

Kvantová hydrodynamika popsaná pomocí Lagrangeova formalizmu

vypracované paní Veronikou Rečkovou

Bakalářská práce paní Veroniky Rečkové se zabývá teoretickým popisem stavu elektronů v kovových nanočásticích pomocí metody kvantové hydrodynamiky. Model je založen na popisu elektronové hustoty, nejprve v základním stavu, a poté popisuje pohyb elektronové nábojové hustoty po aplikaci vnějšího střídavého elektrického pole (tj. po osvětlení nanočástice světlem). Tento přístup umožňuje popsat optickou odezvu nanočástic téměř z prvních principů, umožňující popsat a pochopit plasmonické vlastnosti nanočástic.

První část práce zavádí analytický vztah pro Lagrangeovu hustotu danou hustotou elektronů. Tímto přístupem autorka nejprve vyjádří pohyb elektronové hustoty pomocí lokálních diferenciálních rovnic. Poté vyjádří očekávané řešení (tzv. ansatz) elektronové hustoty pro kulovou nanočástici, kde volné parametry jsou posun nábojové hustoty (tzv. dipólový mód) a šíře přechodu elektronové hustoty mezi maximální a nulovou elektronovou hustotou (tzv. dýchací mód). Vyintegrováním Lagrangeovy hustoty autorka získá Lagrangián, a následně pomocí Eulerova–Lagrangeova rovnice jsou určeny rovnice jak pro základní stav (stav s nejnižší energií) a následně pohybové rovnice pro dipólový a dýchací mód, posléze zobecněné pro aplikované vnější elektromagnetické pole. Všechny tyto analytické výpočty jsou náročné, a autorka tyto výpočty zvládla velice dobře.

Druhá část práce pak numericky popisuje elektronovou hustotu kulové nanočástice, ve většině případů nanočástice fcc zlata o poloměru 1nm. Nejprve je určen základní stav, tj. hodnota šíře přechodu pro základní stav. V následujícím kroku jsou vypočteny numerické hodnoty vlastních kmitů elektronové hustoty (eigenstates), kde se počítá časová závislost výchylky dipólového a dýchacího módu, kde kmity jsou numericky vynucené nerovnovážnou počáteční výchylkou. Pomocí Fourierovy transformace jsou pak určeny vlastní frekvence módů. Závislost na počáteční výchylce ukazuje, že dipólový mód je lineární systém (frekvence nezávisí na amplitudě výchylky), zatímco dýchací mód je nelineární. Následuje výpočet vynucených kmitů systému, kde kmity jsou vynuceny vnějším elektrickým polem. Poslední část práce pak určuje rozložení nábojové hustoty během kmitů pro jednotlivé módy.

Podle mého názoru se jedná o pěkně napsanou rozsáhlou bakalářskou práci, kde autorka dobře a samostatně zvládla jak statický tak dynamický popis elektronové hustoty v nanočásticích. Výsledky jsou zajímavé, a věřím, že v této tematice se bude pokračovat. Práci hodnotím jako velice pěknou a navrhuji ji ohodnotit známkou A – výborně.

V Praze 1.9.2022

Mgr. Jaroslav Hamrle, Ph.D.
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT
115 19 Praha 1