

**Oponentský posudek doktorské disertační práce
pana Mgr. Martina Ondráčka**

**Morphology of crystal surfaces – theoretical interpretation of the
STM**

Skenovací tunelová mikroskopie (STM) patří mezi nejdůležitější experimentální metody ke studiu povrchů pevných látek a během posledního desetiletí došlo v jejím vývoji k podstatnému pokroku. Na druhé straně ovšem interpretace získaných výsledků není vždy přímočará a je zde nezbytná důkladná teoretická analýza, která určí, jak charakteristické rysy získaných dat souvisí se studovanou elektronovou strukturou a umožní provést potřebné kvantitativní závěry.

Předkládaná práce na některých vhodně vybraných případech ukazuje, jak teoretický rozbor založený na výpočtech elektronové struktury z prvních principů a numerické simulace přináší hlubší porozumění experimentálním výsledkům a podrobné informace o elektronové struktuře povrchů a jejich vnitřní stavbě. Z tohoto hlediska práce plně zapadá do světového trendu v této oblasti.

Disertace se skládá z úvodu a dalších čtyř kapitol a má rozsah 113 stran. V úvodu, který je první kapitolou, autor velmi stručně charakterizuje současné postavení metody STM ve výzkumu povrchů pevných látek a vymezuje cíle své práce. Druhá kapitola shrnuje teoretické modely STM a použité metody pro výpočty elektronové struktury. Hlavní část práce tvoří třetí a čtvrtá kapitola, z nichž první z nich je věnována studiu povrchu Invar a druhá monovrstvám tranzitivních kovů na povrchu W(001). Poslední pátá kapitola je stručným shrnutím nejdůležitějších závěrů práce. Styl celé práce svědčí o značné erudici autora a o jeho schopnosti tvůrčího přístupu při řešení dané problematiky.

K teoretickým výpočtům elektronové struktury a příslušných spekter byla použita linearizovaná metoda přidružených rovinných vln se zahrnutím úplného krystalového potenciálu (FLAPW) implementovaná v programovém balíku WIEN2k, která zde patří k nejpřesnějším výpočetním postupům, a metoda linearizovaných muffin-tin orbitalů v aproximaci atomových sfér (LMTO-ASA), která sice není tak přesná, ale umožňuje zahrnout vliv neuspořádaní pomocí aproximace koherentního potenciálu (CPA). Pro ověřovací výpočet vlivu relaxace povrchových vrstev na elektronovou strukturu monovrstev V, Cr, Mn, Fe a Co na povrchu W(001) byla použita metoda pseudopotenciálu implementovaná v programu VASP.

Za hlavní vědecké přínosy práce lze považovat následující výsledky:

1. **Podrobná interpretace spekter a obrazů získaných pomocí STM pro povrch (001) slitiny $Fe_{64}Ni_{36}$ (Invar).** Autor vysvětlil, čím je způsoben kontrast v obrazech tohoto povrchu a našel vztahy mezi příslušnými spektry a lokálním chemickým složením povrchu. Zvláště zajímavá je analýza povrchové rezonance při energii cca 0,3 eV pod Fermiho hladinou a její citlivosti na toto lokální chemické složení. Tyto výsledky poskytují spolehlivý teoretický základ pro další experimentální studium povrchu železných a niklových slitin pomocí STM.
2. **Analýza magnetických charakteristik monovrstev vybraných 3d kovů a jejich dvourozměrných slitin na povrchu W(001) včetně započtení vlivu neúplného pokrytí.** Řada zkoumaných monovrstev slitin (FeMn, FeCr, CoMn, CoCr, CoV)

vykazuje na povrchu W(001) tendenci k antiferomagnetismu, monovrstvy slitin VFe, VCr, VMn a CrMn mají zase tendenci k feromagnetismu. U některých slitin lze očekávat nekolineární základní stav.


3. **Nové poznatky o magnetokrystalické anizotropii monovrstev V, Cr a Mn na povrchu W(001).** Vanadová monovrstva má magnetický moment orientovaný rovnoběžně s povrchem (001), u monovrstev Cr a Mn byla nalezena orientace magnetického momentu kolmo k povrchu jako energeticky nejvýhodnější. Monovrstva Mn na povrchu W(001) vykazuje poměrně vysokou magnetokrystalickou anizotropii, cca 5 meV-atom Mn; tento systém může být zajímavý pro budoucí technické aplikace.

K práci mám následující otázky a připomínky:

1. Ve výpočtech pro monovrstvy provedené metodou LMTO-ASA byla použita pro výměnnou a korelační energii aproximace lokální hustoty (LSDA, str. 72), ale ve výpočtech pro polovrstvu Cr metodou FLAPW autor sáhl po zobecněné gradientové aproximaci (GGA, str. 96). U výpočtů týkajících se vlivu relaxace v kapitole 4.3. není použita aproximace pro výměnnou a korelační energii uvedena vůbec. Zkušenost nás učí, že výsledky získané pomocí LSDA a GGA málokdy bývají plně srovnatelné. Čím byl výběr použité aproximace veden?
2. Při studiu magnetické anizotropie monovrstev 3d kovů na povrchu W(001) byl při výpočtech energie s magnetizací ležící v rovině (001) zahrnut jen případ orientace magnetizace ve směru [100]. Dalším směrem magnetizace, který by v principu mohl mít menší energii, je směr [110]. Proč nebyl tento směr uvažován?
3. V tabulce 6 na str. 87 v řádce tabulky pro $\text{Fe}_{0.25}\text{Mn}_{0.75}$ se mi zdá poněkud podezřelou hodnota $p_X = -0.1$. Je to tak správně, nebo se jedná o překlep?
4. V citaci 59 je nedefinovaná zkratka v názvu konference. Co to je WDS? Pomocí internetu jsem našel, že to zřejmě nebudou například Wireless Diagnostic Sensors nebo World Dog Show, ale spíše Week of Doctoral Students. Zkratka by měla být vysvětlena, čtenář by se měl dozvědět bez hledání, co to bylo za konferenci.

Výše zmíněné připomínky však nikterak nesnižují vědeckou hodnotu předkládané disertační práce. Rád konstatuji, že pan Mgr. Martin Ondráček prokázal svou prací mimo vší pochybnost, že se samostatně dovede orientovat v rozsáhlém oboru kvantově-mechanického studia elektronové struktury látek a tvůrčím způsobem k němu přispět. Práce je zpracována na velmi dobré úrovni, přináší řadu nových poznatků a jasně prokazuje předpoklady autora k další samostatné tvořivé vědecké práci. Disertace v plném rozsahu splňuje požadavky kladené na tento druh prací v příslušných předpisech. Proto ji doporučuji k veřejné obhajobě a po jejím úspěšném obhájení **doporučuji**, aby panu Mgr. Martinu Ondráčkovi byla udělena vědecká hodnost **doktor (PhD)**.

V Brně dne 26. 12. 2008



Ústav chemie
Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita
Kotlářská 2, 611 37 Brno