

Posudek disertační práce **Prvoprincipiální analýza stability krystalů pevných látek**

doktoranda **Ing. Petra Řeháka**, Ústav fyzikálního inženýrství, FSI-VUT Brno

Práce se zabývá posouzením stability vybraných fcc krystalů (diamantu, Al, Ir, Pt a Au) za podmínek izotropního tahového zatížení s použitím výpočetních metod.

V úvodu práce je podána stručná rešerše shrnující základní poznatky na poli studia ideální pevnosti krystalických materiálů pomocí výpočetních metod, zejména *ab initio*. Druhá kapitola se zabývá teorií elastické stability materiálů vzhledem k makroskopické deformaci a v několika užívaných notacích odvozuje podmínky elastické stability pro speciální případ kubických krystalů deformovaných izotropním tahem. Třetí kapitola poskytuje rozbor dynamické (fononové) stability materiálů. Kapitola čtvrtá je úvodem do *ab initio* numerických výpočtů, které používají různý stupeň zjednodušení při řešení kvantově-mechanického popisu problému pomocí Schrödingerovy rovnice. Pátá kapitola shrnuje vlastní výsledky autora, tj. posouzení výše jmenovaných materiálů z hlediska elastické stability i z hlediska jejich dynamické stability. Výsledky jsou diskutovány pro jednotlivé materiály, dynamická (ne)stabilita předpovězená z fononových spekter je modelována a potvrzena atomistickými výpočty. Následuje závěr, soupis použité literatury a seznam často používaných symbolů a zkratk.

Po formální a grafické stránce je práce na velmi dobré úrovni. Obsahuje 67 stran textu s obrázky a 117 literárních odkazů. Po jazykové stránce nemám výhrady s výjimkou poměrně malého počtu formálních chyb.

Téma práce je aktuální. Koncept stanovení teoretické pevnosti materiálů pomocí výpočtů elastické stability je s ohledem na stále rostoucí možnosti výpočetních systémů dobře použitelný pro širokou třídu materiálů. Užitečnost *ab initio* výpočtů pro materiálové vědy se v poslední době podstatně rozšiřuje i doplněním o výpočty dynamické, tj. nejen při teplotě absolutní nuly. Práce přesvědčivě ukazuje, že je nutné zkoumat nejen splnění podmínek elastické stability, ale je třeba se zabývat zároveň i fononovou (dynamickou) stabilitou systémů, která u některých materiálů určuje jejich ideální pevnost. Oceňuji i pokus o rozbor nejistoty prvoprincipiálních výpočtů v závěru kap. 4.

Analýza elastické stability při izotropním tahovém zatěžování ukazuje, že u Al, Pt a Au vzniká nestabilita vymizením trigonálního smykového modulu, Ir a diamant jsou stabilní až do dosažení maxima napětí. Následná analýza dynamické stability a porovnání všech výsledků ukazují, že krátkovlnný typ nestability u Al těsně předchází elastické porušení a podobný případ nastává u Pt. K významné redukci stability při započtení dynamických módů dochází u Ir (snížení kritické deformace příslušné maximu napětí o 40%).

Disertant je spoluautorem osmi publikací, z nich u šesti je prvním autorem. Jde o dvě publikace v impaktovaném časopise, dvě publikace v mezinárodním recenzovaném časopise a čtyři příspěvky na konferencích. To také svědčí o aktuálnosti tematiky a dobré úrovni práce v mezinárodním měřítku.

Z hlediska obsahové stránky prosím doktoranda, aby se vyjádřil k následujícím bodům:

1. Posuzovaná disertační práce tematicky úzce navazuje na doktorandovu diplomovou práci (P. Řehák: Stabilita krystalů pevných látek z prvních principů, FSI VUT, Brno, 2009), která je citována v souvislosti s popisem vstupních souborů pro program Abinit (str. 30, citace [83]). Diplomová práce studovala výpočetními metodami *ab initio* objemovou i dynamickou stabilitu skupiny fcc materiálů (C, Al, Cu, Ir, Au) při izotropní tahové deformaci. Prosím o krátké vzájemné vymezení obou prací, a (protože tematika je podobná) o shrnutí přínosu výsledků disertační práce oproti práci diplomové.
2. Podobnou tematikou se zabývá ve své disertační práci H. Wang (Georgia Inst. Of Technology, 2010, dostupné např. na <https://smartech.gatech.edu/handle/1853/42747> jako pdf dokument wang_hao_201012_phd.pdf), který poměrně často cituje i výsledky skupiny z FSI-VUT Brno. Bylo by možné provést porovnání použitých postupů a dosažených výsledků v případě izotropně zatěženého zlata?

Měl jsem k dispozici také zkrácenou verzi tezí, která je vhodným výběrem podstatných částí disertační práce. Pokud je zde členění závazné (a přispělo by to i k přehlednosti), měly by se jako samostatný oddíl objevit Cíle práce, zde jsou uvedeny cíle jen jako krátký poslední odstavec Úvodu. Jako součást profesního životopisu postrádám číselné shrnutí publikační aktivity (i když kompletní seznam vlastních prací je součástí zkrácené verze tezí). V anglickém abstraktu místo „... access their dynamic stability“ má zřejmě být „... assess ...“.

Závěrem konstatuji, že předložená disertační práce prokazuje doktorandovu schopnost samostatného vědeckého myšlení a odpovídá obecně uznávaným požadavkům na udělení akademického titulu Ph.D. Práci proto doporučuji k obhajobě a po jejím úspěšném obhájení doporučuji udělení akademického titulu PhD.

V Brně, 26. září 2013



RNDr. Jiří Buršík, DSc.

Ústav fyziky materiálů AVČR, v.v.i.,
Žižkova 22, 61662 Brno
tel. 532290473
bursik@ipm.cz