

Oponentský posudek disertační práce Mgr. Zdenky Kuntové

Povrchová difúze adsorbovaných atomů v nerovnovážných podmínkách

Disertační práce je věnována teoretickému studiu povrchové difúze adsorbátů v souvislosti s experimenty pro systémy Ag/Ag(111) a Pb/Pb(111), které byly provedeny částečně ve Fyzikálním ústavu AV ČR v Praze, ale zejména na spolupracujícím pracovišti ve skupině profesora Tringidese na universitě v Iowě. Difúze se popisuje pomocí vhodného stochastického modelu, který lze řešit nalezením analytického řešení tzv. mistrovských rovnic nebo pomocí numerických simulací metodou Monte Carlo (MC). V práci jsou použity oba přístupy.

Práce má celkem 81 stran a skládá se ze čtyř kapitol a jednoho dodatku. V první kapitole je pomocí MC simulací analyzována difúze v systému Ag/Ag(111) a výsledky jsou srovnávány s existujícími experimenty.

V druhé kapitole je studována difúze individuálních atomů olova na rekonstruovaném povrchu Si(111)-7x7 pomocí analytické metody řešení mistrovských rovnic. Výsledkem jsou efektivní bariéry pro difúzi uvnitř polocel a mezi polocelami, které jsou v souladu s experimentem.

V třetí kapitole je zkonstruován a řešen stochastický model pro vznik plochých ostrůvků olova určité velikosti a výšky na povrchu Si(111). Vzhledem k obtížnosti získání analytického řešení byla analýza provedena pomocí MC. Model umožňuje kvalitativní vysvětlení experimentálně pozorovaných teplotních závislostí.

Ve čtvrté kapitole je zkonstruován a vyšetřován mikroskopický kinetický model pozoruhodného jevu, jenž byl pozorován teprve nedávno. Bylo zjištěno, že růst vrstev nahoře uvedených ostrůvků je střídavě stabilní nebo nestabilní podle výšky ostrůvku – tj. pořadí uvažované vrstvy. Předpokládá se, že tento jev je způsoben kvantováním v konečném objemu. Detailní mechanismus vzniku ostrůvků je však nejasný, model navržený v práci Z. Kuntové poskytuje možné vysvětlení. Bude-li model potvrzen a přijat, jednalo by se o významný výsledek.

V doplňku je detailně studována časová závislost velikosti ostrůvků stříbra pro různé teploty.

Všechny řešené dílčí problémy jsou aktuální, zvláště problém samoorganizace ostrůvků olova s vybranou výškou, jenž je ve středu zájmu současného materiálového výzkumu.

Disertační práce nepochybně obsahuje nové zajímavé výsledky a přispívá k rozvoji našeho chápání povrchové difúze a samoorganizace na površích. Je překvapivé, že autorka v textu neodkazuje na své publikace, kromě práce [62] přijaté v Surface Science.

Z formálního hlediska má však práce mnohé nedostatky. Pro příklad uvedu jen některé:

- a) na str. 37 je odkaz na neexistující obrázek 3.4.2,
- b) na str. 48 je odkaz na neexistující tabulku 3.5.3,
- c) ve vzorci (2.2) aj. chybí vysvětlení významu šipek použitých jako indexu,
- d) na str. 31 se odkazuje na obrázek 2.1 pro výklad polohy T4, v němž však tato poloha není uvedena,
- e) na str. 44 popis obrázku 3.10 nesouhlasí s veličinou na x-ové ose v obrázku,
- f) navíc v prohlášení o zapůjčování práce i v abstraktu autorka zaměřuje svoji disertační práci za diplomovou práci,

g) práce dále vykazuje množství překlepů, jejichž seznam by byl dlouhý a není účelem tohoto posudku, na první pohled překvapí např. chyba v diakritice u jména školitele.

Uvedené nedostatky zbytečně snižují úroveň práce a svědčí o tom, že práce byla buď napsána ve spěchu nebo nedbale.

K disertační práci mám následující konkrétní otázky:

1) K systému Ag/Ag (111): V tabulce 1.1 na str. 9 jsou uvedeny poměrně přesné hodnoty bariér pro procesy na povrchu Ag(111) užitě v MC simulacích. Jak byly hodnoty s přesností na tři platná čísla určeny? Jde o případy, kdy tabulka neobsahuje vypočtené hodnoty bariér, nebo se hodnoty bariér užitě pro MC liší od vypočtených. Bylo zkoumáno, do jaké míry závisí získané výsledky na konkrétních hodnotách bariér?

2) Ke kinetickému modelu v kapitole 4: Existence hlubokého energetického minima na horním okraji ostrůvku vedoucí k příspěvku E_b k bariéře mezi 6., resp. 7. vrstvou a tzv. smáčecí vrstvou (wetting layer) je překvapivá. Jaký je fyzikální důvod pro toto hluboké energetické minimum?

3) Kromě studovaného systému Pb/Pb(111) je experimentálně zajímavý též systém Pb/Cu(111). Konstrukce kinetického modelu se zdá být nezávislá na typu substrátu pod ostrůvky olova. Lze se tedy domnívat, že analogický model je aplikovatelný na systém Pb/Cu(111)? Pokud ne, jakou změnu modelu lze očekávat?

Závěr: Celkově se domnívám, že Mgr. Zdenka Kuntová původními výsledky prezentovanými v disertační práci prokázala své předpoklady k samostatné tvořivé vědecké činnosti. Bohužel z hlediska prezentace, tj. po formální stránce, je podle mého názoru disertační práce na hranici přijatelnosti a bylo by tedy vhodné ji opravit. Nicméně, s touto výhradou navrhuji, aby práce byla přijata k obhajobě.

V Praze 5. listopadu 2006



RNDr. Miroslav Kotrla, CSc.
Fyzikální ústav AV ČR
Na Slovance 2, 182 21 Praha 8