

Posudek pojednání k tématu disertační práce pana Ing. Pavla Papeže

## THEORETICAL STUDY OF MAGNETIC STATES IN ALLOYS WITH DIFFERENT LEVELS OF ORDERING

Práce se zabývá studiem magnetismu ve slitině s vysokou entropií CoCrNi a v intermetalické fázi YMn<sub>2</sub> za pomoci ab initio metod.

**Struktura pojednání** je možná poněkud netradiční, ale dostatečně přehledná. Po obecném úvodu se autor krátce věnuje uspořádání ve slitinách, poté přechází k popisu teorie funkcionálu hustoty (DFT), magnetismu a jeho zahrnutí do DFT a implementaci v použitém programovém kódu VASP. Následně se zmíní o termodynamice a krátce se navrátí k uspořádání atomů v souvislosti s metodami modelování struktur. Poté následují dvě kapitoly (každá věnovaná jedné slitině) obsahující stručný úvod, užitou metodologii a výsledky. Nechybí plán dalších cílů disertační práce a přehled již publikovaných výsledků. Pojednání je psáno v angličtině, čímž se jeho autor vyhnul nutnosti překladu některých odborných termínů, pro které nejsou ustálené české ekvivalenty. Po jazykové stránce lze práci vytknout řadu drobnějších chyb, které (až na výjimky) nesnižují srozumitelnost textu.

Lze konstatovat, že práce se zabývá **aktuální problematikou a použité metody jsou adekvátní** stanoveným cílům. To ostatně dokládají i publikace, na jejichž vzniku se Ing. Papež podílel. Dosud dosažené výsledky slibují kvalitní disertační práci a mé **hodnocení pojednání je kladné.**

K pojednání mám následující připomínky, které by měl autor vzít v úvahu při tvorbě disertační práce:  
str. 5: V rovnicích (3.1) a (3.2) je jiný symbol pro vlnovou funkci bez uvedení důvodu; Dle typografických zvyklostí by v rovnicích (3.3) a (3.4) měly být diferenciály dr ve třetí mocnině.

Str. 12: V obr. 3 je chyba v zobrazení Typu I; Algoritmy „RMM-DIIS“ a „Davidson“ jsou zmíněny, leč nedefinovány, a ponechány bez adekvátního odkazu na literaturu.

Str14. Proč je v rovnici (3.32) namísto tlaku p použita „práce na objem  $W_V$ “? Je nutné vytvářet zde vlastní fyzikální definice? Proč by jednotkou energie měl být J/m<sup>3</sup>? (mimochodem, jednotky se nesází italikou)

Str15: V angličtině se používá v rovnicích typu (3.39) pro násobení křížek namísto tečky, aby se nepletlo s desetinnou tečkou. Také chci upozornit na nesystematičnost v užívání značení parametru Warren-Cowley, („Warren Cowley“ v popisu obr. 3.5) W-C , alfa\_ij

Str18: text ve spodním odstavci je opravdu obtížně srozumitelný

Str 19: Některé z hodnot v Tabulce 5.2 jsou uvedené na neadekvátně mnoho platných číslic. Např. rovnovážný objem je uveden na 6 platných číslic (tisíciny Å<sup>3</sup>), ale z obr. 5.2. je jasně patrné, že nejistota určení polohy minima bude řádově v desetiny až jednotky Å<sup>3</sup>. Také objemový modul pružnosti by měl být adekvátně zaokrouhlený.

Co bylo relaxováno v krystalech čistých prvků, jak se uvádí na konci str.19?