



V Praze dne 13.12.2010

Posudek disertační práce Ivana Pshenichnyuka*“Interaction of electrons with vibrating molecules: molecular electronic applications”*

Ve shodě s názvem se předložená práce zabývá teorií transportu elektronů přes jednu molekulu v uspořádání tunelovací spektroskopie kov-molekula-kov. Práce podává důkladnou diskusi tunelovacího proudu a vybuzení rotačních stupňů volnosti molekuly v závislosti na parametrech přibližného modelu mechanického pohybu molekuly.

Autor řeší problém metodou projekčních superoperátorů, kterými oddělí molekulu od kontaktů. Kontakty jsou započteny v nejnižším řádu poruchového rozvoje v přeskokovém členu. Přesnost tohoto přiblížení je ukázána na elastickém tunelování nehybnou molekulou, pro které je známo přesné řešení. Nutnost použít pohybovou rovnici je doložena na tunelování přes stav s účastí mnoha fononů. Běžně užívaný předpoklad stálého teplotního rozdělení fononů vede na tunelovací proudy značně odlišné od úplného řešení se započtením jejich nerovnovážného rozdělení v důsledku interakce s tunelujícími elektrony. Na těchto srovnáních autor dokládá vhodnou volbu metody.

Model molekuly s rotačním stupněm volnosti vyžaduje numerické řešení, jehož výsledky tvoří hlavní přínos práce. Na řadě postupně složitějších modelů autor ukazuje, které prvky musí obsahovat model schopný popsat předepsané roztočení molekuly tunelovacím proudem. Vyjasnění správného modelu je důležitým příspěvkem k současné problematice molekulárních motorů

Práce je napsaná srozumitelně a poměrně poutavě až na patnáct patrně zbytečných stránek popisu řetězkových kontaktů a Landauerovy formule. Protože toto známé řešení je použito pouze pro kontrolu a přiblížení užívané autorem z něj bere pouze hustotu stavů kontaktu, bylo možné jeho výklad zkrátit. Druhým nešvarem je označování různých přibližných modelů čísly, např. c3, což nutí čtenáře stále vracet z kapitoly 5 ke kapitole 3 a dohledávat, které parametry má právě rozebíraný model. Krátká výstižná jména modelů by pomohla plynulejší četbě. Autor také málo člení text do odstavců, takže některé odstavce

končí o dvě strany dále, což dělá text méně přehledný. Přes tyto drobné nedostatky je práce čtivá, především díky vhodně volenému pořadí předkládaných informací.

Mám otázku.: Uvažoval jste o započtení vlivu okolí na molekulu? Jedná se především o mechanismy obnovující rovnovážné rozdělení její rotace, tedy tření a tepelný šum.

Práce prokazuje studentovu schopnost samostatné tvůrčí práce a splňuje požadavky nutné k obhajobě PhD v oboru teoretická fyzika.

Doc.Pavel Lipavský,CSc.