

Posudek

disertační práce Mgr. Vojtěcha Chlana
"Hyperfine Interactions in Ferrites with Spinel Structure".

Disertační práce Mgr. Vojtěcha Chlana je zaměřena na experimentální a teoretické studium manganatého a litného feritu a magnetitu. Jedná se tři magneticky významné kysličníky se spinelovou strukturou, které jsou na předních světových pracovištích zkoumány s neklesající intenzitou několik desetiletí. Důvodem je řada stále nevyjasněných jevů v jejich struktuře, zejména rozdělení kationtů v podmřížkách, a dále jejich význam pro praktické aplikace. Experimentální část práce je založena na měření jaderné magnetické rezonance. Teoretické výpočty vycházející z teorie DFT byly využity jako podpora pro interpretaci experimentálních výsledků. Disertace byla vypracována pod vedením školitele Prof. RNDr. Heleny Štěpánkové, CSc., na katedře Fyziky nízkých teplot MFF UK.

Práce je rozdělena do 10 kapitol. Po stručném úvodu následují kapitoly popisující současné znalosti o feritech, které jsou předmětem studia, tj. manganatém, litném a magnetitu., dále kapitoly uvádějící jadernou magnetickou rezonanci na magneticky uspořádaných materiálech a teoretické výpočty elektronové struktury s důrazem na výpočet parametrů hyperjemné struktury. Experimentální zařízení pro měření jaderné magnetické rezonance a metodika zpracování výsledků jsou uvedeny v páté kapitole. Následující kapitola popisuje výpočty elektronové struktury a hyperjemných polí použité v disertační práci. Výsledky získané na vzorcích manganatých feritů, litných feritů a magnetitu jsou postupně uváděny v kapitolách 7, 8 a 9. Jsou zde uvedena experimentální data z jaderné magnetické rezonance na izotopu ^{57}Fe a výsledky výpočtu hyperjemných polí. Každá z kapitol je ukončena souhrnem výsledků. Tyto dílčí závěry jsou shrnuty v desáté kapitole.

Následuje seznam literatury (90 položek), seznam publikací, kde je Mgr. Chlan spoluautorem a mají vztah k disertační práci (12 položek, vesměs v časopisech s vysokým impaktním faktorem, 4x Phys. Rev. B), dalších šest prací, u kterých není přímá návaznost na téma disertační práce.

Vzhledem k tomu, že významná část výsledků byla již publikována v recenzovaných časopisech, je dosti obtížné najít diskutabilní výsledky či interpretaci. Po formální stránce je práce zpracována na velmi dobré úrovni.

Dotazy a poznámky:

- 1) Chybějící podrobnější popis přípravy vzorků vkládaných do NMR spektrometru neumožňuje udělat si představu o korektnosti srovnání výsledků získaných jinými metodami, např. pomocí magnetických měření nebo neutronové difrakce (podkapitola 7.0.1.).
- 2) V podkapitole 7.1.2 věnované manganatým feritům je rozebíráno fitování experimentálních spekter s ohledem na kvantitativní analýzu inverze. Zde je mimo jiné diskutována optimální fitovaná funkce. Do jaké míry je důležité srovnávat jednoduché funkce (Gauss, Lorentzian), když je zřejmé, že Voightův profil již vzhledem k počtu možných volných parametrů by měl dávat lepší fit? Lze využít hodnoty intenzit získané fitem jednotlivých čar ke kvantitativní analýze nebo je nutné brát výsledky z fitu funkce, která popisuje spektrum v celém měřeném intervalu?

- 3) Je možné očekávat, že kvantitativní údaj o inverzi je ovlivněn charakterem vzorku a jeho historií, např. procesem stárnutí nebo velikostí povrchu? Existují data o difuzivitě kyslíku v těchto materiálech za pokojové teploty?

Předložená disertační práce je zaměřena na moderní problematiku v oblasti základního výzkumu, která má přímou návaznost na praktické aplikace. Cíle práce byly jasně určeny. K jejich dosažení autor využil vlastní experimentální data i teoretické výpočty, které mají vysokou vědeckou hodnotu. Získané výsledky pečlivě analyzoval a publikoval spolu s dalšími spoluautory v prestižních mezinárodních časopisech.

Závěr.

Disertační práce Mgr. Vojtěcha Chlana má vysokou úroveň. Autor prokázal znalost řešené problematiky, schopnost samostatné vědecké práce včetně publikace výsledků. Předkládaná disertace podle mého názoru splňuje všechna požadovaná a proto ji doporučuji k obhajobě.

V Brně dne 15. 4. 2010



Ing. Oldřich Schneeweiss, DrSc
Ústav fyziky materiálů AVČR, v.v.i.
Žižkova 22, 61662 Brno