

Oponentský posudek doktorské disertační práce Ing. Pavla Mártona Modelling of domain structures in ferroelectric crystals

Práce Ing. Pavla Mártona shrnuje původní výsledky dosažené v otázkách modelování doménových struktur feroelektrických perovskitů ve dvou tématických okruzích:

1. Analytické řešení profilů mechanicky kompatibilních doménových stěn ve všech třech feroelektrických fázích monokrystalického BaTiO_3 .
2. Numerická simulace vzniku a vývoje doménové struktury BaTiO_3 při poklesu teploty za stálého tlaku.

Aktuálnost řešené tematiky je stručně zdůvodněna v úvodu práce.

Disertace je psána dobrou angličtinou, graficky je velmi čistě a přehledně provedena. Zmiňme nejdříve některé drobné výhrady. Autorovi se nepodařilo zcela uhlídat tiskového šotka. Tak např. známého teoretika Slatera překřtil na Slattera (opakovaně na stranách 60 a 61), na str. 19 zažertuje se čtenářem, když mu doporučuje, že rozdíl mezi silnými a slabými čarami v grafech je vysvětlen na str. 19 - tedy na těžce stránce, kde ho však čtenář hledá marně, protože ve skutečnosti je až na str. 20. (Některé další drobné překlepy a nepřesnosti jsem označil v disertaci tužkou.)

Mezi několik málo nesprávných tvrzení (která se vyskytují hlavně v úvodu) patří např. věta (str. 8 dole) „Ferroelastic domain is part of material with the same (directional) elastic properties“. Zde se autor nechal zmást nelogickou terminologií, kterou zavedl Aizu. Správná definice zní „Ferroelastic domain is part of material with the same spontaneous strain“ – na rozdíl od Aizuho terminologie bylo by proto logičtější nemluvit o *feroelastických*, ale o *feromechanických* doménách a přechodech. Ostatně v termínech, které jsou zavedeny v teorii dvojčatění jsou *feroelastická* doménová dvojčata totožná s *mechanickými* dvojčaty. Poznamenejme ještě, že ze systematických tabulek tenzorového rozlišení neferoelastických doménových stavů (Internat. Tables for Crystallography, vol. D, str. 478) lze vyčíst, že libovolné *neferoelastické* domény se vždy liší nejméně ve třech nezávislých *elastických* koeficientech. – Podobně, a podle mého názoru nevhodně, užívá autor termin „elastically compatible domain walls“ (str. 38 ad.). Správnější a obvyklejší je mluvit o kompatibilitě deformací (compatibility of strain components, equations of compatibility, mechanically compatible domain walls).

Je sympatické, že se autor pokusil ve své doktorské disertaci prezentovat výsledky poněkud jiným způsobem, než je tomu ve dvou jeho (a spoluautora J. Hlinky) publikacích. U tak obsáhlého materiálu, jaký práce obsahuje, to není jednoduchý úkol, který se podařilo splnit jen částečně. Čtení disertace není zcela snadné, předmět práce a její dělení je velmi stručně uvedeno až v samém závěru úvodu, jednotlivé části na sebe často navazují náhlým střihem, diskuse a porovnání s experimentálními výsledky jsou stručné, apod. To kontrastuje s prezentací publikace ve Phys. Rev. B, která je psána velmi jasně, přehledně a s podrobnou diskusí. V části týkající se simulací jsem postrádal porovnání s pracemi Roytburda (kde se rozebírá vliv mechanických okrajových podmínek u neferoelektrických feroelastických doménových struktur) i s pracemi E.K.H. Saljeho a spol. (ranná stadia tvorby domén, tzv. tweed texture). Je též škoda, že se v práci nediskutuje podrobněji srovnání s ab initio výsledky pro 180° a 90° stěny (např. Padilla et al., 1996, Meyer et al., 2002) a principiální omezení použitých modelů (např. nemožnost lokalizace stěny v diskretní mřížce).

Velkou předností je však skutečnost, že ve srovnání s publikací v Phase Transitions obsahuje disertace celou řadu nových, závažných, ale dosud nepublikovaných výsledků: profily stěn v ortorombické a romboedrické fázi (cenné by bylo jejich podrobnější porovnání), dvojrozměrné simulace v ortorombické fázi, trojrozměrné simulace v tetragonální fázi a d.

Přínosy práce jsou nesouměřitelné se shora uvedenými poznámkami. Výsledky týkající se fenomenologických modelů jsou založeny na podrobném rozboru jednotlivých energetických příspěvků a na velmi pečlivé volbě číselných koeficientů. To zaručuje kvantitativní věrohodnost výsledků týkajících se tloušťky i profilu stěn. Tato část práce, publikovaná v respektabilním časopise Phys. Rev., se proto stane na delší dobu spolehlivou referencí, k níž bude možno vztahovat jak analogické teoretické výsledky tak i nová experimentální zjištění. Její rozšíření na další perovskity je nasnadě.

Simulace konkrétních doménových struktur představuje nový přístup k řešení řady otázek doménové problematiky. Získané výsledky potvrzují, že použité programy numerické simulace jsou schopny poskytnout cenné údaje o vzniku komplikovaných doménových struktur, které jsou porovnatelné se skutečným pozorováním. Při velmi rychlém vývoji simulačních metod lze očekávat, že tento přístup se stane důležitou a nepostradatelnou metodou studia reálných doménových struktur. Práci ing. Mártona získal náš výzkum nástroje, které mu umožní zapojit se včas a účinně do tohoto perspektivního trendu.

Výsledky předložené disertace byly získány v úzké spolupráci se školitelem Dr. Jiřím Hlinkou. Měl jsem možnost částečně sledovat vývoj této práce a mohu prohlásit, že podíl ing. Pavla Mártona představuje, zvláště v části týkající se simulací, samostatný a podstatný tvůrčí přínos. Aby však byly splněny všechny formální náležitosti doporučuji, aby se k tomuto bodu vyjádřili oba autoři v průběhu obhajoby.

Pokud bude při obhajobě čas, mohl by se případně ing. Márton vyjádřit k těmto otázkám:

1. Nenabité 90° stěny v tetragonální fázi jsou asymetrické. Je možné ověřit tuto vlastnost na Vašich výsledcích? Je asymetrie stěn podmíněna vyššími členy v rozvoji termodynamického potenciálu?

2. Soustava paralelních nenabitých 90° stěn v tetragonální fázi vykazuje značný průměrný nenulový dipolový moment orientovaný kolmo ke stěnám. Je tento dipolový moment zodpovědný za vznik antiparalelních domén, dekorujících feroelastické domény (viz např. obr. 1.4 na str. 11) ?

Závěr

Disertační práce ing. Pavla Mártona obsahuje podle mého názoru velmi kvalitní původní výsledky, které přesvědčivě dokazují mimořádné odborné schopnosti i erudici autora a splňují po obsahové i formální stránce požadavky stanovené Vysokoškolským zákonem. Proto ji bez váhání doporučuji k obhajobě.

