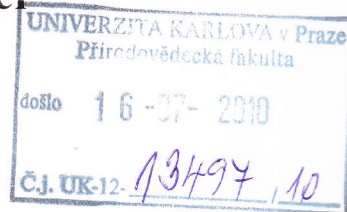


Posudek oponenta na disertační práci

Autor práce: Karla Fejfarová, UK Praha, 2010
Název práce: Crystal structure of inorganic phosphates
Oponent práce: Prof. RNDr. Zdirad Žák, CSc.



Předložená práce je poněkud netradičního charakteru. Především je psána v anglickém jazyce, a pokud mohu posoudit, v jazyce výborné úrovně, což není zcela obvyklé. Není také zcela běžné, aby práce z anorganické chemie nebyla prací „chemicky“ experimentální.

Jak již z názvu vyplývá, práce se týká řešení devíti krystalových struktur kovových fosforečnanů. Kromě struktur $TbH(P_2O_7) \cdot 4H_2O$ a $YHP_2O_7 \cdot 3H_2O$, které byla vyřešeny rutinními postupy, vyžadovalo řešení ostatních struktur tvůrčí přístup. Krystaly $M_{0.5}Ti_2(PO_4)_3$ ($M = Mn, Co$) a $LnHP_2O_7 \cdot 3H_2O$ ($Ln = Dy, Tb, Yb$) byly zdvojitě, struktura $\alpha-Fe_2P_2O_7$ byla nesouměřitelně modulovaná a pro řešení několika struktur byla zvolena poměrně nová metoda „charge flipping“. Všechny struktury byly úspěšně vyřešeny a zpřesněny na velmi nízké hodnoty R-faktorů.

Po formální stránce je práce zpracována velmi pečlivě. Obecný úvod podává kromě základních principů strukturní analýzy i problémy spojené s řešením struktur krystalů zdvojitých a struktur nesouměřitelných. Postrádám v něm však nástin principů řešení struktur metodou „charge flipping“, neboť se jedná o ne zcela obvyklý a relativně nový postup. Vlastní výsledky jsou uvedeny ve třech samostatných kapitolách, z nichž každá je uvedena stručným úvodem do problematiky. Práce je přehledná, prosta tiskových chyb a doplněna názornými obrázky. Vytkl bych však soustavnou nekonsistenci (vyjma struktury $\beta-Fe_2P_2O_7$) kódů symetrie v obrázcích a tabulkách.

Po věcné stránce není práci co vytknout, strukturní analýza představuje něco jako „konečnou diagnózu“ a nedává tedy velký prostor pro diskuse.

Přesto mám však řadu dotazů a poznámek (z nichž řada je formálních), které jsou uvedeny níže. Protože je práce psána v anglickém jazyce, vznáším tyto dotazy v angličtině a očekávám, že i diskuse během obhajoby bude vedena v témže jazyce.

p. 9, line 4, 5: what difference you mean? The interference can't be totally destructive. There wouldn't be any diffraction at all!

Fig. 1: is not particularly instructive

p. 10, line 5,6: generally, a^* is not a reciprocal to a etc.!

Fig. 2: not quite common orientation of axes

p. 36, line 15: Ti^{4+} etc. should be rather written as $Ti(IV)$ etc.

p. 41: How were the twinning matrices determined? What are the principles of the charge flipping procedure, why this method was used?

p. 43 and 45: The symmetry codes in the Fig.17 and Table 6 do not agree

Table 6: Giving bond lengths to 5 decimal places and angles to 4 makes no sense. Why do they differ from those given in the paper?

Fig. 17: 10 symmetry codes are listed but 11 used

p. 44: distances are shorter not smaller. Can't be the difference in the $Ti1-O2$ and $Ti2-O4$ bond lengths attributed (at least in part) to the competition between Ti and Mn for O atoms?

Fig. 19: There are two atoms $O1$ and $O2$. The symmetry codes in figure and Table 8 do not agree

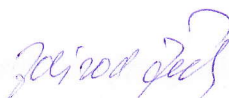
Fig. 22: The relationships are not quite conclusive

p. 52: How was the actual formula determined? What is the percentage of Fe^{3+} ? Shouldn't be the formula written rather as $Na_{3,215}Fe(II)_{2-x}Fe(III)_x(PO_4)_3$, $x = ?$ Formula $Na_{3,215}Fe_2(PO_4)_3$ is not electroneutral!

Fig. 23- Table 11, Fig. 38- Table 19, Fig. 41- Table 23: The symmetry codes do not agree!

Závěrem konstatuji, že studentka prokázala tvůrčí schopnosti a předložená práce splňuje kritéria kladená na doktorskou disertační práci v oboru anorganická chemie a doporučuji ji k obhajobě.

V Brně dne 14.července 2010



Prof.Dr. Zdirad Žák, CSc