

## Oponentský posudek doktorské disertační práce pana Ing. Petra Řeháka

### Prvoprincipiální analýza stability krystalů pevných látek

Disertační práce pana Ing. Petra Řeháka je zaměřená na teoretické studium stability vybraných fcc kovů (Al, Ir, Pt, Au) a diamantu při izotropním (hydrostatickém) tahovém zatěžování. Potřebné výpočty elektronové struktury byly provedeny z prvních principů za použití programu ABINIT.

Práce má 67 stran a skládá se z úvodu, popisu elastické a dynamické stability a charakterizace použitých metod (zde je přínosná část 4.4 o nejistotách výsledků získaných z ab initio výpočtů), diskuse výsledků a závěru, kde jsou stručně shrnuty dosažené výsledky. Připojen je dále seznam symbolů a zkratk a bibliografie čítající 117 položek. Teze práce mají 27 stran a kromě stručného obsahu práce zahrnují publikace disertanta a jeho životopis.

Disertant se nejdříve zabývá studiem stability krystalové mříže při makroskopickém hydrostatickém tahovém zatěžování, stanovuje elastické koeficienty a analyzuje příslušné podmínky stability v závislosti na velikosti deformace. Porovnává také elastické koeficienty stanovené podle různých definic a uvádí jejich vzájemné vztahy. Z rozboru podmínek stability vyplývá, že při rostoucí hydrostatické tahové deformaci u Al, Pt a Au je nejprve porušena podmínka stability určená trigonálním smykovým modulem (tedy ještě před dosažením maximální hodnoty napětí), zatímco Ir a diamant jsou stabilní až do hodnoty dosažení maximálního napětí.

Za hlavní přínos práce ale považuji analýzu stability deformovaných struktur na základě fononových spekter, která byla počítána podél deformační dráhy v každém studovaném materiálu, a nalezení první fononové nestability (tedy výskytu první imaginární fononové frekvence), která odpovídá dosažení strukturní nestability a teoretické pevnosti pro studovaný druh zatěžování. Z tohoto hlediska je práce pionýrská, neboť pokud je mi známo, podobné studie byly prozatím provedeny pouze pro jednoosou deformaci hliníku a křemíku; pro izotropní zatěžování je tato práce první svého druhu (s výjimkou diplomové práce disertanta obhájené v r. 2009). Je třeba poznamenat, že analýza fononových spekter podél deformační dráhy je nutnou a postačující podmínkou pro posouzení stability deformovaných struktur a nalezení teoretické pevnosti pro daný druh zatěžování. Výpočet fononových spekter je však poměrně náročný a obvykle nebývá při studiích tohoto typu prováděn. Ukázalo se, že největší snížení teoretické pevnosti v důsledku existence měkkých fononových modů nastává u Ir, zatímco jediný diamant má fononové spektrum bez imaginárních frekvencí až do maximální pevnosti. Disertant pak podrobněji studoval ty strukturní změny, které odpovídají měkkým fononovým módům u Al, Pt, Au a Ir, a potvrdil pokles energie při tomto typu strukturních transformací.

K práci mám následující otázky a připomínky:

1. Co bylo motivací pro výběr studovaných materiálů, proč byly vybrány právě Al, Pt, Au, Ir a diamant?
2. Proč nebyla studována také izotropní deformace v tlaku? Nynější experimentální zařízení dovolují dosáhnout tlaku až 120 GPa, a zde by bylo možné porovnání výsledků teoretických výpočtů s experimentem.

3. V důsledku deformace by mohlo dojít také k fázové transformaci – určitá struktura by se mohla ukázat energiově výhodnější než fcc, jak to disertant také ukazuje při analýze posuvů odpovídajících měkkým fononovým modům. Bylo by možná zajímavé vidět, jakým strukturám by odpovídala minima nejspodnějších křivek na obr. 5.12a a 5.13a nebo minimum na křivce 5.13b, případně zda by při tak vysoké izotropní tahové deformaci nebyla nějaká jiná krystalová struktura energiově výhodnější.

Uvítal bych, kdyby se k těmto připomínkám mohl disertant vyjádřit.

Dále bych doporučoval používat v českém textu pokud možno české termíny a vyhnout se tvarům jako např. „horního limitu“ (str. 6), „utilita Anaddb“ (str. 37 a další) a „koresponduje i s vyšetřovanými“ (str. 46). Rovněž spojení „programový kód“ (str. 7, 47) není asi to úplně nejlepší. Tato připomínka platí v odpovídající míře i pro teze práce. Zmíněné poznámky však nikterak nesnižují vědeckou hodnotu disertační práce.

Z výše uvedeného je zřejmé, že předkládanou disertační práci pokládám ze velmi kvalitní.

Závěrem konstatuji, že pan Ing. Petr Řehák prokázal svou prací naprosto jednoznačně, že se samostatně dovede orientovat v rozsáhlém oboru teorie kondenzovaného stavu i v moderních teoretických přístupech a tvůrčím způsobem zde dokáže přispět. Práce je zpracována na velmi dobré úrovni, přináší řadu nových poznatků a jasně prokazuje předpoklady autora k další samostatné tvořivé vědecké práci. Disertace v plném rozsahu splňuje požadavky kladené na tento druh prací v příslušných předpisech. Proto ji doporučuji k veřejné obhajobě a po jejím úspěšném obhájení **doporučuji**, aby panu Ing. Petru Řehákovi byla udělena vědecká hodnost **doktor (PhD)**.

V Brně dne 13.9. 2013



Prof. RNDr. Mojmir Šob, DrSc.  
Ústav chemie  
Přírodovědecká fakulta  
Masarykova univerzita  
Kotlářská 2, 611 37 Brno