

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- |   |   |
|---|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> posudek vedoucího | <input type="checkbox"/> posudek oponenta |
| <input checked="" type="checkbox"/> bakalářské práce  | <input type="checkbox"/> diplomové práce  |

Autor: Štěpán Venclík

Název práce: Crystal field by the means of single-crystal Time of Flight scattering

Studijní program a obor: Fyzika / Obecná fyzika

Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Petr Čermák PhD.

Pracoviště: MFF UK, Katedra fyziky kondenzovaných látek

Kontaktní e-mail: petr.cermak@matfyz.cuni.cz

## Odborná úroveň práce:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Věcné chyby:

- téměř žádné  vzhledem k rozsahu přiměřený počet  méně podstatné četné  závažné

## Výsledky:

- originální  původní i převzaté  netriviální kompilace  citované z literatury  opsané

## Rozsah práce:

- veliký  standardní  dostatečný  nedostatečný

## Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Tiskové chyby:

- téměř žádné  vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet  četné

## Celková úroveň práce:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## **Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího:**

Předkládaná bakalářská práce, kterou napsal Štěpán Venclík, se zabývá tématem analýzy krystalového elektrického pole. Tradičně je krystalové pole studováno pomocí nepružného neutronového rozptylu na práškovém vzorku. Tato práce představuje inovativní přístup ke studiu krystalového pole pomocí rozptylu na monokrystalu. Autor demonstroval proveditelnost tohoto postupu pro stanovení parametrů krystalového elektrického pole na velmi známé intermetalické sloučenině PrNi<sub>5</sub>. Krystal byl připraven pomocí technik růstu monokrystalu a charakterizován pomocí rentgenové difrakce, EDX a Laueho difrakce. Experimenty s neutronovým rozptylem time-of-flight byly provedeny pomocí zařízení HYSPEC na ORNL a výsledná data byla využita pro Monte Carlo výpočet s cílem stanovit parametry krystalového pole. Práce má standární strukturu, obsahující krátký teoretický úvod a popis experimentálních metod, předchozí výsledky a analýzu výsledků vlastních. Ocenil bych, kdyby byl kladen větší důraz na popis a užitečnost samotného vyhodnocovacího algoritmu, jelikož je to hlavní přínos předložené práce.

Volba intermetalické sloučeniny PrNi<sub>5</sub> jako objektu studie je chvályhodná, neboť demonstrovala praktickou aplikaci navrhované metody. Jedná se o velmi známou sloučeninu se stovkami publikací popisující jejich chování, přesto však její krystalové pole není kompletně vysvětleno. Popsaná metoda vyhodnocení (tedy využití Monte Carlo výpočtu k určení krystalovopolních parametrů na základě rozptylových dat) se odchyluje od konvenční techniky analýzy práškových vzorků, čímž otevírá možnosti pro přesnější a komplexnější analýzu. Autorova pečlivost při provádění experimentů, polohování vzorků a analýze dat dodává celé práci na věrohodnosti.

Práce je dobře strukturovaná, s jasným oddělením mezi teoretickou částí, metodami, předchozími výsledky, vlastními výsledky a diskusí se závěrem. Chválím zveřejnění syrových (raw) naměřených dat na serveru Figshare, čímž autor postupuje v souladu se zásadami F.A.I.R.

Při řešení práce byl použit správný metodický postup a bylo věnováno značné úsilí vyhodnocení naměřených dat. Autor navrhnul inovativní postup hledání parametrů krystalového pole pomocí techniky Monte Carlo, použité skripty zdokumentoval a zveřejnil pod absolutně otevřenou licenci public domain. Jsou tak využitelné do budoucna pro celou vědeckou komunitu. **Práce splňuje požadavky kladené na Bakalářskou práci na Karlově Univerzitě. Doporučuji ji k obhajobě a navrhuji hodnotit stupněm výborně.**

**Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuse:**

- 1) Je použitý postup aplikovatelný pro výpočet krystalového pole všech vzácnozeminných prvků? Lze se zvyšujícím se počtem hladin/parametrů očekávat nějaké další komplikace?
- 2) Simulace metodou Monte Carlo mohou být výpočetně náročné, jak dlouho trval samotný výpočet a na jakém hardware?

**Práci**

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

**Navrhuji hodnocení stupněm:**

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

Praha, 22. srpna 2023

