

Posudek disertační práce

Název práce: Interaction of group III and IV metals with Si (100) surface in temperature range from 20 to 800 K

Autor: Mgr. Martin Setvín

Práce se zabývá studiem atomárních procesů na površích různých rekonstrukcí Si (100) souvisejících s depozicí velmi malého množství atomů kovů v podmínkách velmi vysokého vakua. Jako experimentální technika byly využity různé metody rastrovací sondové mikroskopie, zejména rastrovací tunelové mikroskopie a bezkontaktní mikroskopie atomárních sil v kombinaci s paralelním měřením tunelového proudu.

Hlavní část práce (a hlavní vklad autora) je zaměřena na pozorování a interpretaci typických jevů, které při depozici nastávají. V práci je uvedeno velké množství experimentálních dat popisujících různé systémy. Pro interpretaci je využita zejména metoda Monte Carlo, umožňující simulovat kinetické procesy a jejich závislosti na lokálních energetických bariérách. Výsledky jsou doplněny také výpočty pomocí metody funkcionálu hustoty (DFT). Mezi klíčové výsledky patří například simulované a měřené aktivační energie a difuzní koeficienty popisující přeskoky indiových atomů na křemíku.

Hlavní výsledky prezentované v práci jsou přehledně popsány a podrobně diskutovány v odborných publikacích, které jsou součástí textu. K práci by bylo nicméně možné mít následující dotazy a připomínky, zejména v souvislosti s prezentací některých dílčích výsledků:

- Popis frekvenčního posuvu ve frekvenčně modulovaném AFM je poněkud zjednodušený - využívající harmonický oscilátor v homogenním poli (kapitola 3). Zohledňoval se při interpretaci dat fakt, že jak model oscilátoru, tak model pole patrně úplně nesplňuje tyto předpoklady? Může to mít vliv na absolutní hodnoty síly, které jsou srovnávány s ab-initio výpočty?
- Je škoda, že popis modelování metodou KMC, která je jedním z těžišť práce, je poněkud roztržštěný (stručný úvod v kapitole 3.3, další podrobnosti v článku v následující kapitole). U obhajoby by bylo zajímavé dozvědět se i nějaké konkrétnější podrobnosti o simulaci (počet kroků, čas nutný pro získání dostatečného statistického vzorku, použité výpočetní nástroje atd.).
- Interpretace nc-AFM dat za pomoci DFT by patrně v práci zasloužila o něco více prostoru (přestože se nejedná o hlavní z výsledků autora). Byly provedeny simulace i s jinými hroty, než s hrotem uvedeným v sekci 7.2.1? Je možné z výpočtů odhadnout, čím se od sebe lišily hroty, se kterými byla provedena měření v obrázku 7.9?

Z formálního hlediska je práce přehledně strukturovaná, drobné formální chyby jsou jen ojedinělé a nemají vliv na srozumitelnost textu (např. „van der Waalsovy síly na str. 8).

Autor prokázal svou schopnost samostatně provést mnohá náročná měření, interpretovat je a publikovat jejich výsledky v prestižních časopisech, což nepochybně prokazuje jeho vědeckou erudici. Práce splnila stanovené cíle a dosažené výsledky jsou jednoznačně přínosem pro rozvoj oboru.

Navrhují proto práci doporučit k obhajobě a udělení akademického titulu Ph.D.

V Brně dne 21. 12. 2011

Mgr. Petr Klapetek, PhD.

Český metrologický institut