

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího  posudek oponenta  
 bakalářské práce  diplomové práce

Autor/ka: **Ondřej Krejčí**

Název práce: **Teoretické výpočty interakce adsorbátu s orientovanými povrchy Si**

Studijní program a obor: **Fyzika; Biofyzika a chemická fyzika**

Rok odevzdání: **2013**

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: **Mgr. Martin Ondráček, Ph.D.**

Pracoviště: **Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i.**

Kontaktní e-mail: **ondracek@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:

Diplomová práce O. Krejčího se zabývá studiem rekonstrukcí povrchu křemíku Si(111) a adsorbci molekuly benzenu na povrchu Si(111)-7x7. Práce obsahuje shrnutí dosavadního stavu problematiky, vlastní teoretické výsledky získané výpočty programem Fireball a experimentální výsledky převzaté od blízkých spolupracovníků (P. Kocán, A. McLean, M. Švec), s nimiž autor své teoretické výsledky porovnává, stejně jako s experimentálními i staršími teoretickými výsledky publikovanými v odborné literatuře. Hlavními výsledky práce spočívají v (1) navržení nové struktury, která vysvětluje experimentálně pozorovanou rekonstrukci  $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$  Si(111), dále (2) v teoretickém prověření možnosti odlišit adsorbovanou benzenovou molekulu od vakance nebo kontaminace v podobě vodíku pomocí STM a konečně, z obecnějšího pohledu, (3) v otestování možnosti a omezení metody implementované v programu Fireball při použití na povrch Si porovnáním s publikovanými výsledky jiných standardních implementací DFT (což lze v budoucnu využít při studiu obdobných, ale složitějších struktur, příliš velkých pro náročnější metody). Práce je přehledně strukturovaná, úvodní shrnutí dosavadního stavu velmi dobře vyvažuje nároky na přesnost a úplnost na straně jedné a stručnost na straně druhé. Stejně tak jsou v dalších částech přehledně prezentovány vlastní výsledky, včetně jejich diskuse v kontextu skutečností známých z experimentu a z literatury. Dobrý dojem ale kazí větší počet chyb, které nasvědčují nedostatečně pozorné kontrole textu autorem. Většinou se jedná o drobné tiskové a jazykové chyby, v několika případech ale mají tyto "chyby z nepozornosti" vliv na věcnou správnost textu, i když i ve většině těchto případů pravděpodobně dokáže čtenář obeznámený s problematikou z kontextu dovodit správnou formulaci. Konkrétní příklady uvádím v odstavci níže v souvislosti s otázkami na diplomanta a náměty k diskusi a také v příloze k posudku.

### Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Níže uvedené body s otázkami, komentáři, výhradami apod. podrobněji rozvedu v příloze.

(1) Rovnice (1.9), (3.5) a (3.9) obsahují nepřesnosti. (2) Jaká jsou kriteriá kladená na pseudopotenciál a pseudo-vlnovou funkci v metodě normu zachovávajících pseudopotenciálů? (3) Při které polaritě napětí jsou lépe patrné rozdíly mezi půlcelami rekonstrukce Si(111)-7x7? Text na str. 25 dole v tomto odporuje obrázku 2.11 na téže straně. (4) Tvrzení na str.37, že simulace STM byly provedeny v režimu konstantního proudu, je v rozporu s údaji na jiných místech a zřejmě chybné. Je tedy snadnější modelovat režim konstantního proudu nebo režim konstantní výšky a proč? (5) Jak vypadá hypotetická rekonstrukce označená jako "buckled (2)"? (6) Rozdíl energie 0.15 eV mezi Pandeyho strukturami 2x1-r a 2x1-l (str. 37) je pravděpodobně chybně, odporuje tabulce 4.2. (7) Stejně tak je pravděpodobně chybně údajná bariéra 0.47 eV pro přechod mezi izomery "Pandey-like" struktury, nebo není dostatečně vysvětlen způsob jejího určení. (8) Hybridizace "žlutého" ("orange") atomu na obr. 4.15 je na str. 46 popsána jako  $sp^3$ , nemá být  $sp^2$ ? (9) Je možnost odlišení vakance od adsorbátu na Si(111) pomocí STM experimentálně ověřená? Jak jsou ovlivněny teoretické výsledky na obr. 4.28b (zejména STM profil pro vakanci) velikostí superbuňky zvolené pro simulaci?

### Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

### Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

# Příloha k posudku na diplomovou práci

Název práce: **Teoretické výpočty interakce adsorbátu s orientovanými povrchy Si**

Autor práce: **Bc. Ondřej Krejčí**

Tato příloha obsahuje podrobnější vysvětlení otázek a připomínek k diplomové práci, které byly stručně zmíněny ve vlastním formuláři posudku

1. Rovnice (1.9) pro elektronovou hustotu v diplomové práci obsahuje nepřesnost, nebo přinejmenším poněkud matoucí značení, týkající se součtu přes spinové konfigurace. Na věcnou správnost dalšího obsahu práce to ale nemá vliv (studované systémy nejsou spinově polarizované). Dále, v rovnici (3.5) pro Bardeenův tunelovací element  $M$  jsou u jednoho ze dvou členů prohozené indexy. Konečně, mám pochybnosti o správnosti rovnice (3.8) pro korekci potenciálové bariéry, z níž by měla údajně plynout rovnice (3.9) (exponenciální korekce tunelového proudu při vyšších napětích). Citovaná práce Blanco et al., Prog. Surf. Sci. 81, 403-443, uvádí rovnici (84), která je analogií (3.9) z diplomové práce, ale pro samotnou změnu potenciálové bariéry uvádějí Blanco a kol. jiný model než (3.8).
2. Zatímco v případě většiny teoretických konceptů používaných v diplomové práci jsou jejich základy vysvětleny v úvodních kapitolách dostatečně přesně a výstižně (s ohledem na rozsah práce), koncept normu zachovávajících pseudopotenciálů (podkapitola 1.2.4.2) by si podle mého názoru zasloužil o něco lepší vysvětlení. Zejména by bylo vhodné zmínit rozdíl mezi tvarem skutečného ("all-electron") potenciálu a pseudopotenciálu a mezi skutečnou vlnovou funkcí valenčních elektronů a pseudofunkcí (v čem se shodují, v čem naopak liší).
3. V komentáři k obrázku 2.11 na straně 25 dole je uvedeno, že adatomy ve "faulted" půlcele se jeví jako světlejší než adatomy v "unfaulted" půlcele při kladném napětí, ale ve skutečnosti je tento rozdíl patrný spíše při záporném napětí, jak je vidět i ze samotného obrázku.
4. Tvzení na str. 37, že simulace STM byly provedeny v režimu konstantního proudu ("All my simulations of STM maps were done in constant current mode, which is much easier to compute") je evidentně chybné, má být "in constant height mode" (v režimu konstantní výšky), jak plyne z dalšího textu i z toho, že právě režim konstantní výšky (a ne režim konstantního proudu) se snadněji numericky modeluje.
5. Popis rekonstrukce označované jako "buckled (2)" na str. 38 "two up atoms and two down atoms" je pravděpodobně chybný. Předpokládám, že podobně jako u rekonstrukce "buckled (1)" se svrchní vrstva skládá ze tří atomů na jednu periodickou buňku, správně má tedy být nejspíše jeden atom dole (a dva nahoře), je tomu tak?
6. Na str. 41 se uvádí, že rozdíl energie mezi Pandeyho rekonstrukcemi  $2 \times 1-l$  a  $2 \times 1-r$  (mimoходом, je vztažen na buňku  $2 \times 1$  nebo na  $1 \times 1$ ?) je 0.15 eV, ale tabulka 4.2 ukazuje, že rozdíl musí být řádově menší (snad 0.015 eV?). Navíc, podle tabulky je energie  $2 \times 1-r$  nižší, ale na str. 41 se tvrdí, že  $2 \times 1-l$  je (z hlediska energie) výhodnější. Jaké tedy byly skutečné výsledky?
7. Na str. 47 se uvádí, že bariéra pro překlopení mezi dvěma isomerickými konfiguracemi "Pandey-like" struktury přes strukturu označovanou jako "buckled" je 0.47 eV. Jak se k této hodnotě dospěje? Z tabulky 4.2 by plynula hodnota asi 0.04 eV na jednu buňku  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ . Jde tedy opět o tiskovou chybu a mělo být např. 0.047 eV? Nebo jde o sofistikovanější, ale v práci nevysvětlený způsob určení bariéry? Je pravda, že charakterizovat bariéru energií vztaženou na jednu elementární buňku může být ošidné: k překlopení z jednoho isomeru na druhý může docházet najednou ve větší doméně zahrnující více buněk, takže efektivní bariéra by pak byla skutečně vyšší, než by odpovídalo rozdílu spočtenému z rozdílů energií v jedné buňce.
8. Při popisu vytváření "Pandey-like" rekonstrukce se na str. 46 uvádí, že hybridizace atomu

zakresleného na obr. 4.15 žlutě se mění z  $sp^2$  na  $sp^3$ , ale vzhledem k počtu a geometrii vazeb by tomu mělo být spíš naopak, z  $sp^3$  na  $sp^2$ .

9. Na obr. 4.28b (simulovaný STM profil) mě překvapuje, že vakance (na rozdíl od adsorbátů) snižuje proud nejen lokálně, ale v celé buňce  $7 \times 7$ . Tím je také možné podle teoretické předpovědi autora odlišit vakanci od adsorbátu. Nenasvědčuje ale ovlivnění celé elementární buňky, že by při simulaci izolované vakance měla být použita modelová struktura s více než jednou elementární buňkou v supercele? Jsou k dispozici experimentální výsledky s naměřenými profily vakancí?

V Praze dne 17.5.2013

Mgr. Martin Ondráček, Ph.D. (oponent)