

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Bc. František Lukáč
Název práce: Studium defektů ve slitinách na bázi Fe₃Al metodou pozitronové
 anihilační spektroskopie
Studijní program a obor: Fyzika – Fyzika kondenzovaných látek a materiálů
Rok odevzdání: 2011

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Ing. Yvonna Jirásková, Ph.D.
Pracoviště: Ústav fyziky materiálů AV ČR, v.v.i., Brno
Kontaktní e-mail: jirasko@ipm.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/oponenta:

Předložená diplomová práce se věnuje studiu slitin na bázi Fe-Al v širokém koncentračním rozsahu. Nosnou experimentální metodou je pozitronová anihilační spektroskopie (PAS), jejíž výsledky jsou doplněny kvantově-mechanickými výpočty parametrů, experimentálně získaných zmíněnou metodou. PAS je též doplněna výsledky rentgenové difrakce a měřením mikrotvrlosti vzorků studovaných materiálů. Práce je napsána v celkem slušné angličtině s přijatelným množstvím chyb. Je rozdělena do celkem 6 kapitol. První kapitola je věnována základním informacím o použitých experimentálních metodách. K této kapitole se vztahuje otázka č. 1 uvedená níže. Druhá kapitola nastiňuje základní vztahy teoretických výpočtů, které jsou v konkrétní podobě prezentovány v kapitole 4. K podkapitolám 2.1 a 2.2 mám dvě závažnější připomínky:

a) autor zde uvádí dávno zavedené vztahy bez uvedení literatury, z níž čerpal;

b) hustota elektronů je označena $n_+(r)$ a hustota pozitronů $n_-(r)$ (viz. strana 15), což není v souladu s označením vlnových funkcí pozitronů, $\psi_i^+(r)$ a elektronů $\psi_i^-(r)$ ve vztahu (2.8) na straně 16.

Třetí kapitola je věnována experimentálním výsledkům. V podkapitole 3.1 jsou podle mého názoru ne zcela dostatečně popsány materiály, z nichž byly připraveny vzorky pro následující experimenty. Jedná se především o chemické složení. U dvou materiálů je složení uvedeno dokonce na dvě desetinná místa (vzorky s obsahem 39.54 a 44.62 at. % Al), zatímco u ostatních vzorků je koncentrace uvedena v celých hodnotách. K tomu se vztahuje otázka 2 (viz. níže). Nejasnosti jsou i v tepelném zpracování. U vzorku $Fe_{60,46}Al_{39,54}$ je uvedeno žihání při teplotě 520°C (Tab. I na straně 25) a 600 °C (obr. 10, str. 26). Poznámka k tab. I. Ve druhém sloupci je uvedeno tepelné zpracování a nikoliv mřížkový parametr, jak je uvedeno v textu. Poněkud zmatený je také popis parametrů a_{exp} , a'_{exp} , $2a_{exp}$ a $a'_{exp}/2$ pro A2, B2 a D0₃ struktury. K obr. 8 na straně 24 se vztahuje otázka č. 3. Na obr. 11a, 11b je uveden pík (211) a nikoliv (210) jak je zmíněno v textu na str. 26. Na téže straně autor tvrdí, že s rostoucí koncentrací Al roste mřížkový parametr, což není v souladu s tab. I. (viz. otázka č. 4).

V tabulkách III a IV chybí jednotka u koncentrace c_{Al} (jedná se pravděpodobně o at. %). Metoda dopplerovského anihilačního rozšíření čáry (CDB) je zmíněna v první a třetí kapitole pouze okrajově. Nicméně reprezentuje vzorové dvourozměrné CDB spektrum na obr. 15 (str. 33) vzorek s 27 nebo 25 at.% Al?

Na str. 36 v tab. III je pravděpodobně chybně uvedena hodnota c_v pro vzorek s 44.62 at.% Al. Proč se nečistoty, kterými je odůvodněna vyšší hodnota c_v v obr. 24 na str. 42 u vzorku s 25 at.% Al, neprojeví také u vzorku po kalení z teploty 1000 °C?

V podkapitole 3.4.5. se diskuse výsledků zřejmě týká obr. 28 a ne, jak je uvedeno, obr. 17.

Jak je to s označením Fe a Al atomů v obr. 34 s ohledem na diskusi v předposledním odstavci na str. 53?

V podkapitole 4.1.2. není zcela zřejmé, o které NN a NNN atomy (tab. VII, VIII) se jedná. Je to shodné s legendou v obr. 43?

Na str. 68 je rozpor ve větě začínající „Phase diagram in Figure 3 ...“, kde autor konstatuje, že vzorky s $c_{Al} > 30$ % (jedná se pravděpodobně o at. %) kalené z 1000 °C mají A2 strukturu, což mají dokázat rentgenová spektra na obr. 4 a 5 vzorku s 25 at.% Al ($Fe_{75}Al_{25}$).

V závěru bych chtěla podotknout, že uvedené nedostatky nesnižují kvalitu diplomové práce především s ohledem na její široký záběr a dosažené experimentální i teoretické výsledky. Předložená diplomová práce poskytuje komplexnější pohled na studované slitiny na bázi FeAl a nastiňuje i otázky, kterými je třeba se zabývat. Proto ji doporučuji k obhajobě.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1. V jakých jednotkách se uvádí mikrotvrdost?
2. Jaká metoda byla použita pro chemickou analýzu slitin a s jakou chybou byly stanoveny koncentrace u studovaných materiálů?
3. Jsou difrakční spektra vzorku $\text{Fe}_{55,38}\text{Al}_{44,62}$ až na intenzity jednotlivých difrakcí shodná jak to plyne z obr. 8, nebo je to dáno použitým měřítkem ve zmíněném obrázku?
4. Je známo, že mřížkový parametr s rostoucí koncentrací Al roste (viz. citace 22 v dipl. práci). Jak si vysvětluje autor opačný trend ve vlastních naměřených hodnotách?
5. Dopplerovská anihilační spektra se často vyhodnocují pomocí tvarových S a W parametrů. Může autor blíže vysvětlit jejich význam? Nezkoušel vyhodnotit tyto parametry také z vlastních měření?
6. Teplotní interval změn I_2 (obr. 28b) a c_v (obr. 29) s teplotou se nápadně shoduje s oblastí výskytu tzv. dvojného Curieova bodu (viz. fázový diagram FeAl - citace 12, příp. citace 22, v dipl. práci), který se vyskytuje u slitin s koncentrací Al mezi cca 23 a 26 at.%. Jako námět do diskuze je tedy otázka souvislosti změn koncentrace vakancí s magnetickými transformacemi.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/opponenta: Brno, 5. 5. 2011



