

Posudek habilitační práce pana Františka Karlického s názvem
Modeling of electronic and optical properties of two-dimensional materials

Habilitační práce představuje vědecké výsledky autora na poli numerických výpočtů elektronových a optických vlastností 2D materiálů. Skládá se z krátké předmluvy (kapitola 1), úvodu do problematiky a přehledu výpočetních metod (kapitola 2), přehledu nejvýznamnějších výsledků (kapitola 3) a krátkého výhledu (kapitola 4), připojeno je dvanáct publikací z období 2018 až 2024, na kterých je práce založena, všechny uveřejněny v solidních chemických nebo fyzikálních časopisech.

Spektrum výpočetních metod je úctyhodně široké - zahrnuje jednočásticové postupy založené na metodě funkcionálu hustoty, kvazičásticovou metodu GW (v několika modifikacích), Bethe-Salpeterovu (BS) teorii pro popis vlivu elektron-děrové interakce na opticky aktivní excitace, zejména pro popis excitonových jevů, metodu FNDMC (Fixed-Node Diffusion Monte Carlo), časově závislou metodu funkcionálu hustoty pro přibližný popis excitovaných stavů a metodu těsné vazby vhodnou pro popis periodických systémů s mnoha atomy v primitivní buňce.

Spektrum studovaných materiálů je rovněž široké - zahrnuje materiály příbuzné grafénu, binární 2D polovodiče s hexagonální strukturou a MXény.

Prezentované výpočty jsou zaměřené na stanovení pásové struktury, zejména energiové mezery mezi valenčním a vodivostním pásem a na stanovení vlivu elektron-děrové interakce na optická spektra, zejména na vazebnou energii excitonu.

V části prací je cílem verifikace výpočetních metod na základě srovnání výsledků s experimentem nebo na základě porovnání výsledků několika nezávislých pokročilých metod. Pěkný příklad srovnání s experimentem je na obr. 7, který ukazuje naměřená a vypočtená absorpční spektra MoS_2 . Pěkné příklady srovnání výsledků nezávislých metod, v obou případech DFT v kombinaci s GW a BS na jedné straně a FNDMC na straně druhé, jsou uvedené na str. 24 (fluorografen) a na str. 28 (MXén $\text{Sc}_2\text{C}(\text{OH})_2$).

V jiné části prací jde o nalezení, s pomocí výsledků sofistikovaných postupů zmíněných výše, přibližných postupů použitelných pro určení optických spekter komplexnějších systémů s velkými počty atomů v primitivní buňce. Zdařilé naladění funkcionálů pro časově závislou DFT je předvedeno např. na str. 33 a 34.

Z práce je zřejmé, že František Karlický zmíněné výpočetní postupy výborně ovládá, je schopný zvolit postup přiměřený problému a ověřit adekvátnost nastavení parametrů výpočtu. Připojené publikace obsahují řadu zajímavých původních výsledků.

K práci mám několik obecnějších připomínek a řadu dalších připomínek a dotazů.

Obecnější připomínky:

1. V práci postrádám vymezení autorských podílů. Ze struktur autorských týmů lze usuzovat, že František Karlický patří mezi hlavní autory, přesto považuji specifikaci podílů za důležitou.
2. Postrádám také souborný popis použitého software.
3. Domnívám se, že by práci byl prospěl aktuální přehled výsledků experimentálního studia optické odezvy 2D systémů, případně stručná diskuse o budoucích možnostech.
4. Většina výpočtů se týká "free standing" 2D materiálů. Textu by byl prospěl (alespoň kvalitativní) rozbor vlivu substrátu na elektronové a optické vlastnosti, např. na vazebnou energii excitonu.

Další připomínky a dotazy:

- 1) V práci je poměrně málo pozornosti věnováno srovnání výsledků s experimentálními daty. Pro jaké ze studovaných materiálů jsou experimentální data optické odezvy k dispozici?
- 2) Terminologická poznámka k rovnici (1). Na pojmy ionizační energie a elektronová afinita jsem zvyklý ze světa atomů, nejsem si jistý, zda je zde jejich použití adekvátní. Pro atomy je afinita, alespoň v některých zdrojích, definována jako nezáporná veličina, rovná nule pro případ, že systém s přidaným elektronem je nestabilní. Nenastávají v některých případech takové situace i zde?
- 3) Nesleduji vývoj DFT funkcionalů, do jaké míry jsou moderní funkcionaly schopné vystihnout vliv disperzních interakcí?
- 4) Na straně 12 jsou diskutovány rozdíly mezi vazebnou energií excitonu v 2D a v 3D. Ocenil bych rozbor rozdílů: jaký je podíl dielektrických efektů, dimenzionality atd. Jaký je vliv dielektrických efektů na band gap? Na modelové úrovni pro tenké free standing GaAs vrstvy podobný problém řešen v práci Moško, Munzar, Vagner, Physical Review B 55, 15146 (1997).
- 5) Při většině výpočtů používány kódy pro 3D krystaly, z toho důvodu nasazovány vakuové vrstvy oddělující 2D roviny. Jsou k dispozici spolehlivé speciální 2D kódy?
- 6) Prosím o objasnění normovacího faktoru v rovnici (7), jde o „váhu kvazičástice“?
- 7) Jaký postup je používán ve výpočtech imaginární části dielektrické funkce?
- 8) K TD DFT. Není mi jasné, jak může zakomponování přesné výměny způsobit, že výpočet postihne excitonové efekty. Prosím o objasnění. Jak je odvozena rovnice (11)? V odkazu (3) odvození není, je pravděpodobně v supportu, který ale není součástí habilitační práce.
- 9) Na straně 23 je zmíněn obří excitonový jev v materiálu s anglickým názvem fluorographane. Čím je daný rozdíl mezi tímto materiálem a jinými materiály s podobným složením?
- 10) Na straně 29 je diskutován excitonový izolant $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{O}_2$. Lze na základě získaných výsledků předpokládat, že v něm dojde k excitonové kondenzaci?
- 11) Obrázek 16 ukazuje prostorovou strukturu excitonu v $\text{Hf}_3\text{C}_2\text{O}_2$. Jak lze interpretovat?
- 12) K obrázku 20: jaké spektrální struktury lze považovat za struktury excitonové povahy a proč?
- 13) V kapitole 4 autor komentuje perspektivy výzkumu 2D materiálů. Co považuje za nejzajímavější výzvy v oblasti?

Habilitační práce podle mého názoru splňuje nároky kladené na uchazeče o habilitaci v oboru Aplikovaná fyzika, doporučuji, aby byla jako taková uznána.

V Brně dne 27. května 2025

Prof. Mgr. Dominik Munzar, Dr.

Ústav fyziky kondenzovaných látek PŘF MU