

Věc: Posudek vedoucího disertační práce

Kandidát: Mgr. Vít Gabriel

Název práce: Kinetic Monte Carlo Simulations in Physics of Thin Films: from Growth to Electronic Properties

Rok odevzdání: 2023

Ve své disertační práci kandidát shrnuje své nejdůležitější výsledky kinetických Monte Carlo (kMC) simulací ve dvou odlišných, ale souvisejících oblastech – prvním velkým tématem je růst tenkých vrstev komplexních materiálů a druhým transport polaronů v příbuzných materiálech. V obou případech se jednalo o aktuální výsledky experimentů, které bylo možno interpretovat díky kandidátovým počítačovým simulacím. Práce obsahuje stručný úvod do studované problematiky, podrobnější rozbor problému u každé ze studovaných oblastí, diskusi simulovaných výsledků a v neposlední řadě detaily počítačové implementace.

V první kapitole je stručně popsán základní algoritmus kMC simulací použitý ve zbytku práce.

Druhá kapitola se zabývá simulacemi růstu perovskitů pomocí pulzní laserové depozice. Zde bylo potřeba překonat mnoho škál – na základě atomárních procesů popsat minuty trvající růst na rozměrech v řádu μ m pro potřeby simulace výsledků rentgenové difrakce (prof. Holý a spol.).

Třetí kapitola se zabývá simulacemi difúze polaronů, nábojů stabilizovaných deformacemi iontové mříže. Chování polaronů určuje elektronické vlastnosti mnoha technologicky klíčových materiálů. Na mikroskopické úrovni se nicméně jedná o oblast prozkoumanou velmi málo. Unikátní experiment (doc. Setvín a spol.) poskytl představu o chování polaronů na úrovni jednotlivých nábojů, tuto představu bylo potřeba ověřit a rozvinout pomocí kMC simulací.

Práce je založena na třech článcích publikovaných v renomovaných časopisech, čtvrtý je tohoto času v recenzním řízení. Publikace nepochybně dokládají aktuálnost studované problematiky. U tří prací je Vít prvním autorem, přesto dizertace není pojata jako komentovaný soubor článků. Výsledky kandidát také průběžně úspěšně prezentoval na mezinárodních konferencích.

Z mého pohledu největší předností kandidáta je schopnost extrémně efektivní implementace použitých počítačových algoritmů. Řešené problémy byly často na hraně výpočetních možností. Bylo tudíž nezbytné nejen zjednodušit systém co nejvíce se zachováním důležitých fyzikálních procesů, ale i optimalizovat počítačovou implementaci. Důležitou součástí dizertace je proto detailní popis této optimalizace.

Během studia Vít prokázal schopnost pracovat v týmu, trpělivost, když bylo potřeba, a celkově byla radost s Vítem spolupracovat. Vít prokázal schopnost samostatné vědecké práce – od zpracování dat přes fyzikální interpretaci po návrh, testování a optimalizaci kódu, a nakonec sepsání rukopisu a úspěšnou publikaci.

Prezentované výsledky jsou významným přínosem pro vědeckou komunitu. Cíle práce tedy považuji za bezpochyby splněné.

Závěrem konstatuji, že Vít Gabriel prokázal schopnost samostatné vědecké práce na mezinárodní úrovni. Odbornou i formální úroveň disertační práce hodnotím jako velmi vysokou. Doporučuji, aby mu po úspěšné obhajobě byl udělen titul Ph.D.

V Praze dne 17.8.2023

doc. RNDr. Pavel Kocán, Ph.D.

školitel