

Posudek disertační práce **Mgr. Karly Fejfarové: Krystalová struktura anorganických fosforečnanů.**

Hlavním cílem disertační práce bylo vyřešení krystalových struktur anorganických fosforečnanů a nalezení korelací strukturních parametrů u daných strukturních typů.

Práce je psaná v anglickém jazyce, srozumitelně, bez většího množství překlepů či gramatických nedostatků. Autorka nejprve seznamuje se základy krystalografie teoretické i experimentální, v dalších kapitolách potom předkládá krystalové struktury anorganických fosforečnanů řazené do kapitol podle jednotlivých strukturních typů. Celkem bylo vyřešeno 10 krystalových struktur, z nichž plná polovina pocházela ze zdvojitých krystalů. Jistě se tedy nejednalo o rutinní rentgenostrukturní analýzu. Struktura nízkoteplotní fáze $\text{Fe}_2\text{P}_2\text{O}_7$ byla navíc popsána jako nesouměřitelně modulovaná. Vlastní vyhledání a popis strukturních motivů také není triviální záležitostí, zvláště pokud má být srozumitelný i ostatním. A to se autorce podařilo. Autorka po všech stránkách dokazuje, že se na svém školícím pracovišti dobře vyučila „rentgenářskému“ řemeslu.

Předkládaná práce je podložena řadou publikací. Trochu mě mrzí, že valná většina krystalových struktur byla publikována samostatně v *Acta Crystallographica Section E* a nikoliv po celých skupinách s obsáhlejší diskuzí, tak jak je tomu v jednotlivých kapitolách v předložené disertaci.

Závěrem mohu konstatovat, že předloženou práci doporučuji k obhajobě.

Z formálních nedostatků bych zmínil obr.24, který měl být otočen o 180° , aby se dal porovnat s dalšími strukturami NASICONového typu (obr. 18 a 20). V tabulce 6. vzdálenost Ti1-Mn1 bude meziatomovou vzdáleností, nikoliv vazebnou, jak je uvedeno v záhlaví tabulky. V legendě obr. 37 je Yb zaměněno za Tb. Je také škoda, že autorka nezobrazuje u isostrukturních látek stejné motivy asymetrických částí elementárních buněk, to by jistě zvýšilo vypovídací hodnotu těchto obrázků. V některých tabulkách krystalografických dat se měly vypustit identické mřížkové parametry či pravé úhly. V exempláři, který jsem měl k dispozici, následuje stranu 103 černobílá verze strany 70. Nicméně všechny tyto formální nedostatky předkládané práce jsou nepodstatné a výrazně nesnižují kvalitu práce.

Dotazy k obhajobě:

- Z textu není uvedeno jak dopadly pokusy o upřesnění $\text{Mn}_{0,5}\text{Ti}_2(\text{PO}_4)_3$ a $\text{Co}_{0,5}\text{Ti}_2(\text{PO}_4)_3$ v prostorové grupě $R-3c$, respektive $R-3$. Jak vychází obsazovací faktory Mn a Co pro tyto grupy?
- Zajímalo by mne zda byly při studiu $\text{Na}_x\text{Fe}_2(\text{PO}_4)_3$ pořízeny i práškové difraktogramy? Pokud ano, daří se identifikovat jednotlivé fáze, daří se je připravit čisté nebo vznikají tuhé roztoky? Dají se tyto fáze vůbec pomocí práškových záznamů identifikovat?
- Na straně 81 píšete, že se u „disorderované“ molekuly vody nepodařilo nalézt vodíky a tak zůstává její role v systému vodíkových vazeb ve struktuře neznámá. Nedají se pozice těchto vodíků předpovědět z analýzy okolí těchto molekul? Mám na mysli, pomocí vzdáleností a úhlů k nejbližším potenciálním akceptorům vodíkových vazeb.
- Na straně 90 je uvedeno, že triklinická struktura $\text{Ln}(\text{HP}_2\text{O}_7)\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ není pouze mírně zdeformovaná struktura orthorombická, ale že prostorové uspořádání je rozdílné. Na obrázku 45 (str. 91) je potom elementární buňka zástupce orthorombické skupiny ($\text{La}(\text{HP}_2\text{O}_7)\cdot 3\text{H}_2\text{O}$), která mi na první pohled připadá identická s buňkou triklinického zástupce ($\text{Y}(\text{HP}_2\text{O}_7)\cdot 3\text{H}_2\text{O}$); Figure 3 na straně i81. Jak tomu mám rozumět?