

Oponentský posudek na doktorskou dizertační práci

Davidu Wagenknechta

Theory of spin-dependent transport in magnetic solids

Práce se týká rozvoje a aplikace formalismu ab-initio výpočtů transportních vlastností pevných látek pro konečné teploty. To je dostatečně široké a přitom aktuální téma, takže na něm doktorand má možnost uplatnit a prokázat své schopnosti. Práce obsahuje úvodní část – teoretickou – kde autor představí jakýsi úvod do ab-initio výpočtů a shrne základní formalismus, dále část kterou bych nazval vývojovou či ověřovací, kde jsou poměrně podrobně rozebrány některé praktické aspekty výpočtů a kde si doktorand tak trochu hraje s různými parametry, trendy a přístupy a konečně část výsledkovou, kde jsou představeny hlavní výsledky dvou výzkumných projektů – rozbor transportních vlastností poměrně složitých systémů, NiMnSb a CuMnAs.

Práce obsahuje dostatečné množství materiálu a z prezentovaných výsledků je zřejmé, že se za nimi skrývá rozsáhlá a – řekl bych – zodpovědná a pečlivá práce. Vlastní původní výsledky shrnuté v 5. kapitole jsou cenné. Práce je dobře logicky členěná, po jazykové stránce srozumitelně napsaná.

Hlavní klad práce vidím v dílčích výsledcích shrnutých v části 4. Je vidět, že doktorand prověřil vícero různých postupů, nastavení, ověřoval citlivost výsledků ke změnám podmínek a tak dále. Kladně hodnotím i sice nepříliš rozsáhlou leč solidně podanou část 3, kde jsou jasně popsány právě ta různá technická nastavení, o nichž se v publikacích leckdy stydlivě mlčí a která přitom mohou zrovna u transportu mít velký vliv. Pro reprodukovatelnost výpočtů je to opravdu důležité.

Co se týká celkového stylu, práce působí někdy trochu nevyváženě. Srozumitelně a přehledně je například podaná část o DFT. (Pouze bych podotkl, že metody LDA+U a GGA patří do jiných tříd. Představovat je v jednom balíku v části 1.2.3 není moc šťastné.) Technický popis TB-LMTO metody mi ovšem přišel příliš „technický“: postrádám zmínku o fyzikálních základech metody a o jejím základě stojících aproximacích (část 1.2.5.). Stejný dojem mám z části 1.2.6 (CPA): prezentované rovnice by bylo vhodné zasadit do nějakého intuitivního rámce. Popis metody „alloy analogy model“ v části 2 mně přišel výrazně lepší.

Některé popisy působí po formální stránce nedotaženě. Uvedu pár příkladů:

Na str. 32 se píše „following quantities are invariant within the TB-LMTO method“. Invariantní v jakém smyslu? Vůči čemu?

V legendě obr. 2.1 se vyskytuje veličina n_{avg} . Co označuje? Patrně počet náhodných konfigurací, označovaný v textu jako K .

Na str. 71 se v textu o AHE odkazuje na obr. 4.9, ten ale ukazuje jen longitudinální komponentu a nikoliv AHE. Nebo se pletu?

Na str. 105 se zhruba ve středu zřejmě prohazuje význam symbolů φ a θ .

Jaký je význam křivek (čar) v obr. 5.3 Označují výpočet pro případ započtení vibrací nebo spinových fluktuací nebo obojího?

V úvodním odstavci části 5.1.2 (str. 108) se uvádí, že „weak influence of magnons“ je ve shodě s jinými pracemi. Ale já v předložené dizertaci žádné výsledky ohledně vlivu magnonů (tedy spinových fluktuací?) nenašel. Proč se tedy i nich píše? Možná jsem něco špatně pochopil... Co je to FRT model, s nímž jsou výsledky srovnávány na str. 112? Je v seznamu zkratk, ale... Na str. 115 se odkazuje na „multiband character of transport“ patrný z obr. 5.5. Ale zmíněný charakter je patrný mnohem lépe z obr. 5.6! (Na druhou stranu: po věčné stránce se mi tento rozbor líbí.) Týkají se prezentované výsledky pro CuMnAs případů s „empty spheres“ nebo bez nich? Není mi to z popisu ve druhém odstavci na str. 120 jasné.

Dále bych měl pár odborných dotazů k vlastním výsledkům práce:

Zaujalo mě, že účinné paralelizace se dalo dosáhnout s použitím OpenMP (bez MPI). K čemu byly instrukce OpenMP použity? K maticovým operacím? Nebo i k něčemu jinému?

V části 2.5 doktorand uvádí některá omezení metody „alloy analogy model“. Která považuje – na základě své zkušenosti – za nejzávažnější?

Překvapuje mě, že spinové fluktuace zřejmě nemají žádný významný vliv na AHE u niklu pro teploty pod 400 K (str. 71 – autor na obr. 4.4 srovnává experiment s výpočtem, beroucím v úvahu pouze vliv vibrací). Nikl je přece feromagnetický, pod T_C bych čekal, že spinové fluktuace budou srovnatelně významné s vibracemi. Je pro to nějaké intuitivní vysvětlení?

Zaujalo mě srovnání s experimentem pro *nemagnetický* Co při teplotě 300 K (obr. 4.5 b). Přitom by mělo jít – dle popisu na str. 72 – o hcp kobalt. Jak té nemagnetičnosti kobaltu dosáhli?

Pokud jsem to správně pochopil, rozdíly mezi LDA a LDA+U se u CuMnAs neprojeví ve vlastní elektronové struktuře (hustotě stavů), ale jsou významné co se týká transportu. Konkrétně tedy použití LDA+U podstatně *zhoršuje* souhlas mezi teorií a experimentem pro rezistivitu (str. 127). Lze tedy tento výsledek brát jako jednoznačný a „robustní“ důkaz, že LDA+U nelze použít na CuMnAs? Změní se toto nějak, když se použije jiná „double counting“ oprava?

Závěrem bych konstatoval, že práce obsahuje významné výsledky, dle všeho za ní stojí solidní výzkumná aktivita a autor prokázal schopnost vědecky uvažovat a pracovat. Prezentace práce má nedostatky, nejsou však takového rázu, že by práci v jejím celku činily obtížně srozumitelnou nebo ji přímo znehodnocovaly. Doporučuji práci k obhajobě.