

Posudek vedoucího diplomové práce

Název práce: Teoretický popis otráveného terče při reaktivním rozprašování feromagnetických kovů pod a nad Curieovou teplotou

Autor práce: Tereza Lerchová

Vedoucí práce: doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.

Pracoviště: Katedra fyziky, Fakulta aplikovaných věd, Západočeská univerzita

Jde o teoretickou práci popisující oxidaci kovových povrchů, motivovanou skutečností že v rámci výzkumné činnosti KFY dochází k oxidaci (otravování) kovových terčů a je přínosné znát charakteristiky povrchů terčů které jsou částečně otrávené. V minulosti byly podobné výpočty provedeny pro 18 částečně zoxidovaných nemagnetických kovů, které byly na základě jejich výsledků rozděleny do několika skupin (homogenní suboxid, heterogenní směs oxidu a kovu, závislost této preference na stupni oxidace, etc.). Přínosem práce je provedení obdobných - ale kvůli magnetizaci o stupeň náročnějších - výpočtů pro feromagnetické kovy Fe, Co, Ni v jejich feromagnetickém stavu. To samo o sobě stačilo pro získání výsledků v objemu odpovídajícímu diplomové práci. (Výpočty pro paramagnetický stav nad T_C byly prováděny také, ale zatím bez výsledků stojících za zveřejnění.)

Práce je cenná v následujících ohledech

- (i) Jde o samostatnou práci, o simulace které by jinak vůbec nebyly provedeny (nikoliv o přihlížení / pomoc tak jako tak probíhajícímu projektu vedoucího nebo doktoranda).
- (ii) Metodologická kapitola nepředstavuje jen popis metodologie vyvinuté někým jiným, ale obsahuje vlastní výsledky v podobě nalezení vhodných parametrů simulace specifických pro feromagnetické kovy, jejichž teoretické studium je v rámci KFY novinkou.
- (iii) Jádrem práce je ab-initio výpočet energií pro stovky částečně zoxidovaných povrchů. Nejnižší energie jsou jednak cenné samy o sobě (např. vstup pro modelování rozprašování), jednak tím že víme jakým konfiguracím kyslíkových atomů odpovídají (homogenní suboxid, představující varování že povrch může mít jiné vlastnosti než jaké by odpovídaly příslušnému váženému průměru oxidu a kovu).
- (iv) Je hezké (a je potvrzením správnosti) že výsledky pro Fe, Co, Ni dobře zapadají do závislosti tvořených výše zmíněnými předchozími výpočty pro 18 dalších kovů.

Autorka v průběhu práce zvládla základní funkce simulačního programu PWSCF, přípravu vstupních a zpracování výstupních souborů, provedla popsané simulace a zpracovala všechny jejich výsledky. Prokázala schopnost pracovat samostatně, zodpovědně a pečlivě. Na druhé straně text samotné práce vznikal na poslední chvíli, jeho první verze obsahovala více chyb než u některých jiných mnou vedených prací. Práci doporučuji k obhajobě. I přes uvedenou výhradu navrhuji klasifikaci výborně.

V Plzni 12.6.2020

doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.

