

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Jaroslav Hofierka
Název práce: Convergence of the embedding scheme
Studijní program a obor: Teoretická fyzika
Rok odevzdání: 2019

Jméno a tituly oponenta: doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D.
Pracoviště: UTF MFF UK
Kontaktní e-mail: Martin.Cizek@mff.cuni.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:

Jaroslav Hofierka se ve své práci zabývá interakcí atomů a molekul s rozlehlymi systémy dimenze 1 (dlouhé molekulární řetězky) a dimenze 2 (list grafénu a nitridu boru). Po pěkném úvodu do studované problematiky nejdříve podává úvod do výpočetních metod založených na Greenově funkci, který je rešeršní povahy. Následující dvě kapitoly představují těžiště práce. První z nich studuje interakci atomu se substrátem pomocí modelu těsné vazby, přičemž využívá analytických výsledků pro Greenovy funkce z literatury pro vlastní výpočty v modelech a v druhé studuje realističtější popis interakce konkrétních atomů a molekul s několika typy substrátů využitím standardních ab initio metod pro výpočty elektronové struktury.

Práce je poměrně rozsáhlá, je napsaná pěknou angličtinou a také po grafické stránce působí pečlivým dojmem. Jako její slabinu spatřuji numerickou stránku. V případě, kde autor provádí numerické výpočty, je občas obtížné z textu detailně pochopit, co přesně udělal a v některých případech by si numerické výpočty zasloužili podrobnější diskusi a někdy snad i mírné rozšíření. Konkrétní výtky a podněty k případné další práci přikládám na zvláštním listě.

Navzdory tomu práce plně splňuje požadavky kladené na diplomovou práci a doporučuji ji uznat jako diplomovou. Pokud diplomant uspokojivě odpoví na následující otázky, doporučuji ji hodnotit stupněm výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuse:

- 1) Čítatel a jmenovatel ve zlomku v rovnici (2.26) jsou operatory, které navzájem nekomutují. Zápis ve tvaru zlomku tudíž nemá smysl a je třeba stanovit pořadí operátorů. Opravte výraz.
- 2) Opravte popis osy y v obrázcích 3.1 – 3.6.
- 3) Diskutujte zdroje numerických chyb v obrázku 3.9.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Velvary 13. 6. 2019

DODATEK – konkrétní připomínky, komentáře a náměty pro další práci

strana 4: zkratka GW není vysvětlena.

strana 13: symbol λ v diskusi pod rovnicí 2.12 není vysvětlen.

"unitary operator" pod rovnicí 2.13 by se mělo nahradit "unity operator".

strana 14: nekonzistentní značení, napsat buď $\sum_j g_{jj}$ nebo $\text{Tr } g$, ale ne $\text{Tr } g_{jj}$

strana 17: je třeba stanovit pořadí operátorů v rovnici 2.26

strana 19: V rovnicích 2.39 a 2.40 by měla být plná Greenova funkce G a ne g stejně jako v diskusi pod ní.

Rovnice 2.37. je legrační a funguje jen pokud (obecně různá) spektra operátorů H a H_0 lze očíslovat jediným indexem, tj. např. pokud jsou to nekonečné spočetné množiny, ale je to v pořádku, jen legrační.

strana 21: rovnice 2.50, hodilo by se zdůraznit, že I je jednotkový operátor pro region 1, tj. vlastně projektor na region 1

sekce 3.1. Moc se mi nelíbí toto odvození modelu těsné vazby. Myslím, že je při nejmenším zavádějící. Například potenciál V v rovnici 3.3 vůbec nemusí existovat jako lokální operátor. Také další kroky vedoucí k rovnicím 3.4 a 3.5 nejsou moc dobře vysvětlené a vůbec si nejsem jistý, jestli jsou dobře. Nicméně výsledná rovnice 3.8 a předpoklad 3.7 jsou správně a model jako takový není třeba odvozovat, dá se prostě postulovat jako vhodný "toy model" systém takže to není velká závada.

strany 25-32: Nelíbí se mi popis osy y v obrázcích. Na ose y je funkce g v jednotkách $1/\text{energie}$.
obecná poznámka k faktoru η

limitu $\eta \rightarrow 0$ je lepší koordinovat s limitou počtu atomů $N \rightarrow \infty$.

Obecně pro větší N lze brát menší η . Je fyzikálnější vždy volit η větší než je rozstup hladin reprezentující diskretizované kontinuum.

obrázek 3.9: výsledky numerického výpočtu působí velmi neprofesionálně. Jsou evidentně zatíženy nějakým numerickým šumem, který není nikde komentován.

Jednorozměrný integrál jako 3.64 by mělo být možno vypočítat s přesností 10 cifer a ne 10 procent.

strana 43. Volba indexu číslicích části systému 1 a 2 není šťastná, plete se s dřívějším číslováním atomů. Raději bych volil něco jako A a B nebo často používané P a Q (Feshbachův formalismus).

odstavec 3.4.2. Ve výrazech, kde se už vyskytuje selfenergie pro okrajové atomy, není třeba brát nenulové η , protože nenulová imaginární část je už v selfenergii.

strana 46. druhý odstavec sekce 3.4.3 - je správný můj dojem, že $\hbar^2/4\pi^2$ by šlo napsat jako \hbar^2 nebo tam chybí \bar{h} v původním výrazu?

strana 47. nahoře - uvedené schéma s nulami a ležatými osmičkami by bylo lepší dát jako extra obrázek s vysvětlujícím popiskem.

obrázek 3.15 - je $t = \tau$ „weak?“ ja bych za „weak“ označil spíš něco jako 0.1τ

obrázek 3.16 a další podobné: není moc vysvětlené co vlastně vidíme. Předpokládám, že došlo k diagonalizaci hamiltoniánu (jakou metodou?) a energie nalezených stavů jsou na ose x a koeficient C_a na ose y , ale je to spočtené s nenulovou η ? Nebo je to spočtené z rezolventy? Nekonečná limita je spočtená z rezolventy se selfenergii? Bylo by dobré lépe popsat, nejlépe s odkazy na konkrétní vzorce.

strana 49: slovo „calculated“ zdvojené.

obrázky 3.18-3.19 Myslím, že nulové koeficienty nejsou záhadou. Jde o stavy, které mají nulový koeficient na adatomu z důvodu symetrie. Pro grafén má model C_{3v} symetrii. Adatom leží na ose symetrie a tedy jen stavy odpovídající totálně symetrické reprezentaci A_1 mohou

mít nenulový koeficient C_a . Stav odpovídající dvourozměrné ireducibilní reprezentaci E a jednorozměrné reprezentaci A_2 se nekplují na adatom a koeficient musí být striktně nulový v LDOS se tato nula neprojevív, jen sníží celkovou magnitudu. Pro $N=5$ atomů se dá spočít, že z důvodů symetrie se mohou kaplovat jen 3 stavy a pro $N=20$ jen 6 stavů. V obrázku ' pro $N=20$ tedy většina stavů s malým C_a dá dokonce nulový příspěvek kvůli symetrii a jen 1-2, kvůli tomu, že jsou lokalizované na povrchu.

obecná poznámka k sekci 3.4.4

Bylo by zajímavé zkusit to pro větší kus substrátu. 38 atomů je dost málo, zvláště pro BN, kde není k dispozici analytické řešení. Také by bylo zajímavé experimentovat s přibližnou selfenergií na okrajových atomech.

strana 62: geometrie systému není moc dobře vysvětlena. Například není jasné, jestli je adatom umístěn kolmo na rovinu molekuly a nikde to není explicitně řečeno.

strana 64: „distance“ na ose x – jde o vzdálenost nejbližšího atomu, nebo těžiště? Lépe popsat!

strana 65: geometrie klastrů na obrázku 4.6. nerespektují symetrii nekonečného systému což, jak jsme viděli u modelu těsné vazby, má velký vliv na lokální hustotu.

bibliografie: dost často se vyskytují neúplné citace ([2],[19],[26],[29],[33],[39]...).

Také by bylo vhodné upravit formát všech citací do jednotné podoby.