

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

posudek vedoucího
 bakalářské práce

posudek oponenta
 diplomové práce

Autor: Daniel Herman

Název práce: Influence of intra-molecular vibrational modes on excitation energy transfer in molecular aggregates

Studijní program a obor: Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: doc. Mgr. Tomáš Mančal, PhD.

Pracoviště: Fyzikální ústav UK

Kontaktní e-mail: mancal@karlov.mff.cuni.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:

Předložená práce je shrnutím úsilí řešitele o vylepšení standardního poruchového popisu otevřených kvantový systémů řídicími rovnicemi. Základní myšlenka je relativně jednoduchá: systém složený z elektronových stavů ve vazbě s konečným (malým) počtem harmonických módů (tedy konečnou lázní) je vyřešen přesně, a poté je proveden pokus o poruchovou teorii v této vazbě, s využitím znalosti přesného řešení. Že by takové vylepšení mohlo být možné, napovídá jednoduchá metoda odvození standardních poruchových rovnic (v této práci vedoucí k rovnici 2.9), ze které je zřejmé, že exaktní rovnice se liší od rovnice druhého řádu pouze kvalitou popisu stavu lázně. K poruchovému řešení se tedy dostaneme jaksi z druhé strany, aproximací stavu lázně v exaktní rovnici a nikoliv (nutně) postupným poruchovým rozvojem od neporušeného řešení. Máme-li k dispozici formálně exaktní rozklad celkové matice hustoty (rovnice 1.63-1.65 v práci), stojí vylepšenému řešení problému dynamiky otevřeného systému v cestě pouze správné uhadnutí, či odvození, lepšího ansatzu pro časový vývoj stavu lázně.

Z tohoto východiska nastíněného školitelem se řešitel odráží a implementuje úspěšně model konečného systému a jeho numerické řešení. Na základě tohoto řešení konstruuje, také úspěšně, přesnou rovnici pro redukovanou matici hustoty elektronové části systému. Ta má tvar integro-diferenciální rovnice, jejíž řešení řešitel implementuje a porovnává s exaktním řešením původních neredukovaných rovnic. Tím bezděky ověřuje, že exaktní schéma popsané výše funguje. Bohužel toto schéma nelze uplatnit tam, kde je ho třeba nevíce, tedy v případě, že lázeň je nekonečná.

Řešitel proto potom přistupuje k pokusu o přibližný popis lázně, který by hypoteticky bylo lze upravit pro případ nekonečné lázně. Za pozornost stojí zejména pokus o iterativní vylepšení popisu stavu lázně na základě evoluce redukované matice hustoty z předchozích iterací. Tato metoda startuje s řešením ze standardní poruchové teorie. Ve všech případech odvodil a implementoval řešitel velmi komplexní teorii, jejíž výsledky srovnal s přesnými i standardními poruchovými řešeními. Množství výsledků je velké a tyto jsou ve své numerické a formální podstatě (zřejmě) správně. Bohužel problém je takového rázu, že uvedené pokusy nevedou na žádné významné vylepšení pohybových rovnic pro konečné systémy, a nezdá se, že by ukazovaly cestu k nějaké obecnější metodě pro odvození lepších rovnic pro nekonečnou lázeň. To v žádném případě není “vina” řešitele. Výsledky na druhou stranu nevylučují, že by k vylepšení pohybových rovnic pro nekonečné systémy řešitelovou metodou došlo. V krátkých časech totiž většinou vylepšené řešitelovy rovnice opravdu sledují exaktní řešení o trochu déle než standardní rovnice. Zvážíme-li, že při konečné síle vazby je každý stupeň volnosti lázně svázaný s otevřeným systémem nekonečné malou vazbou, je skutečně možné, že správné “přeložení” řešitelových výsledků pro nekonečnou lázeň by k jistému vylepšení vedlo. To se bohužel již do předkládané práce nevešlo, neboť jde o velmi netriviální problém.

Lze tedy shrnout, že řešitel vyzkoušel hned několik cest k hledanému řešení, při nichž prokázal značnou obratnost jak v odvozování, tak implementaci numerických metod. Řešitel pracoval po celou dobu řešení velmi intenzivně a přicházel s novými nápady. O jeho schopnostech svědčí i zapojení do vývoje softwarového balíku Quantarhei, který vyvíjí školitel. Řešitel pomohl modifikací kódu značně urychlit některé operace prováděné balíkem. V práci byl pak balík využit pouze pro srovnání výsledků, řešitel si vyvíjel pro výpočty spojené s předkládanou prací vlastní software.

Úroveň textu je místy poněkud slabší – může to být spojeno s nutností psát anglicky, což se druhotně může projevit i na slabším obsahu. Jde tady jak o chyby terminologii, např. “time preturbation theory” místo “time-dependent perturbation theory” nebo o nepřesné formulace např. že metoda

HEOM "... can describe Lorenzian lineshape" (má tu jít o Lorentzův tvar spektrální hustoty, nikoli čáry), tak i o útržkovité popisy okolností teorie, které by si zasloužily buďto rozepsat více, nebo vynechat. Zde myslím např. jedno větný odstavec o kvantových jevech v biologii. Úvodní kapitola by se dala napsat jako ucelený narativ motivující celou práci. Toho nebylo dosaženo, naopak místy kapitola naopak kapitola naznačuje, že autor nemá tak velký přehled o kontextu práce, jaký by byl pro takový narativ potřeba.

Úroveň angličtiny je ale celkově slušná – s úkolem sepsat práci v cizím jazyce se autor vyrovnal se ctí. Zároveň prokázal schopnost proniknout do numerických a matematických detailů na velmi vysoké úrovni – někdy možná až právě na úkor schopnosti postřehnout vnější kontext. Větší rozsah práce vyplývá také z toho, že se řešitel zaměřil mnohem více na vlastní zkoumání (které vedlo na množství technických mezivýsledků), než na studium existujících teorií. Kdyby se ovšem řešený problém ukázal jako řešitelný, pravděpodobně by se nad tím nikdo nepozastavil. Takto si řešitel vyzkoušel i riziko takového poněkud jednostranného zaměření. Vzhledem k obtížnosti problému, objemu práce a jejímu potenciálu pro budoucí výzkum (který není momentálně ani školitel schopen bezpečně odhadnout) se však domnívám, že si práce zaslouží vysoké ohodnocení.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze, 1. 2. 2023