

Vyjádření školitele

k disertační práci Mgr. Zdeňka Matěje

Structure of Submicrocrystalline Materials Studied by X-Ray Diffraction

Mgr. Zdeněk Matěj zahájil doktorské studium již v říjnu 2003. Před tím ukončil studium na MFF UK, obor Fyzika kondenzovaných soustav a materiálů. Pro disertační práci si vybral téma Studium struktury submikrokrystalických materiálů, kde mohl také navázat na výsledky diplomové práce. Ve studiu neměl žádné problémy ani během magisterského studia ani v doktorandském studiu, kde složil včas všechny předepsané zkoušky.

Velmi brzy bylo patrné, že pro rtg difrakční analýzu širší škály submikrokrystalických a nanokrystalických materiálů si nevystačíme s žádným dostupným programovým vybavením, protože v každém systému chybí některé rysy potřebné pro konkrétní úlohu (např. tenké vrstvy, zbytkové napětí, textury na jedné straně či dislokační modely na straně druhé). Zdeněk Matěj se tedy rozhodl vytvořit vlastní systém, kam by mohl snadno sám přidávat potřebné korekce a další modely. Pro to se ukázal vhodný systém FOX resp. knihovna ObjCryst vyvinuté V. Favre-Nikolinem (v laboratoři v Ženevě pod vedením našeho bývalého kolegy R. Černého). Během doby se podařilo vytvořit program MSTRUKT, který obsahuje několik modelů i korekcí a byl již použit pro analýzu celé řady materiálů. Z výsledků je jen menší část obsahem disertace.

Zdeněk Matěj se vyznačuje tím, že se vždy snaží dobře porozumět řešené problematice. První část disertace věnoval kritickému rozboru současně používaných dislokačních modelů pro výpočet difrakčních profilů. Tato část je hutnější, ale velmi užitečná pro ujasnění problematiky. Další část je věnována vlivu deformačních polí na difrakční profily. Jsou prezentovány výsledky ukazující na vliv vrstevných chyb ve zlatých nanočásticích, efektu původně odhadnutého jen z šířek a následně potvrzeného pomocí nového software a dalších experimentů. Z řady výsledků získaných na deformovaných submikrokrystalických materiálech je vybráno jen několik málo. Ukázalo se, že i když ve většině případů lze odhadnout rozumně hustoty dislokací, současné modely nejsou pro tyto materiály vždy dostačující a celkové fity nelze již vylepšit pomocí změn parametrů použitého modelu uspořádání dislokací s malou korelací. Velmi pěkné výsledky byly získány na nanokrystalických prášcích, kde se podařilo získat velmi dobrou shodu s výpočty. Bylo ukázáno, že je možné získat věrohodné informace o velikosti krystalitů i jejich rozdělení. Z. Matěj implementoval do programu i možnost nafitování celého histogramu velikostí bez předpokladu jakéhokoli analytického popisu rozdělení velikostí krystalitů. Zároveň otestoval limity metody na směsích prášků s různou velikostí částic. Ukázalo se, že je velmi podstatný způsob středování velikostí. Do disertace autor nezařadil další řadu cenných výsledků získaných na tenkých vrstvách, zejména TiO_2 , jako např. určení hodnot zbytkových napětí přímo z detektorových skenů v paralelní geometrii či metodu nízkého úhlu výstupu svazku z vrstvy (namísto nízkého úhlu dopadu), které se věnoval, testoval a modeloval. Tyto výsledky by vydaly téměř na další disertaci.

V průběhu celého studia vykonal Zdeněk Matěj obrovské množství práce v oddělení strukturní analýzy, KFKL. Jednak v rtg laboratoři, kde se účastnil na různých modernizacích a prováděl řadu měření i pro externí pracovníky, ale zejména na několika projektech GaČR a AVČR (Nanoprojekt), kde byl jeho přínos zcela zásadní. Podílel se i částečně na výuce v rámci praktik. To vše se ovšem, současně s jeho snahou o důkladné zpracování a porozumění problematice, podepsalo na odkládání vlastní disertační práce. Musím přiznat, že jsem od určité doby na něj nenaléhal k jejímu dokončení s uvážením potřebnosti jeho další činnosti a také dovedení software do dokonalejšího stavu.

V průběhu studia strávil Zdeněk Matěj několik týdnů na zahraničních pracovištích. Jednalo se zejména o měsíční studijní pobyt na Ústavu anorganické chemie SAV v Bratislavě, pobyt ve vývojových laboratořích firmy Panalytical v Almelu (Holandsko) a také na Univerzitě Rolanda Eötvöse v Budapešti. Své příspěvky prezentoval na několika konferencích a to např. EPDIC (European Conference on Powder Diffraction) v Praze 2004, Ženevě 2006, Varšavě (2008), ECM v Budapešti (2004), Size-Strain v Garmisch-Partenkirchenu (2008), konferencích Nano pořádaných ČSNMT i kolokviích Krystalografické společnosti Struktura, kde kromě účasti v několika studentských přehlídkách vedl i kurs ke svému programu. Během doby nashromáždil slušný, i vzhledem k delší době studia, počet publikací a citací, tedy recenzovaných 36 článků zařazených v databázi ISI, převážně v mezinárodních časopisech, menší část ve sbornících. Další recenzované články má v časopisech nezařazených v této databázi.

Mgr. Zdeněk Matěj v průběhu doktorského studia jednoznačně prokázal schopnost samostatné práce a dobré předpoklady pro moderní experimentální výzkum ve fyzice kondenzovaných látek. Ukázal své schopnosti jak po stránce experimentální, zejména v rtg laboratoři, tak i výpočetní a programátorské. Doporučuji komisi, v případě úspěšné obhajoby, udělit Mgr. Zdeňku Matějovi titul Ph.D.

V Praze, dne 10. 8. 2011

Doc. RNDr. Radomír Kužel, CSc.

školitel