

Vyjádření školitele k doktorskému studiu Mgr. Vojtěcha Chlana

Mgr. Vojtěch Chlan absolvoval doktorské studium na MFF UK, svou disertační práci *Hyperfine Interactions in Ferrites with Spinel Structure* vypracoval na Katedře fyziky nízkých teplot.

Disertační práce předkládá výsledky teoretického a experimentálního studia provedeného uchazečem na oxidech železa - feritech se spinelovou strukturou. K získání nových poznatků bylo souběžně využito pokročilých experimentálních technik NMR, poskytujících mikroskopický pohled na strukturní, elektronové a magnetické vlastnosti, a výpočtů elektronové struktury z prvních principů pomocí aktuálního programu Wien2k.

Doktorand rychle a s přehledem zvládl teoretické základy NMR/NQR spektroskopie v magneticky uspořádaných látkách i experimentální techniku a metodiku měření spekter a relaxací a analýzu dat. Zorientoval se v problematice oxidů železa včetně obtížné problematiky magnetitu, jehož vlastnostmi spojenými s Verweyovým strukturním přechodem se fyzikální veřejnost zabývá již mnoho desetiletí, aniž by zatím dospěla k jeho všestranně uspokojivému objasnění. Stejnou měrou je hodno ocenění, že doktorand zvládl výpočty elektronové struktury, a to až po výpočet hyperjemných parametrů, pro poměrně velké strukturní jednotky.

Doktorand byl po celou dobu studia iniciativním, nápaditým, spolehlivým a vytrvalým pracovníkem, schopným koordinovat experimentální práci se zmíněnými teoretickými činnostmi. Mimo to díky své vstřícné a přátelské povaze přispívá k dobré pracovní atmosféře v laboratoři a aktivně působí též jako konzultant několika studentských prací řešených v laboratoři NMR. Je spoluautorem několika původních prací: k tématu disertace se váže 9 původních článků plus dva odeslané, a 6 dalších publikovaných prací je mimo rámec předložených tezí.

Přínos získaných výsledků lze hodnotit ve dvou rovinách. Za prvé jsou to konkrétní získané poznatky (magnetická struktura Mn feritů, potvrzení preferenčních míst substitucí, experimentálně zjištěný vliv substitucí na hyperjemné interakce magnetitu, monitorování přesmyknutí struktury magnetitu indukované vnějším magnetickým polem pod Verweyovou teplotou aj.). Druhý pohled je obecnější a týká se prohloubení znalostí o hyperjemných interakcích v magnetických látkách a jejich konfrontace s *ab initio* výpočty. Experimentální hyperjemné parametry představují totiž přísné kritérium pro kontrolu správnosti *ab initio* výpočtů. Jedná se o to, že *ab initio* modelové výpočty elektronové struktury postihují velikosti magnetických hyperjemných polí na jádrech magnetických iontů zatím poměrně hrubě, a donedávna byly konstruovány spíše jen empirické a semiempirické přístupy, založené na experimentálních datech. Doktorand přispěl k formulaci vhodných aproximací založených na výsledcích *ab initio* výpočtů a zobecněních dosavadních experimentálních dat, které poskytují předpovědi hyperjemných parametrů v rámci systému magnetických oxidů. A dále, jeho nápadem je využití výpočtem určených anizotropií hyperjemné magnetické interakce pro přiřazení experimentálních čar NMR jednotlivým magneticky neekvivalentním krystalovým pozicím v dané látce.

Celkově hodnotím aktivitu Mgr. V. Chlana v rámci doktorandského studia velmi kladně. Doktorand bezesporu prokázal schopnost samostatné vědecké práce. Získané výsledky byly prezentovány na mezinárodních konferencích a v zahraničních odborných časopisech. Doporučuji proto, aby mu byl po úspěšné obhajobě doktorské disertační práce udělen titul PhD.

V Praze 12.4.2010

Prof. RNDr. Helena Štěpánková, CSc.