

Posudek vedoucího – L. Havela

Silvie Mašková – Diplomová práce

Hydridy intermetalických sloučenin uranu

Předkládaná diplomová práce se zabývá strukturou a magnetickými vlastnostmi hydridů, připravených hydrogenací kvaziternárních sloučenin ze systému UCoSn-ThCoSn.

Intersticiální dopování vodíkem je zajímavým nástrojem modifikace intermetalických sloučenin. Expanze krystalové mříže a jisté změny kohezních charakteristik mohou odhalit zajímavé poznatky např. o povaze magnetismu výchozích sloučenin. Na druhé straně nejsou hydridy velmi dobře definované systémy, dochází často k neceločíselnému obsazování intersticiálních mřížových poloh, a poměrně nízké vazebné energie vedou k tomu, že vodík lze poměrně jednoduše opět uvolnit. Toto klade specifické požadavky na studium hydridů a vlastnosti jsou velmi těsně spjaty s průběhem syntézy.

Autorka přistupovala k výzkumu hydridů již s jistými zkušenostmi, které získala při přípravě práce bakalářské. To umožnilo získat ucelenou řadu výsledků na zmíněných hydridech. Záměrem bylo zahrnout do diplomové práce ještě vedlejší úkol, určení základních vlastností kovového uranu české provenience, který by byl jak původní, o čistotě 2N8, tak rafinovaný metodou Solid State Electrotransport Refinement použit v budoucnu pro přípravu sloučenin uranu. Tento úkol byl splněn pouze zčásti. Ukázalo se, že rafinace kovového uranu (která nebyla předmětem diplomové práce) vyžaduje technické řešení, které posunuje tuto etapu za časovou hranici vymezenou pro tuto diplomovou práci. Získaná data magnetické susceptibility, elektrického odporu a specifického tepla tak budou zúročena až srovnáním s materiálem rafinovaným.

Diplomová práce sestává z 5 kapitol, doplněných přehledem použité literatury. Po stručném úvodu vytyčujícím záměry práce následuje část Teorie, která stručně vysvětluje podstatu magnetismu itinerantních elektronů se zřetelem na sloučeniny uranu. Dále uvádí základní představy o struktuře a termodynamice hydridů a o struktuře sloučenin ekvatomárních ternárů UTX, a konkrétně o dasavadních poznatcích o systému UCoSn s ředěním podmříže uranu nemagnetickým thoriem.

Popis experimentálních aparatur (se zvláštním zřetelem na aparaturu hydrogenační) a postupů je obsažen v kapitole třetí. Zvláště podrobně jsou rozebírány stavové rovnice plynů, které jsou používány pro volumetrické stanovování objemu pohlčeného či uvolněného vodíku, kdy je registrován tlak v systému o známém objemu.

Kapitola 4. obsahuje vlastní experimentální výsledky a jejich diskusi, vše je shrnuto ve stručné kapitole 5. Zde je třeba vyzdvihnout, že autorka se samostatně prováděla jak syntézy hydridů, přípravu vzorků pro magnetizační experimenty a jejich vyhodnocení. Zvládla také analýzu

krystalové struktury metodou Fullprof, jež byla aplikována jak na výchozí sloučeniny, tak na výsledné hydridy. Odhalila zde separaci dvou fází se stejnou strukturou a nepříliš rozdílnými mřížovými parametry pro sloučeniny zhruba uprostřed kvaziternárního systému, jež se projeví i u hydridů. Tento fázový problém však nic nemění na hlavním závěru, že absorpce vodíku s klesajícím obsahem uranu klesá, a stejně klesá i inkrement Curievy teploty v důsledku hydrogenace. Koncentrace zániku magnetismu se tak hydrogenací prakticky nezmění. Tento závěr je poněkud kontraintuitivní, neboť Th je více elektro pozitivní než U a má daleko větší atomový poloměr, což by mělo vést k větším intersticiálám, které může vodík obsazovat. Je možné odhadnout, jak se zvětší čtyřstěn U_3Co , který je vodíkem obsazován v čisté sloučenině $UCoSn$, nahradíme-li uran thoriem?

Práce ve vypracována v jazyce anglickém. Jazyková úroveň je velmi dobrá, úroveň zpracování poměrně slušná. Je třeba zdůraznit že i při psaní práce postupovala autorka velmi samostatně a nedala vedoucím mnoho šancí k interferenci. Objevuje se zde několik míst, ke kterým je možné mít výhrady. Např. korekce na feromagnetickou příměs má smysl pouze ve stavu, kde matrice je ve stavu paramagnetickém. Mechanická aplikace na celý teplotní obor vede k podivným závislostem na obr. 32. Elektrický odpor kovového uranu jeví hodnoty o několik řádů vyšší než je obvyklé. Je možné zkontrolovat, zda zde nedošlo k chybě při výpočtu?

Ty to dílčí nedostatky nesnižují podle mého názoru podstatně hodnotu celé práce a zejména objem experimentálních dat, který za ní stojí. Např. pro elektrický odpor je jako hlavní výstup vzat podíl odporu při teplotě pokojové a v nízkoteplotní limitě, který není přepočtem ovlivněn.

Doporučuji proto uznat práci jako práci diplomovou a hodnotit jako výbornou.

V Karlsruhe, 12-5-2008

Doc. Dr. Ladislav Havela, CSc.

