztah platí pro všechna $i=2..N$.

Shrnutí:

Jedná se o výjimečně kvalitní bakalářskou práci, která svým rozsahem i náročností přesahuje standardy. Cenného výsledku se podařilo dosáhnout jak v teoretické části, tak v praktické simulační části – student prokázal, že pro určité kombinace parametrů může být nekoherentní přenos elektronu téměř teplotně nezávislý.

Z celé práce je patrné, že student zvládá i dovednosti, jež běžně studenti nabývají až během pokročilých předmětů v magisterském studiu a věnoval bakalářské práci nadstandardní úsilí.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- O1) Obrázek 3.8(a) zobrazuje blížení k nulovému proudu pro nenulové napětí. Čím je způsobeno, že toto nenastává pro nulové napětí jako v ostatních systémech?
- O2) Vysvětlete, jaké proudy zobrazujete v Obrázku 3.9(a) – reverzibilní, ireverzibilní, proud jedním směrem, ...
- O3) Můžete objasnit váš podíl (vs. vedoucího práce) na nové formulaci Marcusovy teorie pomocí potenciálů namísto intenzit? Plánujete tento výsledek publikovat?

Práci

☒ doporučuji
☐ nedoporučuji
uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

☒ výborně ☐ velmi dobře ☐ dobře ☐ neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta: Č. Budějovice, 15. 5. 2023