

Problém vlastních čísel symetrických řídkých matic v souvislosti s výpočty elektronových stavů

Matyáš Novák

Posudek Diplomové práce

Hlavním cílem autora bylo popsat a implementovat postup výpočtu elektronových stavů numerickým řešením mnohočásticové Schrödingerovy rovnice pro neperiodické struktury. Celý postup je novou metodou, která je založena na pseudopotenciálových aproximacích, diskretizaci metodou konečných prvků, výběru algebraické metody pro výsledný problém vlastních čísel, její implementaci a vytvoření příslušného kódu. Výsledný postup má mnohá specifika, kde tím hlavním je převedení problému na řešení symetrické úlohy vlastních čísel s maticí postupně aktualizovanou maticemi nízké hodnoty.

U takto rozsáhlého postupu od fyziky a fyzikálních zákonů mikrosvěta až k simulacím je těžké hovořit o těžišti, nicméně autor implicitně navrhuje rozsahem kapitol mít těžiště ve výběru metody pro řešení problému vlastních čísel. Je to asi šťastná volba, protože se dá předpokládat, že právě řešení problému vlastních čísel je úzkým hrdlem celého postupu a hledání nových a robustních metod je jasným úkolem při postupu k větším neperiodickým strukturám v budoucnu.

Nebudu se zde věnovat podrobnému popisu kapitol práce. Zkusil bych místo toho pouze zmínit některé klady a zápory práce. Mezi klady práce jednoznačně patří

- široký tematický záběr, který neskončil na půli cesty
- velmi dobrá orientace v použitelném software, jeho spojování a schopnost navazovat na existující příspěvky v oboru. Právě tato poslední znalost je v této oblasti velmi potřebná
- ukázka, že v některé oblasti je možné proniknout hlouběji do podstaty. Oceňuji, že to je právě problém vlastních čísel, kde autor musel nastudovat řadu věcí, které nejsou ve fyzikální komunitě zrovna běžné.

Následující poznámky míří k motivaci případných otázek v rámci obhajoby. Nemohu říci, že je považuji za úplné zápory práce, ale je asi vhodné se nad nimi zamyslet.

- Přes všechnu práci na tématu by možná bylo vhodné zmínit i jiné přístupy k počítání elektronových stavů v periodických i neperiodických strukturách
- Možná by bylo vhodné více motivovat uváděné algebraické metody, které se vztahují k obecně nesymetrickým či komplexním maticím. Je jasné, že definitivní podoba problému vlastních čísel vykryštovala až během vlastní práce, ale přesto by bylo vhodné okomentovat potřebnost obecnějších postupů pro případná zobecnění celé techniky nebo pro jiné účely.

Práce obsahuje některé drobné přepisy, ale nemyslím si, že by se jejich soupis hodil pro tuto příležitost.

Navzdory uvedeným drobným pochybením se domnívám, že předložená diplomová práce je dobrým základem pro obhajobu. Předmět diplomové práce je aktuální, práce zřejmě dosáhla svého cíle, obsahuje nové výsledky a představuje rozumný startovní bod pro případný další výzkum. Navíc, studenta jsem v průběhu jeho studia tu blíže tu vzdáleněji sledoval a jsem si vědom energie spotřebované na vytvoření této práce.

Hodnotím ji stupněm **v ý b o r n ě**.

V Praze, 2.5.2012

Miroslav Tůma