

Saleem Ayaz Khan

hodnocení školitele – příloha pro obhajobu disertační práce

Saleem Ayaz Khan se pod mým vedením zabýval kvantově-mechanickými ab-initio výpočty elektronových a magnetických struktur materiálů. Jeho práce byla od počátku koncipována jako komplexní projekt, cílem bylo seznámit se s různými metodami a s různými programy tak, aby bylo možné zkoumat zajímavé systémy z různých hledisek a vhodně kombinovat silné stránky různých přístupů. Jednalo se o poměrně složitý úkol, student jej nicméně zvládl. K práci přistupoval s chutí a iniciativně, ochotně se učil nové postupy, zlepšoval své schopnosti provádět a plánovat numerické výpočty. Sám přicházel s nápady, co by se vše dalo zkusit, co by ještě stálo za to prověřit.

Student se pod mým vedením zabýval několika problémy, což mu umožnilo získat patřičný rozhled. Asi nejhluběji se věnoval studiu vlivu relativistických efektů na magnetické vlastnosti materiálů, konkrétně magnetokrystalické anizotropii vrstevnaté sloučeniny FePt. O výsledcích referoval při přednáškách a posterech na mezinárodních konferencích a workshopech, techniku prezentace zvládl dobře. Další oblastí, studovanou opět z více hledisek, se stal vliv neuspořádanosti na magnetické vlastnosti substitučních slitin. Kooperace mezi různými metodami umožnila získat zajímavé poznatky o vlivu fluktuací Coulombického potenciálu na magnetické momenty; i o těchto výsledcích přednášel na konferenci a předpokládám, že opět upoutají pozornost. Získané poznatky byly shrnuty ve dvou článcích v prestižním časopise (Physical Review).

Důležitou součástí práce studenta byla spolupráce s experimentátory. Spočetl rentgenová absorpční spektra na K-hraně B atomů na povrchu Si(111) a poskytl tak velmi cenné údaje pro interpretaci experimentu, který na synchrotronu v Terstu provedla skupina V. Chába z Fyzikálního ústavu AV ČR. Provedl výpočty magnetického uspořádání Fe atomů na povrchu platiny pro různé geometrické konfigurace, což je zase podnětné pro interpretace experimentů, které Jana Honolka z Fyzikálního ústavu AV ČR provedl v době, kdy pracoval ještě v Max Planck Institut für Festkörperforschung ve Stuttgartu. Obecně lze říci, že student prokázal schopnost spolupracovat s kolegy jak z experimentální, tak z teoretické oblasti (ten druhý případ se týká navázané spolupráce se skupinou Petera Blahy z Technische Universität Wien).

Student prokázal schopnost samostatné vědecké práce. Má potenciál své schopnosti dále rozvíjet. Jeho práce může přispět k získání zajímavých vědeckých výsledků.



RNDr. Ondřej Špr, CSC.

26. dubna 2017