

Hodnocení bakalářské práce – vedoucí

Autor hodnocení:	Ing. Dominik Legut, Ph.D.
Vedoucí bakalářské práce:	Ing. Dominik Legut, Ph.D.
Oponenti:	RNDr. Hana Čenčariková, Ph.D.
Téma:	Dynamika atomové mříže aktinidů a aktinidiových sloučenin - výpočty z prvních principů
Verze ZP:	1
Student:	Bc. Lukáš Kývala

1. *Odpovídá závěrečná práce zadání?*

Bakalářská práce plně odpovídá zadání práce, dokonce požadavky na tuto práci v řadě aspektů překračuje.

2. *Základní hodnocení závěrečné práce včetně hodnocení její struktury, návazností a úplnosti jednotlivých částí:*

Práce je členěna logicky, od popisu teorie funkcionálu hustoty, Hubbardova modelu a modelu pro výpočet atomových vibrací, po jejich použití pro korelované systémy a následné výpočet a analýzu elektronové struktury (ES), elastických a termodynamických vlastností Th, ThC a PaC. Výsledky jsou originální a zásadní co se týká popisu ES těchto počátečních aktinidů. Tématicky navazuje např. na práci o karbidech uranu (PRB 2016).

3. *Hodnocení výběru a využití studijních pramenů:*

Autor si prostudoval rozsáhlé množství odborné literatury jak co se týče zkoumaných materiálů, tak rovněž týkajících se metod, které byly použity k vlastním výpočtům. Všechny naměřená či vyp

4. *Hodnocení formální stránky práce (jazyková stránka, úprava apod.):*

Z formální stránky je práce na vysoké úrovni. Velmi pozitivní je fakt, že je napsána v anglickém jazyce a tudíž může sloužit jako základ publikace. Což se i stalo. Rovněž oceňuji grafickou kvalitu grafů a přehlednost, tj. autor práci psal v latexu.

5. *Uveďte, zda a v jakých částech přináší závěrečná práce nové poznatky a jaký je způsob využití získaných výsledků:*

V pochopení síly lokalizace 5f elektronů pro Th a karbidy aktinidů a jejich vliv na elasticitu (zde spávná c12 pro Th), dále teplotní roztažnost, tepelnou kapacitu a vliv spin-orbitu na atomové vibrace Th, podobně pro PaC a ThC. Výsledkem je napsána publikace, momentálně ve finální části u spoluautorů.

6. *Hodnocení práce studenta/studentky během vypracování závěrečné práce:*

Výborná spolupráce, dostatek samostatnosti a zároveň vysoká zvědavost o problematice.

Celkové hodnocení: *výborně*