

## Posudek na diplomovou práci

### **Pavel Šopík: Vliv slabé elektronové korelace na elektronové vlastnosti neuspořádaných kondenzovaných systémů**

Posuzovaná diplomová práce je věnována problému elektronových korelací v neuspořádaných slitinách kovů a jejich vlivu na magnetický stav systému. Systém je popsán na modelové úrovni jednopásovým Hubbardovým hamiltoniánem s náhodností v atomových hladinách. Řešení je založeno na poruchovém přístupu k teorii mnoha částic, kdy vlastní energie je aproximována s přesností do členů lineárních v párové interakci  $U$ , což odpovídá Hartreeho přiblížení. Neuspořádanost substitučního typu je pojednána v aproximaci koherentního potenciálu (CPA). Autor studuje nejenom jednočásticové veličiny (jednočásticovou Greenovu funkci, vlastní energii) ale také dvoučásticové veličiny (dvoučásticovou Greenovu funkci a dvoučásticovou vrcholovou funkci).

První tři kapitoly představují v podstatě referativní část práce. Autor po krátkém úvodu, věnovaném Hubbardovu modelu, podává odvození aproximace koherentního potenciálu a to potom aplikuje na systémy v nemagnetickém a ve 3.kapitole i na systémy v magnetickém stavu. 2. a 3.kapitola nemají však pouze referativní charakter, autor ilustruje vlastnosti uvedených aproximací na podkladě vlastních rozsáhlých numerických výpočtů. Vlastní těžiště práce a její hlavní přínos je ve 4.kapitole, kde autor vyšetřuje vlastnosti dvoučásticových veličin, zejména ireducibilního vertexu a ukazuje, že ve zvolené aproximaci ireducibilní vertex má difuzní pól. Protože jde již o velmi složitou veličinu, její vlastnosti analyzuje převážně na základě numerických výpočtů.

Práce je napsána vcelku logicky a přehledným způsobem. Vlastní přínos práce pokládám za významný, dle mého názoru výsledky získané pro ireducibilní vertex jsou originální a zajímavé.

V práci jsem našel i některé nedostatky, příp. nedůslednosti:


- (1) Ve 3.kapitole jsou výpočty provedeny pro konstantní chemický potenciál  $\mu$ , přirozenější by bylo předpokládat konstantní počet částic.
- (2) Pokud má vlastní energie  $\Sigma$  pól, nemůže mít zároveň pól i Greenova funkce  $G$ , protože ta obsahuje  $\Sigma$  ve jmenovateli. Tento pól je ale vidět v hustotách stavů na obrázcích 2.2, 3.4-3.7 a 3.11-3.12.
- (3) Diskuse za rovnicí (4.6) je poněkud zavádějící: z předpokladu, že  $\Sigma$  a  $G$  jsou lokální v uzlové reprezentaci se vyvozuje, že i  $\lambda$  je lokální, ale dále se pracuje s nelokální  $G$  (např. v rovnici (4.13)). Podle mého názoru  $\lambda$  není lokální veličina, ale ve 4.kapitole autor prostě pracuje s její lokální částí.
- (4) V příloze A jsou pro semieliptickou hustotu stavů odvozeny výrazy pro funkce  $G(z)$  a  $R(z)$  v dosti složitém tvaru. Obvykle se ale používá mnohem jednodušší vyjádření pomocí funkce  $F_0(z) = 2z[1 - \sqrt{1-z^2}]$  (pro  $w=1$ ) a funkce  $R(z)$  se dá vyjádřit s pomocí derivace  $F'_0(z)$  (viz např. B. Velický, S. Kirkpatrick, and H. Ehrenreich, Phys. Rev. **175** (1968), 747). Není použití složitých výrazů příčinou vzniku pólů  $G(z)$  v některých výpočtech?
- (5) V příloze B funkce  $g(z)$  nespĺňuje rovnici (B.6) tak jak je napsána (limita vůbec neexistuje), je nutné zavést posloupnost kružnic o poloměrech  $R_n = 2n\pi/\beta$  a pro ni provést limitní přechod.

Navrhuji, aby diplomant v diskusi při obhajobě tyto otázky vysvětlil. Ještě drobnost: v češtině používáme křivkový integrál, nikoliv konturový.

Přes uvedené nedostatky, práci hodnotím kladně. Řešené téma je aktuální, použité metody jsou vhodně zvolené a práce přispívá k dalšímu rozvoji vědního oboru. Diplomant se dobře orientuje v teorii korelovaných systémů s náhodností, provedl rozsáhlé výpočty, kterými vhodně ilustroval vlastnosti použitých aproximací a diskutoval jejich fyzikální vlastnosti. Celkově prokázal své schopnosti k práci v teoretické fyzice.

Na základě uvedených skutečností pokládám předloženou diplomovou práci za velmi solidní, byť s určitými, i když nepříliš závažnými nedostatky, a doporučuji ji klasifikovat známkou **velmi dobře**.

V Praze 12.9.2006



RNDr. Václav Dřchal, CSc  
Fyzikální ústav AV ČR  
Na Slovance 2  
182 21 Praha 8