

Posudek vedoucího diplomové práce

Název práce: Teoretický popis tuhých roztoků nitridů a boridů přechodových kovů

Autor práce: Bc. Martin Matas

Vedoucí práce: doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.

Pracoviště: Katedra fyziky, Fakulta aplikovaných věd, Západočeská univerzita

Jde o teoretickou práci zabývající se výpočty charakteristik (od energie přes mechanické vlastnosti po elektronovou strukturu a z ní plynoucí magnetizaci) nitridů a v menší míře boridů vybraných přechodových kovů Y, Ho, Hf, Mo, Ta. Výběr není náhodný - jde o prvky přítomné v materiálech (obsahujících dále mj. dusík a bor) experimentálně studovaných na KFY. Zároveň je výběr smysluplný v tom směru že obsahuje po jednom zástupci čtyř sousedních sloupců d-prvků plus zástupce vloženého bloku f-prvků.

Především je třeba zdůraznit že jde o samostatnou práci, o výpočty které by jinak nebyly provedeny (nikoliv o přihlížení / pomoc nějakému tak jako tak probíhajícímu projektu vedoucího práce nebo doktoranda). Zároveň platí že práce je úmyslně založena na zcela jiné metodologii (popisu interakcí mezi atomy) než předchozí bakalářská práce stejného studenta, tj. zisku ostrých výsledků muselo předcházet velké množství studia, programování a přípravných výpočtů (většina kapitoly 4 neobsahuje popis metodologie vyvinuté někým jiným, ale vlastní výsledky získané při její optimalizaci).

Z hlediska metodologie je nejvýznamnějším přínosem zvládnutí teoretického popisu magnetických materiálů obsahujících holmium, popř. f-prvky vůbec, s obtížně konvergující vlnovou funkcí při hledání jejího základního stavu. Jde o zcela nerutinní případ, v literatuře (asi ne náhodou) o několik řádů méně častý než popis materiálů obsahujících d-prvky.

Z hlediska výsledků porovnatelných s již provedenými experimenty a vysvětlujících tyto experimenty jsou asi nejzajímavější formovací energie nitridů všech pěti kovů, ze 100% korelující s jejich optickým vlastnostmi a z 90% i s jejich elektrickou rezistivitou. Věc je limitována systematickostí/prioritami dosud provedených experimentů (není žádná série kde by se měnil jen kovový prvek a ne další podmínky depozice), ale za to diplomant nemůže.

Z hlediska dalších výsledků je zajímavá například možná závislost znaménka formovací energie tuhých roztoků (i když nikoliv, zdá se, hodnot jejich mechanických vlastností) na rozložení atomů jednotlivých prvků v jejich mřížce, nebo netriviální mechanické vlastnosti nitridů (nemonotónní závislost na čísle sloupce kovového prvku) a jejich tuhých roztoků (nelineální závislost na složení).

Práce neprobíhala úplně hladce pokud jde o rychlost jejího postupu v zimním semestru 2017, pracovní nasazení v letním semestru 2018 bylo již vysoké, pracovní nasazení v období 30.5.-31.5.2018 bylo extrémní. Na délce a propracovanosti struktury výsledkové kapitoly je to místy znát. Na každé plánované téma byly však získány výsledky, žádný cíl práce nezůstal nesplněn. Práci proto doporučuji k obhajobě a navrhuji klasifikaci výborně.

V Plzni 15.6.2018

doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.