

Oponentský posudek habilitační práce Mgr. Františka Karlického, Ph.D.

Modeling of electronic and optical properties of two-dimensional materials

Předložená práce shrnuje výzkum Dr. Karlického v oblasti výpočtů elektronové struktury a optických vlastností 2D materiálů. Práce je založena na dvanácti výzkumných článcích, které byly publikovány od roku 2018. U deseti z nich je Dr. Karlický posledním autorem, tedy vedoucím výzkumného týmu. Práce byly publikovány v respektovaných časopisech oboru, včetně "Journal of Chemical Theory and Computation" nebo v "Journal of Chemical Physics", což jsou nejlépe hodnocené časopisy ve výpočetní chemické fyzice. Práce ukazuje hluboké pochopení teoretických metod, dokládá jejich efektivní využití, a celkově tedy ilustruje vědeckou vyzrálост Dr. Karlického.

Práce je psána anglicky a členěna standardním způsobem. Druhá kapitola obsahuje věcný popis teoretických metod používaných pro výpočet elektronových vlastností materiálů. Navíc autor diskutuje některé problémy, které vyvstávají při výpočtech vlastností 2D materiálů a jsou marginální nebo nepřítomné pro výpočty 3D materiálů. Ve třetí kapitole jsou v širším kontextu komentovány výsledky publikované v přiložených pracích. Obsah prací a jejich provedení je na vysoké úrovni a nemám k nim negativní připomínku. Většinou se jedná o důkladné studie nových 2D materiálů, např. modifikací grafenu nebo tzv. MXenů.

Autor v práci popisuje dva hlavní směry svého výzkumu: snahu obdržet vysoce spolehlivé výsledky pro vlastnosti 2D materiálů a snahu najít metody, které jsou méně výpočetně náročné, ale dávají výsledky s dostatečnou přesností. Otázka spolehlivosti je v oboru velmi důležitá, z mého pohledu až zásadní, a s autorovým přístupem plně souhlasím. Výpočetní náročnost použitých metod silně závisí na kvalitě nastavení numerických parametrů, může se jednat například o velikost simulační buňky nebo počet básových funkcí. S nižším nastavením takovýchto parametrů lze získat výsledky relativně snadno a rychle, nicméně takové výsledky mají vysokou nepřesnost. Získat spolehlivá data se zkonvergovanými numerickými parametry je ale výpočetně mnohem náročnější a vyžaduje expertní znalosti. V práci autor dokládá, že si je těchto problémů plně vědom, a ukazuje, jak výsledky na parametrech závisejí a jak je možné získat zkonvergovaná, a tedy spolehlivá, data. Studium více přibližných metod, například přístupu těsné vazby nebo časově závislé teorie funkcionalu hustoty, pak ilustruje potřebu mít metody použitelné pro rychlou identifikaci slibných materiálů. Pro 2D materiály je toto užitečné, neboť jich je velké množství, navíc je možné utvořit velmi velké množství jejich kombinací, tzv. van der Waalsovských heterostruktur. Jak pro přesné výpočty, tak i pro přibližné metody obdržel autor zajímavé originální výsledky.

Otázky pro diskusi

Bylo by možné ilustrovat numerickou náročnost některých výpočtů na numerických parametrech? Například pro metodu G_0W_0 .

Porovnání výsledků experimentu a teorie je obtížné kvůli např. teplotě, kvantovým efektům jader a přibližnosti teorie. Je nějaký odhad, jak jsou tyto nebo jiné efekty důležité pro studované veličiny a bylo by možné je nějak do výpočtů zahrnout?

Závěrečné stanovisko

Závěrem konstatuji, že práce zcela splňuje požadavky kladené na habilitační práce v oboru Aplikovaná fyzika. Práce jasně ukazuje výzkumný směr Dr. Karlického a jeho podstatné přínosy k výpočetní fyzice materiálů. Předloženou habilitační práci doporučuji k dalšímu postupu v habilitačním řízení.

V Praze, dne 16. května 2025

Jiří Klimeš, KChFO MFF UK