

Vyjádření školitele k průběhu doktorandského studia Mgr. Zdenky Kuntové a k její disertační práci.

Mgr. Zdenka Kuntová nastoupila doktorandské studium 1. 10. 2002. Hlavním programem její práce bylo studium kinetiky nerovnovážných procesů na površích kovů a polovodičů na mezoskopické úrovni. Hlavním rysem těchto procesů jsou nerovnovážné podmínky a nanorozměry. Nanostruktury jsou obvykle příliš velké na ab-initio výpočty a na druhé straně příliš malé pro aplikace standardních termodynamických metod. V této zajímavé oblasti jsou ke studiu procesů velmi vhodné numerické simulace metodou Monte Carlo. Mgr. Kuntová se zabývala analýzou těchto procesů a spolupracovala s experimentální skupinou v Ames Laboratory, Iowa State University, USA, vedenou profesorem M.C. Tringidesem. V této skupině se studují uspořádané struktury kovů na površích křemíku metodou STM a SPA-LEED. Práce je soustředěna především na samo-organizaci lineárních fází v systému Pb-Si(111) a růst nano-ostrůvků olova na křemíku. Tato spolupráce byla podporována společným grantem v programu KONTAKT MŠMT a NSF.

Mgr. Kuntová splnila předepsané náležitosti dané studijním programem. Předepsané zkoušky, zvláště státní doktorskou zkoušku, zvládla výborně. V prvním roce studia se Zdenka Kuntová zabývala analýzou experimentů difúze atomů olova na povrchu křemíku. Experimenty byly prováděny metodou STM v oddělení tenkých vrstev ve Fyzikálním ústavu AV ČR. V dalším průběhu studia se studentka Kuntová začala zabývat problémy řešenými ve spolupráci s Iowa State University. Samostatně vypracovala program, který metodou Monte Carlo umožňuje simulovat kinetiku adsorbovaných atomů na površích kovů, růst nanokrystalů a modelovat povrchový potenciál, který by vedl k dobré shodě s experimentálními výsledky.

Prvním problémem, který řešila v této oblasti byla otázka, zda platí termodynamické koncepty, speciálně Gibbs-Thompsonova aproximace, také v případě nanostruktur. Ukázalo se, že pro velmi malé rozměry nanostruktur je tato koncepce chybná a procesy je nutné modelovat v rámci molekulárních modelů. Druhým problémem, který studentka řešila ve spolupráci s Ames Laboratory, byl růst nanoostrůvků olova na povrchu křemíku Si(111). Zde se, v závislosti na teplotě a pokrytí, pozoruje růst ostrůvků určité výšky. Rozdělení ostrůvků podle výšky, je téměř homogenní, přitom výška stabilních ostrůvků nabývá lichých hodnot. Detailní pozorování růstu jednotlivých ostrůvků metodou STM ukázalo vývoj dvouvrstvého prstence na okraji ostrůvku, který se postupně zaplňuje. Zdenka Kuntová navrhla potenciál adsorpce atomů olova na povrchu ostrůvků a metodou Monte Carlo simulovala růst. Navržený potenciál dobře simuluje pozorované děje.


Vzhledem k časové náročnosti realizovaných počítačových simulací se o rok posunulo ukončení disertační práce. V posledním roce studia připravovala studentka své výsledky k publikaci. Jejimi spoluautory jsou kolegové z Ames Laboratory (USA), což také trochu prodloužilo dobu jejich předání do tisku. Přesto se podařilo publikovat výsledky ve třech publikacích v prestižních časopisech. Jedna publikace je v současné době v recenzním řízení v Phys. Rev. B. Zdenka Kuntová prezentovala také svoji práci na 6 mezinárodních konferencích a workshopech a na zahraničních pracovištích (Helsinki University of Technology, Ames Laboratory, USA, University of Genova, Itálie). Aktivně se účastnila přípravy dvou mezinárodních workshopů, pořádaných FZU AV ČR.

Disertační práci „Surface diffusion of adsorbed atoms in non-equilibrium conditions“ vypracovala studentka samostatně. V této práci jsou shrnuty výsledky studia v oblastech, o nichž jsem se zmínil výše. Disertační práce je napsána v jazyce anglickém. Jsou v ní dobře formulovány problémy a experimentální výsledky, které pak jsou studovány teoreticky. Mgr. Zdenka Kuntová dosáhla zajímavých výsledků a ve své disertaci je kriticky diskutuje. Ukázala omezenou platnost termodynamických konceptů na malých rozměrech nanostruktur, navrhla modelový potenciál adsorpce atomů olova na povrchu ostrůvků, který dobře popisuje pozorované módy růstu ostrůvků Pb/Si(111).
.....

Zdenka Kuntová prokázala svou prací schopnost samostatné vědecké práce. Samostatně formulovala problémy a navrhovala jejich řešení. Mgr. Kuntová je talentovaná mladá vědecká pracovnice, která se zajímá o současné problémy fyziky, je schopná formulovat ideje a problémy řešit.

Výsledky, prezentované v disertační práci, byly ověřeny v mnoha diskusích na mezinárodních konferencích a zahraničních pracovištích. Slabší stránkou byla závěrečná úprava celé práce, které nebyla věnována dostatečná pozornost. Snad na omluvu lze uvést spěch s kterým byla práce dokončena před odjezdem Zdenky Kuntové na pracovní pobyt do Itálie. Tyto nedostatky studentka odstranila přepracováním celé disertace, která představuje dobrý podklad pro udělení titulu doktor.

V Praze 4.12.2006



školitel
Fyzikální ústav AV ČR
Na Slovance 2
Praha 8