

## Oponentský posudek doktorské dizertační práce

Autor: Martin Ondráček

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

Předložená práce se zabývá teoretickým výzkumem (001) povrchu kubické plošně centrované slitiny Invaru ( $\text{Fe}_{0.64}\text{Ni}_{0.36}$ ) a povrchu (001) kubického prostorově centrovaného wolframu. Povrch wolframu je pokryt celou nebo částečnou jednoatomovou vrstvou různých tranzitivních kovů (V, Cr, Mn, Fe, Co). Byly teoreticky zkoumány rovněž binární dvoudimenzionální slitiny těchto kovů. Teoreticky byla studována geometrie, elektronové a magnetické struktury. Hlavním cílem práce bylo přispět k interpretaci experimentálních dat Skanovací Tunelové Mikroskopie (STM) o atomovém rozlišení a Skanovací Tunelové Spektroskopie (STS). Studie výše uvedených materiálů je živým a aktuálním tématem fyziky povrchů. Při tomto výzkumu autor aktivně zvládl několik teoretických metod (metoda FLAPW, metoda TB-LMTO a VASP). S rozvojem nových experimentálních a teoretických metod jsou získávány kvalitativně i kvantitativně nové poznatky a to vede k dalšímu dynamickému vývoji fyzikálního modelu elektronových vlastností v těchto systémech.

Práce se skládá z následujících částí. Po obecném úvodu následuje dosti rozsáhlý dobře zpracovaný přehled současného stavu teoretického popisu STM, teorie funkcionálu elektronové hustoty, Kohn-Shamových rovnic, lokální aproximace elektronové hustoty a systémů se spinovou polarizací. Dále následují metody řešení Kohn-Shamových rovnic (linearizované přidružené rovinné vlny bez omezení na tvar krystalového potenciálu (FLAPW), linearizované muffin-tin orbitály s omezením sférického potenciálu (TB-LMTO)). V dalších kapitolách autor zavádí Greenovu funkci, aproximaci koherentního potenciálu, povrchovou Greenovu funkci v metodě TB-LMTO a povrchovou magnetokrystalovou anizotropii (spin-orbitální interakce a příspěvek od magnetické dipolové interakce). Tyto teoretické postupy umožňují autorovy vyhovující popis mikroskopických vlastností povrchu (001) Invaru a vrstev 3d tranzitivních kovů na povrchu (001) wolframu.

V kapitole 3. autor poskytuje přehled teoretických výsledků pro povrch (001) neuspořádané slitiny  $\text{Fe}_{0.64}\text{Ni}_{0.36}$ , které získal ve své práci. Rovněž tato kapitola je podle mého názoru zpracována přehledně a výstižně. Ukazuje, že STM obrazce dovolují identifikovat železné a niklové atomy na povrchu. Toto pozorování je v soulase s prohnutím povrchu (001), které bylo teoreticky předpovězeno pro několik modelů slitiny FeNi. Výpočty elektronové struktury rovněž ukazují, že maximum v diferenciální tunelovací vodivosti nalezené metodou STS může být vysvětleno jako povrchová rezonance.

V kapitole 4 jsou uvedeny výsledky práce a nové poznatky pro povrchy 3d tranzitivních kovů na povrchu (001) W. Autor pojednává o dvoudimenzionálních binárních slitinách magnetických tranzitivních kovů vytvořených jako jednoatomová vrstva na povrchu W. Byla nalezena tendence k feromagnetickému uspořádání pro libovolnou kombinaci vanadu, chromu a manganu a rovněž slabá tendence k vytvoření feromagnetismu pro kombinaci V a Fe. Tendence k antiferomagnetickému uspořádání byla nalezena nejenom mezi Fe a Co ale rovněž pro FeCr, FeMn, CoCr, a CoV. Autor vypočítal rovněž magnetokrystalovou anizotropii monovrstev a tyto výsledky naznačují složitější magnetické uspořádání pro slitiny obsahující V. Následuje závěrečné shrnutí hlavních výsledků a přehled použité literatury (83 citací). Tyto části práce jsou vnitřně konzistentní a představují nesporný příspěvek k pochopení mikroskopické podstaty mechanismů, které vedou k řadě zajímavých a v některých případech i anomálních jevů ve studovaných systémech.

**K panu Ondráčkovi mám následující dotazy či náměty.**

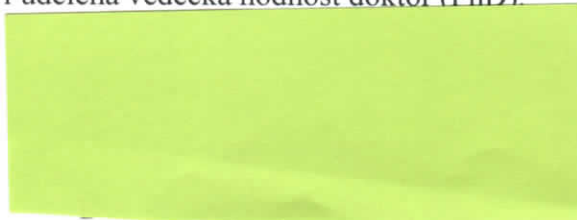
- 1.) Rovnice (73) na straně 30 není rovnicí pro radiální vlnovou funkci  $u(r)$ . Můžete prosím uvést správný tvar radiální rovnice pro funkci  $u(r)$ .
- 2.) Jak má čtenář rozumět výroku „At zero temperature, the alloy is essentially ferromagnetic ..“ (viz strana 45). Jaké teploty má přesně autor na mysli?
- 3.) Jakou fyzikální úvahou lze najít počet relaxujících rovin v sedmi modelech (viz str. 53), jaký byl počet rovinných vln na atom při výpočtech metodou FLAPW?
- 4.) Jakým způsobem byla volena tloušťka vakuové vrstvy a jak byl ověřen předpoklad, že atomy v různých superbuňkách (supercells) spolu neinteragují (viz strana 50)?
- 5.) Na obrázku 19 (viz strana 93, panel c) mi připadá Stonerovo kritérium splněno. Na straně 94 mi ale připadá, že z textu vyplývá nemagnetický základní stav manganu na povrchu W. Můžete tuto skutečnost komentovat?
- 6.) Jaký byl počet rovinných vln na atom při výpočtech magnetokrystalové anizotropie metodou FLAPW (viz strana 101)?

Práce je napsána přehledným a logickým způsobem, a na vysoké technické úrovni (úprava odstavců, barevné obrázky zakomponované přímo v textu), která je z časového hlediska náročná. Existenci několika stylistických chyb, které jsem v práci našel, lze proto omluvit snahou o vysokou celkovou technickou úroveň dizertační práce.

Hlavní výsledky dizertační práce byly publikovány v samostatných publikacích ve významných mezinárodních časopisech (Phys. Rev. B, Surf. Sci., Czech J.Phys.). Výše

uvedené skutečnosti ukazují, že pan Ondráček prokázal v době svého působení na MFF UK (FZU ASCR) svou vysokou vědeckou úroveň v mezinárodním měřítku. Práce svou náplní a kvalitou splňuje požadavky kladené na doktorandskou práci na MFF UK a prokazuje předpoklady autora k samostatné tvořivé práci. Doporučuji proto práci k obhajobě a věřím, že po její úspěšné obhajobě bude autorovi udělena vědecká hodnost doktor (PhD).

Ve Praze dne 7.1.2009



Matematicko-fyzikální fakulta UK  
Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2