

**Posudek vedoucího diplomové práce**  
**"Vlastnosti a elektronová struktura nitridů přechodových kovů"**

**Autor práce:** Bc. Vít Petrman

**Vedoucí práce:** Doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.

**Pracoviště:** katedra fyziky, Fakulta aplikovaných věd, Západočeská univerzita

Práce se zabývá ab-initio výpočty charakteristik krystalických nitridů 4B a 5B přechodových kovů. (MN kde  $M = \text{Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta}$ ) a především jejich tuhých roztoků ( $M^1M^2N$ , atd.). Z materiálového hlediska jde o komplementární téma k již více prostudovaným tuhým roztokům MAIN, z hlediska metodologie jde o komplementární téma k autorově bakalářské práci, která se zabývá amorfními materiály. V úvodu práce (**kapitola 2**) je vyložena mj. důležitost zmíněných materiálů (včetně obsahu řady referencí), oba hlavní možné případy které jsou důsledkem míchání více prvků (nanokompozit x tuhý roztok), a cenná možnost díky znalosti formovacích energií posoudit který případ (za ideálních kinetických podmínek) nastane.

V metodologické části (**kapitola 4**; odstavec 4.1-4.4) je vysvětlena teorie funkcionálu hustoty stojící v pozadí provedených výpočtů, a jsou popsány jejich jednotlivé "technické" parametry. Tento popis se s mým souhlasem překrývá s autorovou bakalářskou prací, je ovšem podstatně prohlouben. Následuje popis *know-how* které musel autor zvládnout nově, od software PWscf (Plane Wave Self-Consistent Field) přes *k-pointy* až po algoritmus výpočtu elastických modulů. Na závěr této kapitoly (odstavec 4.5; na pomezí metodologické a výsledkové části) je pro vybrané materiály předvedeno nalezení parametrů výpočtů vedoucích ke zkonvergovaným (tj. maximálně přesným) výsledkům.

Ve vlastní výsledkové části (**kapitola 5**) jsou studovány všechny binární a ternární nitridy které lze vytvořit z výše uvedených prvků, a vybrané kvaternární nitridy. Výsledky získané pro binární materiály jsou v souladu s citovanými experimentálními (i teoretickými) výsledky. Výsledky získané pro ternární materiály ukazují především jejich formovací energie (viz např. Obr. 5.3) a elastické moduly. Jedná se o experimentálně většinou neznámé veličiny (diskutované tuhé roztoky jako takové někdy experimentálně pozorovány byly, ovšem často bez informace o jejich [meta]stabilitě). Autor našel řadu zajímavých zobecňujících závislostí formovacích energií a jednotlivých elastických modulů na velikosti kovových atomů, elektronegativitě kovových atomů a elektronových strukturách "podřízených" binárních nitridů. Významná je zejména role Ta jako "stabilizátora" tuhých roztoků. Tato role byla potvrzena nejen pro ternární ale i pro kvaternární materiály, opět včetně zobecňujících vztahů mezi významností této role a velikostí a elektronegativitou zbývajících kovových atomů.

**Shrnutí:** autor v průběhu práce zvládl základní funkce ab-initio programu PWSCF, osvojil si související *know-how* nutné pro výpočty charakteristik krystalických materiálů, provedl výše uvedené výpočty (a řadu dalších které zůstaly za kulisami) a zpracoval jejich výsledky. Je třeba zdůraznit že jde o "opravdu samostatnou" práci (nikoliv o participaci na "tak jako tak" řešeném projektu vedoucího či konzultanta). Autor předvedl nadprůměrné fyzikální porozumění, a v průběhu projektu se postupně zlepšil i v "podpůrných" aktivitách jako je programování. Dosáhl cenných výsledků, které se v úvodní fázi autorova doktorského studia pravděpodobně stanou páteří recenzovaného článku. Zadání práce bylo splněno pokud jde o cíle i délku. Práci doporučuji k obhajobě a navrhuji klasifikaci **v ý b o r n ě**.

V Aachen dne 4.6.2012

Doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.

