

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: **Jindřich Šándor**

Název práce: **Lineární terahertzová odezva polovodičových nanostruktur**

Studijní program a obor: **Fyzika – Obecná fyzika**

Rok odevzdání: **2023**

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: **Mgr. Hynek Němec, Ph.D.**

Pracoviště: **Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i., Na Slovance 2, Praha 8**

Kontaktní e-mail: **nemec@fzu.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 vedoucího/oponenta:

Ve své práci počítá J. Šándor lineární odezvu nanočtverečků grafenu v přiblížení těsné vazby. Získané výsledky jsou originální a mohou nalézt bezprostřední uplatnění např. při interpretaci terahertzových spekter grafenových nanopásků připravovaných přímo na MFF.

Velká část práce je věnována náročným kvantově-mechanickým výpočtům, které J. Šándor zvládnul výborně a podrobně je ve své práci zdokumentoval. Je nutné zdůraznit, že se jedná o málo probádanou oblast, kde je cenný jakýkoliv nový výsledek. Velmi užitečné a ilustrativní jsou i navazující numerické výpočty, které dávají dobrou představu o spektrech vodivosti grafenových nanočtverečků. Naproti tomu diskuse jakýchkoliv výsledků je nedostatečná a postrádám alespoň jistý nadhled, když už ne nad celou problematikou, tak alespoň nad výchozími rovnicemi a získanými výsledky. Výpočty jsou například prováděny ve dvou různých kalibracích; navzdory poznámce [8] není jasné, zda nakonec vedou či nevedou k různým výsledkům; kalibrace $\Phi = 0$ je vlastně označena jako nefyzikální pro studovaný systém. Numerické výsledky nejsou diskutovány vůbec. Věcné poznámky k práci jsou vesměs drobnější (řazeny podle místa výskytu):

- Obr. 1b: počátek reciproké sítě nelze volit libovolně.
- Konstrukce okrajových podmínek není triviální; bylo by potřeba uvést motivaci k použití zvolených okrajových podmínek a lépe vysvětlit jejich princip. Je to o to důležitější, že podle získaných výsledků okrajové podmínky ovlivňují spektra vodivosti i pro poměrně velké nanočtverečky grafenu.
- Bylo by vhodné rozlišovat, kdy se jedná o plošné a kdy o objemové hustoty a vodivosti (v rov. 1.9 objemové, v části 5 a dále plošné). Je mi jasné, že většina literatury o grafenu v tomto směru nejde dobrým příkladem. Takže alespoň dávat pozor na to, kdy se jedná o plochu a kdy skutečně o objem.
- Ad hoc zavedení tlumení v rov. 3.7 by zasluhovalo zdůvodnit. S tím souvisí i výsledky vypočtené v různých kalibracích v částech 4.1 a 4.2, které jsou ve vzájemném rozporu; očekával bych, že toto bude diskutováno. Není také jasné, proč byl v rov. 3.32 vypuštěn (na rozdíl od rov. 3.8 ad.) člen $e^{+i\omega t}$.
- Studovaná nanostruktura má natolik vysokou symetrii, že tenzor spekter vodivosti by měl být diagonální. Zajišťují toto rov. 5.18 a 5.19?
- Pohyblivost v objemovém grafenu je při rozptylové frekvenci $\gamma = 0.25$ THz a Fermiho energii okolo 20 meV rovna cca $2 \times 10^6 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Jednotky na svislých osách (obrázky v části 7) je tedy potřeba zkontrolovat; pravděpodobně má být uvedeno spíše $\mu_{\text{wv}}/10^5$ ($\text{cm}^2/\text{V/s}$).
- Volba energie ϵ_0 (kap. 7), která zdola ohraničuje stavy uvažované v numerických výpočtech, by měla být diskutována podrobněji (asi by měla zohledňovat polohu Fermiho hladiny, teplotu systému, i frekvenci elektromagnetického záření). Také bych očekával, že energie uvažované v numerických výpočtech budou omezeny i shora.
- V referencích 1, 6 a 7 chybí čísla stran. Nicméně vzhledem k uvedení názvu jsou i tyto reference celkem jednoduše dohledatelné.
- Do budoucna lze doporučit používání méně formalistního jazyku a rozšíření popisů rovnic o jejich fyzikální význam, přístupný i neteoretikům.

Práce jednoznačně splňuje požadavky kladené na bakalářské práce na MFF. Pokud se student uspokojivě vyjádří k níže uvedeným námětům do diskuse, budu mít za to že studovanou náročnou problematiku zvládnul výborně a tedy i jeho hodnocení by mělo být „výborné“.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Symetrie nekonečné vrstvy grafenu je šestičetná, a proto by její vodivost měla být izotropní. V práci ale bylo spočteno, že odezva nanočtverečků grafenu závisí na orientaci (obr. 7.1 – 7.5); anizotropie pro nedopovaný nanočtvereček je pak vysloveně dramatická (obr.7.6). Možným zdrojem anizotropie je snížení symetrie způsobené použitými okrajovými podmínkami. Můžete diskutovat, proč je anizotropie natolik výrazná, přestože jsou okrajové podmínky v obou směrech velmi podobné? Je zde souvislost s chováním uhlíkových nanotrubeček, jejichž vlastnosti citlivě závisí na orientaci sítě atomů uhlíku?
- Soustava rovnic (2.17) udává celkem 4 podmínky určující pouze dvě veličiny. Znamená to, že dvě z těchto podmínek jsou redundantní i v obecném případě, nebo se jedná o náznak, že nějaké vlastní funkce schází? Odkud se v rov. (2.3) bere požadavek $k_y > 0$?
- Diskutujte případné rozdíly mezi kalibracemi, a fyzikální význam tlumení γ .

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta: V Praze dne 9. srpna 2023