

prof. Ing. Marcel Miglierini, DrSc.
Ústav jadrového a fyzikálneho inžinierstva
Fakulta elektrotechniky a informatiky
Slovenská technická univerzita v Bratislave
Ilkovičova 3
812 19 Bratislava
Slovensko

Oponentský posudok

na habilitačnú prácu RNDr. Vojtěcha Chlana, PhD.:
Nuclear magnetic resonance and density functional theory in solid state physics

Oponentský posudok na habilitačnú prácu RNDr. Vojtěcha Chlana, PhD. s názvom *Nuclear magnetic resonance and density functional theory in solid state physics* som vypracoval na základe žiadosti, ktorú mi poslal prodekan Matematicko-fyzikálnej fakulty Univerzity Karlovy prof. RNDr. Zdeněk Doležal, Dr. listom zo dňa 4.2.2021.

Z formálneho hľadiska je práca členená na tri kapitoly. Prvé dve poskytujú krátky prehľad o metódach použitého experimentálneho prístupu (NMR) a teoretických výpočtoch (DFT). Tretia časť práce predstavuje komentované poznámky k obsahu a dosiahnutým výsledkom, ktoré sú predmetom priložených monotematicky ladených vlastných pôvodných vedeckých prác habilitanta v celkovom počte 17 z obdobia rokov 2010-2019. V šiestich z nich je habilitant prvým autorom, a teda sa dá predpokladať, že jeho prínos k vzniku týchto publikácií bol dominantným. Niektoré z prác boli publikované v renomovaných vedeckých časopisoch, ktoré patria medzi špičku vo fyzikálnych vedách (napr. Phys. Rev. B, J. Appl. Phys., J. Magn. Magn. Mat., J. Phys. Chem. Solids či J. Phys. Condens. Matter). Keďže určite prešli dôkladným recenzentským konaním, považujem ich obsah za dostatočne overený.

Zámery a ciele habilitačnej práce sú vysoko aktuálne. Ako aj sám autor v úvode zdôrazňuje, hoci je NMR spektroskopia dobre etablovaná pri štúdiu štruktúry a dynamiky kvapalných látok, jej uplatnenie vo fyzike tuhých látok je ešte stále dosť obmedzené. Dôvodom je jednak experimentálna náročnosť, no aj komplikovanosť interpretácie získaných spektrálnych parametrov. Odstránenie tejto prekážky sa dá zabezpečiť dôslednou teoretickou analýzou vyšetovaných systémov pomocou výpočtových metód. Zdôvodnenie takéhoto prístupu je diskutované v habilitačnej práci, ktorá tiež uvádza viacero príkladov kombinovaných štúdií vykonaných na vybraných typoch magnetických aj nemagnetických systémoch. Komentované časti práce sú podložené odkazmi na 107 zdrojov použitej literatúry.

Predložená práca podľa mňa spĺňa požiadavky kladené na habilitačné práce. Musím tiež vyzdvihnúť dôkladnosť jej spracovania. Práca je napísaná kultivovanou angličtinou bez lexikálnych či gramatických chýb a preklepov s precíznym zalomením stránok a využitím 16 obrázkov, ktoré vhodne dokumentujú prezentovanú problematiku. Z formálneho hľadiska mám iba jeden komentár, ktorý je možno daný mojou nižšou znalosťou problematiky teoretických výpočtov štruktúr. Kvôli tomu teda neviem, prečo habilitant použil na str. 9 nemecký výraz „ansatz“, ktorý je kvôli svojej netradičnosti správne napísaný kurzívou.

K obsahovej stránke práce mám nasledujúce pripomienky, ktoré môžu tvoriť podklad pre vedeckú rozpravu k práci:

1. Hneď v Úvode na str. 1 autor konštatuje, že „... there are no other experimental methods with adequate resolution to which the NMR results could be compared.“. Už však o dve strany ďalej na str. 3 uvádza použitie Mössbauerovej spektroskopie (jej vybraných hyperjemných interakcií) ako vhodného nástroja na podporu prezentovaných výsledkov NMR meraní uvádzaných v habilitačnej práci. Keďže energetické rozlíšenie Mössbauerovej spektroskopie je jedno z najlepších ($\sim 10^{-13}$), rád by som, aby sa habilitant vyjadril k svojmu chápaniu vzťahu medzi týmito dvoma metódami.
2. Konštatovania na str. 26, týkajúce sa niektorých charakteristík mössbauerovských spektier, nepovažujem za úplne korektné. V prípade izoméneho posunu vstupujú do hry popri správne uvádzaných jadrových vlastnostiach (rozdielnosť veľkostí jadier v základom a vzbudenom stave) aj elektrónové vlastnosti príslušných rezonančných atómov nachádzajúcich sa v zdroji žiarenia a v absorbátore, ktoré sú reprezentované príslušnými hustotami elektrónov (vplyv chemického okolia). Taktiež vyjadrenia typu „induces up to eight“ a následne „but typically six spectral lines“ v súvislosti s možnými jadrovými prechodmi v magnetických materiáloch je v prípade ^{57}Fe zavádzajúce. S ohľadom na platnosť výberových pravidiel je takýchto prechodov maximálne šesť.
3. V záverečných poznámkach na str. 37 autor naznačuje možné smery rozvoja prezentovaného prístupu hlavne smerom k rozvoju metodiky výpočtov kryštalických systémov. V tejto súvislosti by ma zaujímalo, aké sú možnosti metódy DFT pri výpočte amorfných štruktúr.

Záver

Habilitačná práca RNDr. Vojtěcha Chlana, PhD. sumarizuje výsledky jeho dlhoročného rozsiahleho systematického výskumu v oblasti NMR v tuhej fáze a teoretického simulovania a výpočtov ich spektier. Priniesla celý rad pôvodných poznatkov, ktoré boli zverejnené v renomovaných karentovaných vedeckých časopisoch. Hodnotenie originality práce podľa výpisu zo systému Turnitin uvádza zhodu 20 %. Podrobnejší rozbor výpisu však potvrdzuje, že zhoda je len s článkami uchádzača a aj to len v zanedbateľnom rozsahu. Práca teda spĺňa všetky podmienky kladené príslušnými právnymi normami na kvalifikačné práce tohto druhu, a preto ju odporúčam ku obhajobe.

Po úspešnom obhájení habilitačnej práce odporúčam udeliť RNDr. Vojtěchovi Chlanovi, PhD. titul docent v odbore Fyzika – fyzika kondenzovaných látok.

V Bratislave, 12.02.2021



prof. Ing. Marcel Miglierini, DrSc.