

Oponentský posudek na disertační práci:

Pavel Márton: "Modelling of Domain Structures in Ferroelectric Crystals"

Doktorská disertační práce Pavla Mártoně se zabývá počítačovým modelováním vzniku doménových struktur v dielektrikách při fázovém přechodu z paraelektrického do feroelektrického stavu nebo mezi dvěma feroelektrickými stavy. Důraz je kladen na materiály se strukturou typu perovskitu jako BaTiO_3 .

Zvolené téma je v dnešní době vysoce aktuální kvůli významu, který mají feroelektrika v různých zařízeních, používaných v moderních technologiích. Analytický popis mnoha jevů, na kterých jsou tato zařízení založena, není možný, proto jejich numerická simulace na počítačích přitahuje velkou pozornost.

Předložená práce je rozčleněna do devíti kapitol, doplněných šesti dodatky, seznamem použitých pramenů a souborem publikací autora.

V první kapitole, která je úvodem do problematiky, jsou prezentovány základní pojmy týkající se struktury a chování dielektrických materiálů, které pod jistou teplotou přecházejí do feroelektrického stavu. Jsou zde rovněž formulovány hlavní cíle disertační práce.

Ve druhé kapitole je popsán zobecněný Ginzburg-Landau-Devonshireův fenomenologický model umožňující výpočet volné energie systému, skládající se z několika příspěvků získaných rozvojem hustoty volné energie podle složek elektrické polarizace, a jejich prvních prostorových derivací (nelokální příspěvek), lineárně elastického, elektrostrikčního a depolarizačního příspěvku.

Ve třetí kapitole je prezentován seznam nenabitých elasticky kompatibilních doménových stěn, které se vytváří v různých feroelektrických stavech BaTiO_3 , popis problému prostorového rozložení elektrické polarizace a složek tenzoru deformací ve směru kolmém na doménové stěny (jednorozměrná aproximace) a jsou graficky ilustrovány výsledky analytického řešení pro zvolené hodnoty materiálových konstant.

Ve čtvrté kapitole jsou stručně popsány mechanismy elektrické polarizace v BaTiO_3 jako funkce frekvence.

V páté kapitole je na několika stranách vysvětlen popis časového vývoje elektrické polarizace ve feroelektriku v přímém a reciprokém prostoru na základě fenomenologické Landau-Chalatnikovovy rovnice.

Numerické řešení této rovnice pomocí programu popsaného v šesté kapitole tvoří jádro práce, které umožňuje simulaci vzniku a časového vývoje feroelektrických domén na počítači.

Sedmá kapitola obsahuje příklady počítačových simulací při studiu vlivu zvolených parametrů na strukturu domén v různých situacích.

V osmé a deváté kapitole jsou shrnuty nejdůležitější závěry plynoucí ze získaných výsledků numerických výpočtů a navrženy možná zlepšení a zobecnění pro práci plánovanou v budoucnosti.

Dodatky obsahují doplňující materiál k matematickému formalizmu v hlavní části práce.

Za hlavní přínos práce považuji vytvoření realistického počítačového modelu vývoje doménové struktury feroelektrik v 3D prostoru a kritické zhodnocení vlivu různých příspěvků k volné energii systému na tento vývoj. Autor v předložené získal řadu nových výsledků, čímž prokázal své schopnosti samostatného řešení zvolené problematiky.

Práce je napsána poměrně dobrou angličtinou, našel jsem několik „překlepů“: na str. 29 má být správně Hooke's law (ne Hook's law) nebo v kapitole 4 má být správně optical mode místo optic mode.

Našel jsem rovněž několik drobných faktických chyb, jako např.:

- v seznamu použitých symbolů (str. 6) je uveden nesprávný význam několika symbolů (F_q , F_{dep} a F_{Cq} nejsou hustoty příspěvků do celkové volné energie, ale tyto příspěvky samotné, jak je patrné z rov. 2.1).
- v některých rovnicích nejsou uvedeny rozměry fyzikálních veličin (např. rovnice 2.7).


Práce je místy psána poněkud nepřehledně a příliš popisně, což znesnadňuje sledování textu a vlastního výkladu.

Byl bych rád, kdyby autor v diskusi zodpověděl následující otázky:

1. V úvodní kapitole je poněkud nejasně formulován hlavní cíl dizertační práce: „přispět k poznatkům o doménových stěnách a tvorbě domén ve feroelektrických materiálech“. V čem spatřuje autor hlavní přínos výsledků svých numerických simulací pro popis struktury a vlastností feroelektrických materiálů ?
2. Jako vstup pro numerické simulace tvorby domén slouží poměrně rozsáhlý soubor materiálových konstant. Hodnoty těchto konstant se mohou dokonce značně lišit, jak je patrné z tabulky 2.1. Může autor tento fakt vysvětlit a kriticky zhodnotit vliv přesnosti použitých hodnot na získané numerické výsledky ?
3. Jak je možno využít výsledků dizertační práce k nalezení odpovědi na otázku formulovanou na str. 9: jak vytvořit monodoménové materiály nebo vymazat doménovou strukturu, která je nežádoucí ?

Na závěr konstatuji, že předložená práce splňuje požadavky kladené na doktorskou disertační práci. Doporučuji ji proto k obhajobě.

Praha, 25. září 2007



Matematicko-fyzikální fakulta
Univerzita Karlova

V Holešovičkách 2
180 00 Praha 8