

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Milan Vrána
Název práce: Berryho křivost počítaná ab-initio metodou
Studijní program a obor: Fyzika
Rok odevzdání: 2024

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Ing. Ondřej Stejskal, Ph.D.
Pracoviště: Fyzikální ústav AV ČR
Kontaktní e-mail: ostejskal@seznam.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:

Student v práci komplexně zpracoval problematiku Berryho křivosti a její vliv na vlastnosti elektronů v pevných látkách. Teoretickou část podpořil výpočty na bcc Fe. V úvodních kapitolách je velmi podrobně zavedena Berryho fáze v pevných látkách a to jak z pohledu kvantově-mechanického, tak z pohledu topologie. Autor dále odvozuje, jaký vliv má Berryho křivost na vlastnosti elektronů na příkladu anomální vodivosti a orbitální magnetizace. Jedná se o velmi aktuální oblast bádání a z textu je patrné, že se student v problematice velmi dobře orientuje. Student s pomocí ab-initio kódu následně provádí výpočty na konkrétním materiálu bcc Fe, čímž celá práce nabývá vědecké hodnoty.

Výhrady bych měl k numerickým výpočtům v kapitole 4. Výsledky jsou zde prezentovány bez jakékoli diskuze. Obrázky 4.3, 4.4, 4.5 a 4.8 by si zasloužily nějaký podrobnější popis, z kterého by bylo patrné, na co se díváme a co je v obrázcích zajímavého. V práci chybí porovnání spočítaných hodnot anomální vodivosti a orbitální magnetizace s literaturou.

Drobné nedostatky:

- použití kódu WIEN2k by mělo být řádně ocitováno v literatuře, podobně také např. hodnota mřížkového parametru železa
- v rovnicích 3.4.6 a 3.4.7 patrně chybí závorky uvnitř integrálu
- z textu jsem nepochopil, co přesně je vykresleno na obr. 4.8. Jedná se o magnetický moment značený m_n v rovnici 3.4.7 nebo je k němu přičtena i korekce Berryho křivosti?

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1. V textu se píše, že pro co nejpřesnější výpočet hodnoty Berryho křivosti potřebujeme znát hodně pásů. Zatímco pod Fermiho hladinou jsou k dispozici pásy až do -100 eV, nad Fermiho hladinou pouze do 15 eV, přičemž do výpočtu hodnoty Berryho křivosti daného pásu (rovnice 2.2.2) zasahují jak pásy pod tak pásy nad daným pásem. Je tedy oněch 15 eV dostatečných?

2. Proč jde orbitální magnetizace k nule pro energie -6 eV a 6 eV? Totéž se děje pro spektrum anomální vodivosti.

3. Rovnice pro výpočet Berryho křivosti (2.2.2) a orbitálního momentu (3.4.4) jsou si velmi podobné. Z grafu na obrázku 4.7 se zdá, že po integraci mají tendenci mít přibližně stejnou hodnotu ale opačné znaménko. Jedná se pouze o náhodu? Lze na základě hodnot m_z a Ω_z v jednotlivých k bodech identifikovat, které k body přispívají do orbitální magnetizace nejvíce?

4. Je nějaká spojitost mezi spektrem anomální vodivosti a orbitální magnetizace? (Obr. 4.6 a 4.7)

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako ~~diplomovou~~/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze, 3.6.2024