

Posudek diplomové práce Jana Kulveita.

Studium nukleace kvantových teček.

Předložená diplomová práce se zabývá vznikem velmi malých útvarů v systému nosná krystalická matrice s cizí příměsí. Pokud rozměr těchto útvarů nepřekročí řádově násobky mřížkových vzdáleností matrice jsou vlastnosti těchto útvarů bližší vlastnostem velkých molekul a jejich popis vyžaduje kvantově mechanický přístup. Pro trojrozměrné útvary se proto rozšířil název kvantové tečky. Reálně ovšem mohou vznikat i dvourozměrné popř. jednorozměrné útvary.

Vznik kvantových teček a modelování jejich vzniku od počátku tzv. „very early stage“ je stále předmětem zvýšeného zájmu. Na tomto poli existují dva hlavní přístupy. Jeden je založen na statistickém řešení úlohy pravděpodobnosti vytváření párů příměsí a následných vyšších útvarů většinou s využitím metody Monte Carlo. Druhý je založen na řešení energetické bilance při vzniku shluků příměsí a využití principů termodynamiky. Tato metoda je fyzikálně průhlednější a provedené aproximace (které vyžaduje každý výpočet) jsou lépe kontrolovatelné. Je také základem modelových výpočtů v předložené diplomové práci.

Práce je rozdělena do čtyř kapitol. První má obecný charakter informace o principech kvantovém počítání popř. kvantových počítačů, kde se čeká jedno z využití kvantových teček. Reálně je ale tento cíl asi ještě hodně vzdálen pokud nedojde ke zlomovému pokroku v technologii (jako např. v minulosti v oboru supravodičů). Podstatně blíže se jeví aplikace kvantových teček (resp. kvantových trubek) při konstrukci tenkovrstvých fotovoltaických článků, biologických senzorech nebo mikrolaserech. Druhá kapitola podává přehled o přístupu k popisu nukleace, která je vlastně obecným popisem tvorby prvotních shluků resp. zárodků. Metodika byla již úspěšně použita při modelování kondenzace z par nebo krystalizace z taveniny. V podstatě nedotčená je ale oblast modelování vzniku cizí nanofáze v pevné látce resp. krystalické matrici. Systém „solid-solid“ přináší požadavek na započtení dalších důležitých parametrů do nukleačních rovnic, z nichž jsou v kapitole rozebrány napětí a „misfit“ na rozhraní zárodku a matrice. Je možné předpokládat, že tyto příspěvky budou důležité pro vývoj zárodečného shluku.

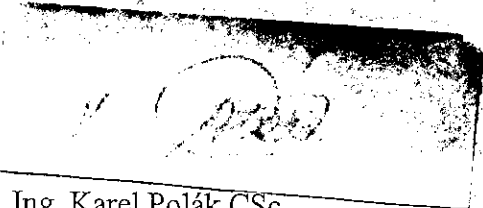
Třetí a čtvrtá kapitola je věnována konkrétním modelovým výpočtům a to na velmi jednoduchém systému kubická mřížka NaCl nebo KCl s přítomností dvouvalentní příměsí Pb^{2+} . Tyto krystaly s různými dvouvalentními příměsemi byly často předmětem jak experimentálních tak teoretických prací a proto dávaly i dobrý základ pro další krok v modelování tvorby nanofáze. Je dobré zdůraznit, že autor přistoupil k popisu tvorby nanofáze ve všech vývojových stádiích tj. od tvorby dimérů nebo trimérů až po růst nadkritických zárodků. Použitý přístup dovolil provést porovnání energetické bilance různých prvotních uspořádání trimérů a tetramérů a vyslovit i předpověď dalšího vývoje kvantových teček ve výše uvedených systémech. Je nutné vyzdvihnout, že obdržené výsledky dobře korelují s experimentálními výsledky, které pro NaCl ukazují na vznik $PbCl_2$ nanofáze zatímco pro krystal KCl se srovnatelnou koncentrací příměsí Pb^{2+} preferují vznik Suzukiho fáze. K této části mám jedinou připomínku: pro posílení argumentace o charakteru preferovaného uspořádání ve vznikající cizí fázi by bylo vhodné znát míru nepřesnosti vypočtených hodnot energie klastrů vzhledem k tomu, že rozdíly pro různé klastry nejsou velké.

Autor v předložené práci prokázal velmi kreativní přístup k zadané úloze a značnou dávku znalostí jak z fyziky, tak i použité matematiky. Splnil zcela počáteční záměr a

rozpracoval metodu, kterou lze použít při modelování vzniku nanoútvárů v krystalických maticích. Z tohoto hlediska navrhuji ohodnotit předloženou práci nejvyšším kvalifikačním stupněm. Autor uvedl všechny literární prameny a použité výpočetní metody. Práce splňuje všechny požadavky předepsané zákonem.

Závěr: doporučuji přijmout předloženou práci k obhajobě.

V Praze dne 12.5.2010.



Ing. Karel Polák CSc
FZÚ AVČR, v.v.i.