

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Daniel Herman
Název práce: Electron-phonon Coupling in Finite Multi-Chromophoric Systems
Studijní program a obor: Obecná fyzika
Rok odevzdání: 2020

Jméno a tituly vedoucího: Tomáš Mančal
Pracoviště: Fyzikální ústav UK
Kontaktní e-mail: mancal@karlov.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/opponenta:

Předložená práce podává úvod do teorie otevřených kvantových systémů se zaměřením na molekulární systémy v interakci s molekulárním okolím. Typickým představitelem takových systémů jsou např. fotosyntetické antény. Práce poskytuje přehled základní teorie tzv. statistického operátoru (matice hustoty) a jeho pohybových rovnic. Z Liouville-von Neumannovy rovnice pro matici hustoty velkého uzavřeného systému je odvozena obecná rovnice pro

redukovanou matici hustoty malého otevřeného podsystemu v interakci se svým okolím. Potud řešeršní část práce. Obecná teorie je pak aplikována na speciální přesně řešitelný případ – malý systém představovaný několika dvojhladinovými systémy v interakci s malým počtem harmonických oscilátorů. V tomto systému je provedena další redukce na ještě menší podsystem, přičemž „okolí“ tohoto systému je samo také malé. Na tomto modelu je potom ilustrováno, jak taková redukce funguje a jsou odvozeny přibližné (poruchové) pohybové rovnice technikami podobnými technikám obvykle uplatňovaným na nekonečná molekulární okolí. Různé postupy odvození přibližných rovnic jsou porovnány. Pro tato porovnání autor implementoval numerická řešení Schrödingerovy, Liouville-von Neumannovy a dalších rovnic (např. konvolučních rovnic pro redukovanou matici hustoty) a otestoval hranice řešitelnosti těchto rovnic pro různě velké modelové systémy. Velikostní hranice poměrně striktně nastavuje výkon dnešních počítačů, ať už velikost jejich paměti, či rychlost zpracování, neboť numerická reprezentace kvantových systémů roste exponenciálně s počtem stupňů volnosti.

Práce je psána anglicky na slušné úrovni a přináší výsledky převzaté z literatury i vlastní teoretické výdobytky autorovy. Přesto, že by bývalo bylo cennější srovnávat přesná řešení s úplně standardními odvozeními redukovaných pohybových rovnic (tedy např. s teorií Redfieldovou) jsou srovnání s různými autorskými redukovanými rovnice také poměrně užitečná. Kromě vlastní implementace výpočtů v jazyce Julia, vylepšil autor také některé funkce pythonovského balíku Quantarhei vyvíjeného školitelem za účelem simulace otevřených kvantových systémů. Celkově prokázal autor práce dobrou orientaci v problému a sepsal práci, na kterou je v budoucnosti možné bez problémů navázat. Práci doporučuji uznat jako bakalářskou se známkou výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze, 30. 8. 2020

Tomáš Mančal