

Posudek školitele na diplomovou práci B. Šopíka

"Vliv slabé elektronové korelace na elektronové vlastnosti neuspořádaných kondenzovaných systémů"

Kondenzované systémy jsou složité objekty jejichž chování je ovlivněno mnoha různorodými vlivy. Třebaže makroskopické vlastnosti kondenzovaných látek jsou určeny pouze nízkoenergetickými fluktuacemi ve Schrödingerově rovnici, ani zjednodušené modely chování krystalických pevných látek nevedou na exaktní řešení. Chování kovů a jeho slitin v nízkých teplotách je dominováno vodivostními elektrony, tj., nábojovými excitacemi na Fermiho energii. Elektronová struktura kovů je potom kromě typu krystalické mřížky nejmarkantněji ovlivněna dvěma aspekty: příměsími a nečistotami v pravidelné krystalické struktuře a elektronovými korelacemi. Tato kombinace vlivů vede již na tak komplexní jevy, že jejich spolehlivý popis dodnes neexistuje ani v té nejjednodušší podobě, jakou je termodynamická teorie středního pole.

Cílem diplomové práce bylo na zjednodušeném modelu zkoumat vzájemné působení elektronových korelací a neuspořádanosti. Jelikož úplný neporuchový popis elektronových korelací a neuspořádanosti je příliš náročný, byl vliv elektronových korelací redukován na Hartreeho (semiklasické, statické) přiblížení slabé korelace v těsnovazebním jednopásovém Hubbardově modelu. Takto započtené elektronové korelace byly pak společně s neuspořádaností zkoumány v rámci neporuchové teorie středního pole.

Motivace a cíle práce jsou formulovány v úvodní kapitole. V druhé kapitole je konstruována termodynamická teorie středního pole pro slabě korelované neuspořádané elektrony pomocí generujícího funkcionálu velkého kanonického potenciálu. Stacionární body tohoto funkcionálu pak definují základní rovnice pro jednočásticové funkce. Pomocí těchto rovnic je v paramagnetické fázi numericky analyzován vliv elektronové korelace na neuspořádanosti indukované rozštěpení spektrální funkce.

Třetí kapitola je věnována zkoumání vlivu fluktuací náhodného potenciálu na vznik feromagnetického uspořádání v Hartreeho přiblížení. Je zobecněno Stonerovo kritérium vzniku feromagnetického stavu na neuspořádané systémy a je analyzována spektrální funkce pro spinově polarizované řešení. Zajímavým novým poznatkem bylo zjištění, že feromagnetické řešení v binární slitině má dvě možné realizace. V jedné klastery spinů na atomech jedné i druhé komponenty slitiny jsou paralelní, kdežto v druhé pak antiparalelní.

Poslední čtvrtá kapitola je věnována vlivu elektronových korelací na dvoučásticové vrcholové funkce důležité pro nábojovou difuzi a elektrickou vodivost. Tato kapitola přináší nejvíce nových poznatků. Jedná se především o zjištění, že vrcholová funkce se rozpadne na dva příspěvky zobecňující samostatně vrcholové funkce z neuspořádaných neinteragujících a korelovaných systému bez náhody. Pouze první člen obsahuje difusní pól. Slabé elektronové korelace tedy neovlivní existenci a charakter difusního pólu a nezmění ani obraz jevu Andersonovy lokalizace vytvořený pro Fermiho plyn v náhodném potenciálu.

Zpracování diplomové práce vyžadovalo zvládnutí a osvojení teoretických postupů a řešení neuspořádaných a mnohočásticových systémů v rámci teorie středního pole formulované pomocí matematické limity nekonečně rozměrné hyperkubické mřížky. Nad rámec této teorie bylo pak potřeba pochopit metodiku určení spektrálních vlastností dvoučásticových funkcí. Hlavní vlastní přínos a samostatná práce diplomanta spočívala v numerickém zpracování teoreticky odvozených rovnic.

V metodicko-teoretické části zůstala diplomová práce trochu za očekáváním. To se projevilo v

pasážích věnovaných odvozením fundamentálních rovnic. Zde třeba i poměrně obtížné a ne zcela evidentní kroky jsou redukováány do jedné věty nebo pouhého konstatování, např. odvození rovnic (2.2) nebo (4.7) by podle mne vyžadovaly detailnější rozbor pro lepší sledovatelnost postupu. Na některých místech rovněž není jasné, zda tvrzení (matematické vyjádření) je převzato z literatury nebo se jedná o mínění (vlastní zjištění) autora, např. vztah (2.19) a text pod ním. Na str. 30 se autor zmiňuje o pólu v selfenergii, ale ve skutečnosti se jedná o pól v Greenově (spektrální) funkci.

Na druhé straně se diplomant velice dobře, nadstandardně vypořádal s numerickým zpracováním výsledných rovnic. Zde se ukázal velice flexibilní a schopný rovnice nejen spolehlivě numericky zpracovat, ale i jejich řešení vhodně graficky prezentovat. Toto je dokumentováno velkým množstvím grafických výstupů diplomové práce.

Diplomová práce je napsána solidně jen s malým počtem překlepů, i když na některých místech působí jazyk archaicky (časté používání nevlastních přívlasků). Některé víceřádkové rovnice (kap. 4) jsou nešikovně zarovnány na pravý okraj, což není ani běžné ani příliš estetické. Celkově však hodnotím diplomovou práci jako zdařilou s tím, že stanovené cíle byly splněny.

Přikláním se klasifikovat diplomovou práci známkou velmi dobře. Pokud by však prezentace práce byla výborná a diplomant komisi přesvědčil, že teoretickým postupům plně rozumí, je možné práci klasifikovat i známkou výborně.

Praha, 13. září 2006



Prof. RNDr. Václav Janiš, DrSc.