

Posudek školitele na disertační práci Mgr. Jana Kulveita

„NUCLEATION IN COMPLEX SYSTEMS“

Mgr. Jan Kulveit ukončil studium na MFF UK v Praze 8.7.2010 v oboru Teoretická fyzika. Diplomovou práci s názvem „Studium nukleace kvantových teček“ vypracoval pod mým vedením ve Fyzikálním ústavu AVČR a obhájil 20.5.2010 v Ústavu teoretické fyziky MFF UK v Praze v komisi Prof. J. Bičáka se známkou 1. V 1.9.2010 zahájil Mgr. Kulveit doktorské studium ve studijním oboru Fyzika nanostruktur MFF UK v Praze a na disertační práci pracoval v FzU AVČR opět pod mým vedením. Předkládaná disertace se skládá ze tří komplementárních částí.

V první etapě výzkumu se Mgr. Kulveit zabýval nukleací (a následným růstem) nanofází v matricích vybraných alkalických halogenidů (NaCl, resp. KCl dopovaných malým množstvím příměsi PbCl₂). Byly určeny energetické bariéry nukleace a bylo dokázáno, že tzv. Suzukiho fáze v lehce dopovaném systému KCl-PbCl₂ nukleují poměrně dobře, ale další přechod k chemicky identifikovatelné fázi PbCl₂ je ztížený relativně vysokou stabilitou uvedené fáze, což potvrzují i experimentální data. Fázový přechod v systému NaCl-PbCl₂ je podstatně komplikovanější a přechod ke stabilní PbCl₂ fázi je možný v případě dosažení jisté kritické tloušťky vrstevnatých klastrů.

Další řešenou problematikou je heterogenní nukleace na nehomogenních površích, modelovaných buď náhodně lokalizovanými poruchami („nečistotami“) nebo periodickými oblastmi („buněčné oblasti“), kterým odpovídá příslušně modifikovaná povrchová energie. Tato veličina markantně ovlivňuje bariéru nukleace a tím i kinetiku samotného fázového přechodu na těchto površích. V rámci modifikovaného Isingova modelu bylo ukázáno, že nukleační charakteristiky (nukleační rychlost, prodlevy, atd.) jsou poměrně intenzivně ovlivněny amplitudami (resp. periodou lokalizace) příslušných povrchových poruch a vedou k přednostnímu vzniku klastrů nové fáze na těchto aktivních centrech.

Poslední součástí předkládané disertační práce je studium nukleace na komplexních sítích. Na rozdíl od předcházejících mřížkových modelů se jedná o analýzu počátečního stádia fázových přechodů v systémech se zcela odlišnými topologickými vlastnostmi (sítě, grafy). Jedním z hlavních rozdílů v uvedených modelech je definice (pojetí) základních charakteristik procesu, např. definice kritického klastru. Klasický přístup je založený na předpokladu platnosti tzv. kapilární aproximace, zatímco v tomto případě škálování kritického zárodku úzce souvisí s velikostí grafu. Pan Kulveit zvolil pro modelování nukleace na těchto sítích jednak Barabásiho, a také Holmeho-Kimův model v rámci kterých byly nalezeny některé vsutku zajímavé vlastnosti (např. silná korelace mezi přechodovými pravděpodobnostmi a koeficientem klastrování). Chtěl bych zdůraznit, že aplikační potenciál uvedeného přístupu není striktně omezený pouzou na fyzikálně-technicistní oblast, ale má zajímavý přesah i do společenských věd (sociologie, demografie, atd.).

Při řešení uvedených, povýtce aktuálních a otevřených problémů projevil pan Kulveit velkou samostatnost, kreativitu a hluboké fyzikální znalosti, doplněné ojedinělými programátorskými dovednostmi. Získal tak velmi zajímavé a originální výsledky, které publikoval v impaktovaných časopisech (např. Optical Materials, J. Chem. Phys.) a přednesl na poměrně významných zahraničních konferencích (NetSci Seoul, Korea 2016, CM Meeting Coimbra, Portugal 2016, EAF Research Retreat San Leandro, USA 2011). Od roku 2018 působí jako Senior Research Scholar na University of Oxford. Rád konstatuji, že pan Mgr. Jan Kulveit svými výsledky prokazuje schopnost nezávislé vědecké práce a jeho disertaci doporučuji k obhajobě.

2.9.2019

Pavel Demo
školitel, FzU AVCR Praha
demo@fzu.cz