

Vyjádření školitele k doktorandovi a disertaci

Komplexní difrakční studium polykrystalických tenkých vrstev

autor: Mgr. Daniel Šimek

Doktorand Mgr. Daniel Šimek vystudoval Matematicko-fyzikální fakultu UK, obor Fyzika pevných látek a nastoupil do doktorandského studia na katedře fyziky elektronových struktur v roce 2000. Jelikož jeho původní školitel Doc. David Rafaja nastoupil na profesorské místo na Technické univerzitě ve Freibergu, došlo v roce 2003 jednak ke změně školitele a také ke změně tématu práce na téma jež je názvem práce. Své schopnosti v oblasti teoretické, výpočetní i experimentální osvědčil doktorand již během diplomové práce a potvrdil i v průběhu doktorandského studia. Všechny předepsané zkoušky složil bez problémů. I vzhledem k tomu se pustil do obtížného problému a i když se mu podařilo získat cenné poznatky a především vytvořit patřičný software, nebyl s výsledky spokojen a dokončení práce oddaloval. Zejména pak po přerazení do kombinovaného studia, kdy zcela přešel do Fyzikálního ústavu AV ČR, kde již dříve pracoval na částečný úvazek. Tam se kromě servisní práce v laboratoři ROTAN věnoval i technickým záležitostem řízení difrakčních měření a opět osvědčil svoji experimentální a technickou šikovnost.

Předložená práce se zabývá zejména obtížným problémem měření a vyhodnocení rtg difrakce na tenkých polykrystalických vrstvách se silnou přednostní orientací a zároveň v napětí. Tento problém vystupuje zejména u nekubických nestechiometrických materiálů, kde je třeba oddělit efekt napětí od případného vlivu chemického. Přitom jsou k dispozici jen určité orientace krystalitů. Tak tomu je např. u studovaných magnetronově naprašovaných vrstev TiB_2 . Doktorand se rozhodl přistoupit k problému velmi obecně a vytvořit jednak algoritmus měření a vyhodnocení a jednak příslušný program, který by bylo možno aplikovat na nejrůznější vrstvy a multivrstvy a ne jen na studovaný materiál. Jako jediným východiskem se jevil naměření, simulace a případné nařizování map recipročního prostoru,

V první kapitole popisuje základy partií difrakce, které se řešeného problému týkají. V daném případě jsem doporučoval vypustit partii o roztylu na elektronu a atomu, které jsou elementární. Ve druhé části se věnuje numerickému modelování 2D difrakčních map a rozboru jednotlivých faktorů. Dále nasimuloval mapy pro různé typické případy. Postupně vysvětluje jednotlivé kroky simulací – výpočet strukturního modelu, rozšíření linií, popis textury a napětí, absorpční faktor, další úhlově závislé faktory. V této i další části charakterizuje pěkným způsobem moderní používané optické elementy. Pro popis zbytkového napětí ve vrstvách použil dva známé extrémní modely Reussův a Voigtův a diskutuje i model Vookův-Wittův odvozený pro tenké vrstvy. Doktorand odvodil pro tyto případy řadu užitečných vztahů. Řadu dalších originálních formulí používá v celé práci.

Nutno podotknout, že autor i v první části až na úplný úvod používá vlastní formulace i vysvětlení a neopisuje je z literatury. To se pak zcela týká i části druhé, která by se dala zařadit spíše mezi výsledky. V každém případě autor zde vytvořil obecně užitečný text a z této části vznikla kvalitní publikace.

V části třetí pak popisuje použitá experimentální zařízení, přípravu vzorků i postup odstraňování vrstev ze substrátu. Hlavní částí jsou pak měření série vzorků TiB_2 připravené magnetronovým naprašováním jednak za různých teplot a především za různých předpětí. Výsledky nejsou zcela jednoznačné a to bylo právě hlavní příčinou neustálého odkládání dokončení práce. Nicméně autor rozdělil vzorky do skupin podle stupně přednostní orientace

a charakterizoval je. Mapy nasimuloval pomocí čtyř různých modelů. Výsledky by si zasloužily i podrobnější komentář. Na druhé straně v některých pasážích se opakuje.

Nezbytnou a cennou částí je rozbor možných chyb procedury a spolehlivosti získaných parametrů v závislosti na stupni přednostní orientace i meze použitelnosti metody.

V části třetí jsou diskutovány jednotlivé získané parametry, jejich závislost na podmínkách přípravy a především možnosti určení. V závěru pak hodnotí možnosti metody.

Doktorand plně prokázal schopnost samostatné tvůrčí vědecké práce a snahu o dobré pochopení veškerých řešených problémů. Dokázal se dobře vypořádat s obtížným úkolem. Menší nedostatky spatřuji někdy ve schopnosti jasně a efektivně popsat řešené problémy a výsledky a také v poměrně málo intenzivním studiu současné odborné literatury. To i snaha o co nejdokonalejší vyřešení problému se projevily v zatím ne zcela dostatečném zhodnocení získaných poznatků v publikacích. Přitom doktorand aplikoval svoji metodu na řadu dalších vzorků než je uvedeno v práci. Zásadní dlouhý článek, první část disertace, opublikoval v prestižním časopisu *J. Appl. Cryst.* Druhá část je před dokončením. Celkem má 8 publikací v mezinárodních časopisech, z nichž polovina se přímo týká disertační práce a devět dalších příspěvků. Ve větší části prací byl jeho podíl dominantní. Hlavní výsledky prezentoval i na mezinárodních konferencích VII. a IX. European Powder Diffraction Conference, (Uppsala, 2002, Praha, 2004), "Structure Solution from Powder Diffraction Data, SSPD'03" (Stará Lesná, 2003) a kolokviích Krystalografické společnosti.

Vzhledem ke kvalitě vědecké práce doktoranda a jeho schopnostem jednoznačně doporučuji udělení titulu PhD.

28. 8. 2008

