

Posudek na dizertační práci Ing. Milana Burdy na téma “Modelování nelokální plazmonické interakce”.

Dizertační práce Ing. Milana Burdy, je zaměřená vývoj teoretických modelů umožňujících popis nelokálních plazmonické interakce s lineárně polarizovanou elektromagnetickou (EM) vlnou, jejich klasifikaci a identifikovat efektivní metody výpočtu pro složitější plazmonické struktury. Deklarované cíle jsou identifikovány v rámci sedmi dílčích úkolů, které odpovídají zvolenému členění práce do šesti kapitol. Dizertační práce v celkovém rozsahu 111 stran včetně referencí. Text publikace a obrázky splňují standardní kritéria na požadovanou úroveň grafické úpravy. Práce na dizertaci probíhala v rámci výzkumných aktivit v týmu Prof. Ivana Richtera na KFE FJFI ČVUT, který má dlouhodobou zkušenost v oblasti vývoje numerických metod pro výpočet a numerické modelování fyzikálních vlastností fotonických struktur a v této oblasti dosahuje výsledků srovnatelných v mezinárodním měřítku. Výsledky získané během doktorandského studia Ing. Burdy byly zejména v samotném závěru zhodnoceny v zaslaných [1]-[3] příp. přijatých publikacích [4] a průběžně byly prezentovány na řadě mezinárodních konferencí, workshopu a lokálních konferencí [5]-[[21] a v neposlední řadě přispěly k úspěšnému řešení několika grantových projektů GAČR a MŠMT, které vedle studentských a standardních využívaly také financování evropských strukturálních a investičních fondů a projektu excellence.

Úvodní kapitoly se poměrně detailně zabývají kvantovým popisem elektronového plynu a jeho nelokálními vlastnostmi, zejména z hlediska klasifikace různých modelů nelokální optické disperze. Ve srovnání s výše zmíněným teoretickým úvodem se jeví kapitola 3 jako samostatný celek jako poněkud poddimenzovaná evidentně by jí prospělo sloučení s kapitolou 4. Posledně jmenovaná kapitola působí poměrně nekompaktním dojmem, protože v úvodu se věnuje popisu Mie-Lorenzova modelu a na Obr. 4.2 je demonstrován modrý posuv extinkce, aniž jsou uvedeny příslušné modifikované vzorce pro jeho výpočet. Rovnice standardního hydrodynamického modelu pro sféricky symetrickou nanočástici jsou uvedeny až v následující kapitole, nicméně bylo by zřejmě se vhodnější věnovat více pozornosti popisu relevantních veličin z nichž lze extinkční efektivní záchytný průřez spočítat a role longitudinální dopadající EM vlny na vlastnosti odražené, prošlé a rozptýlené vlny z hlediska jejich polarizačních vlastností.

Jako jeden z výrazných nedostatků předkládané dizertační práce považují fakt, že autor neodkazuje na seznam vlastních publikací, jejichž číslování je navíc shodné s tím, které použil u seznamů použitých zdrojů. Mezi další formální nedostatek lze považovat nedostatečné rozlišení výsledků na Obr. 4.2 Poněkud spekulativně působí diskuse výsledků uvedených na Obr. 4.9 pro nanočástice ve vodním roztoku, které podle vyjádření autora je třeba brát s rezervou s ohledem na možný vliv kvantových efektů spojených se spill-out a Landauovým útlumem.

Obecně by předkládané práci prospělo, kdyby autor věnoval více času korekturám a tím předešel zbytečným formálním nedostatkům je např. na str. 52 nesprávné označení dopadající a odražené vlny zobrazené na Obr.5.1, amplitudy transversální komponenty elektrického pole na str. 54 a nejednotné příp. chybějící popisy os na panelech na Obr. 5.3., Ve stejné kapitole autor uvádí vztahy pro elementy přenosové matice (5.24) – (5.31) aniž je zřejmé, jestli se jedná o původní výsledek, vzhledem že jsou na Obr. 5.3 srovnány reflektance zveřejněné v [89] a výsledky získanými pomocí výše zmíněných vztahů.

Vztahy odvozené pro nelokální kovovou dvojvrstvu v kapitole 5.2 jsou zřejmě také původní (a stejně tak bez odkazu na publikaci) a získaný poznatek týkající se ekvivalence vlastností dvojvrstvy a jednoduché kovové vrstvy je jistě zajímavý a je důsledkem lonitudinální polarizace vlny šířící se v uvažované structure, nicméně tento jev již byl popsán dříve publikovaném článku [T. Lopez-Rios, F. Abeles, G. Vuye, J. Phys. Lett., 40 (1979), p. L-343]. Vzhledem k tomu, že výsledky získané pomocí

nelokálních výrazů vykazují nefyzikální vlastnosti – viz Obr. 5.10 navrhl autor modifikaci útlumové konstanty pomocí zpřesněného vztahu (5.59), který by měl tento nedostatek odstranit. Výsledky pro kovovou dvojrstvu tento deficit tj. zápornou hodnotu $R_{HD} - 1$ na Obr. 5.11 exidentně nevykazují, nicméně ve výsledky pro nelokální symetrické a asymetrické dvojrstvy v kapitolách 5.5.1 a 5.5.2 jsou prezentovány pouze pro $R_{HD} = R$.

V kapitole 6.1 popisující úlohu na vlastní čísla pro transversální pole je ukázáno, že odchylka v důsledku nelokality od klasické teorie je v rámci standartního HD modelu způsobena výhradně v důsledku longitudálního pole. Vzhledem k absenci odkazů není zřejmé jestli se jedná o původní odvození, ve kterém chybí definice zavedených veličin jako např. matic W a C v rovnici (6.23).

V závěrečné kapitole 6.2 o longitudinálním poli v periodické difrakční mřížce není dostatečně popsán postup, jakým autor odvodil na základě vztahu (6.87) odvodil soustavu nelineárních rovnic (6.88), v nichž vystupují maticové neidentifikované maticové elementy $v_{q,f}^+$, $w_{q,f}^+$, $w_{q,f}^+$, a $w_{q,f}^+$.

V návaznosti na výše uvedené připomínky mám následující dotazy:

1. Na základě poznatků týkajících se závislosti disipační konstanty γ na poloměru nanočástice ve vztahu pro dielektrickou permitivitu - viz. např. [Otter, Z. Phys. 161, 539(19610), U. Kreibig and C. von Fragstein C 1969 Z. Phys. 224 307] hraje s klesajícím poloměrem (< 10 nm) kovové nanočástice významnou roli excitace povrchového plazmonu. Jak je tento efekt zohledněn ve výpočtu kovové nanočástice v kapitole 4?
2. Je známo, že v konvenčních modelech permittivity kovu existuje inherentní nekonsistence, vyplývající z toho, že reálná komponenta permittivity ϵ_1 závisí na kolektivním parametru, zatímco její imaginární část ϵ_2 také na relaxační frekvenci, která je podle klasického modelu interpretována pomocí jedno-elektronových kolizí, přičemž obě komponenty ϵ_1 a ϵ_2 splňují Kramers-Kronigovu relaci. Jak je tato konsistence splněna v nelokálním hydrodynamickém modelu?
3. Na základě jakých fyzikálních principů dochází k Landauovu tlumení pro kovové nanočástice menší než 1 nm?
4. Jakým způsobem vstupuje do HD modelu Planckova konstanta a proč je tento model klasifikován jako "semi-classical"?

Závěrem lze podle mého názoru konstatovat, že i přes výše zmíněné nedostatky prokázal dizertant schopnost samostatné vědecké práce na mezinárodně srovnatelné úrovni, splňuje příslušné faktické i formální požadavky kladené na dizertační práci v rámci oboru doktorandského studia Fyzikální inženýrství a tudíž ji doporučuji přijmout k obhajobě.

Prague 22. 9. 2023

RNDr. Vladimír Kuzmiak, CSc.
Ústav fotoniky a elektroniky AV ČR, v.v.i.