

Oponentský posudek disertační práce

Mgr. Rudolf Sýkora: Relativistic theory of electron transport in magnetic layers

Práce vedle krátkého úvodu s popisem motivace obsahuje tři hlavní celky: teorii, ilustrativní příklady a dodatky. V části I (*Theory*) disertant podrobně probírá použité teoretické prostředky, konkrétně teorii funkcionálu hustoty, zahrnutí relativistických efektů do výpočtů elektronové struktury, metodu LMTO pro výpočet elektronové struktury a konečně teorii přenosu elektronů v pevných látkách. Těžiště práce spočívá v části II (*Illustrative systems*), kde autor uvádí výsledky výpočtů pro dvě hlavní třídy multivrstev: pro kovové multivrstvy a pro multivrstvy s tunelovací bariérou. Z kovových vrstev jsou studovány multivrstvy na bázi struktur fcc(001) a fcc(111) a složené z rovin obsazených atomy Co, Cu a Ni. Multivrstvy s tunelovací bariérou jsou typu Fe/MgO/Ag a Fe/GaAs/Ag. Některé z použitých matematických prostředků (*Linear response, Note on the Bloch theorem, Dirac particle in a spherical potential, Spherical harmonics a Note on matrix signatures*) jsou popsány v dodatcích. S výjimkou posledního dodatku jde o celkem známé záležitosti, uvedeny jsou patrně pro pohodlí čtenáře.

Při prvním pohledu práce vypadá nevyváženě, neboť referativní části je věnován prostor téměř dvakrát větší než prezentaci vlastních výsledků. Při podrobnější četbě se ale ukazuje, že je to v pořádku, protože autor velmi pečlivě probírá všechny teoretické metody a hodnotí je s kritickým nadhledem. Část věnovaná výsledkům je napsána velmi zhuštěným stylem, i když reprezentuje velký objem numerických výpočtů a důležité fyzikální jevy jsou řádně diskutovány.

Byl bych rád, kdyby disertant v případné diskusi mohl vysvětlit:

- jaká je správná hodnota Bohrova magnetonu v Rydbergových jednotkách, v práci je uvedena hodnota $\sqrt{2}$, ale často se uvádí i hodnota $\sqrt{2}/c$,
- nomenklaturu multivrstev použitou na str. 79-84, např. co znamená “n[2-6Co 5-8Cu] sharp“.

Za hlavní vědecký výsledek práce považuji objasnění vlivu spin-orbitální interakce na konduktanci multivrstev a to na základě ab initio výpočtů. Důležitost těchto výsledků je dána tím, že ačkoliv je snadné si představit různá pravidla pro chování konduktancí (např. že pro těžké prvky vliv spin-orbitální interakce bude větší než pro lehké), tyto odhady nemohou nahradit skutečný kvantitativní popis založený na výpočtech z prvních principů, které navíc přinesly některé méně očekávané výsledky, např. spojené se spolupůsobením neuspořádanosti a spin-orbitální vazby.

Práce je napsána logicky, stručně, jasným a srozumitelným způsobem a je velmi pečlivě zpracována. Práce je napsána v anglickém jazyce a to na mimořádně dobré úrovni. Chyby a překlepy jsem v textu nenašel. Část výsledků je již přijata k publikaci. Autor zcela jasně prokázal, že se samostatně orientuje v teorii elektronové struktury pevných látek a nanostruktur i v praktických výpočtech a dále v rozsáhlém oboru teorie magnetických a transportních vlastností pevných látek. Tvůrčím způsobem přispěl k teoretickému pochopení transportu elektronů ve vrstevnatých nanostrukturách. Získané výsledky jsou v dobrém souhlasu s experimentálními daty a vhodně rozšiřují poznatky známé z modelových úvah. Řešené téma je velmi aktuální, použité metody jsou vhodně zvolené a předložená práce

přispívá k dalšímu rozvoji vědního oboru. Disertant mimo jakoukoliv pochybnost prokázal své schopnosti k tvůrčí vědecké práci.

Na základě uvedených skutečností doporučuji (ve smyslu § 47 zákona č. 111/1998 Sb. v platném znění) předloženou disertační práci k obhajobě a po úspěšném obhájení doporučuji, aby uchazeči byla udělena hodnost PhD.

V Praze 10.8.2012

RNDr. Václav Drchal, CSc
Fyzikální ústav AV ČR
Na Slovance 2
182 21 Praha 8