

Studium tepelných transformací šťavelanů metodou rentgenové práškové difrakce

Autor: Bc. Vítězslav Heger
Obor: Nanotechnologie
Vedoucí práce: Mgr. Vlastimil Vrba, Ph.D.

Zaměření práce

- Přínos práce :** Diplomová práce se zaměřuje na vyhodnocení experimentálních dat rentgenové práškové difrakce v rámci studia vybraných tepelných transformací vzorků šťavelanů. Přínosem práce je velmi podrobná kvantitativní analýza difrakčních záznamů za použití sady (pod)modelů, díky které lze nejen určit vývoj fázového složení a dalších fyzikálních parametrů, ale také zhodnotit vliv nedokonalostí modelů a případných korelací fitovaných parametrů na dosažené výsledky.
- Aktuálnost práce :** Jednoduché a bimetalové šťavelany vybraných kovů jsou syntetizovány a studovány na Katedře experimentální fyziky jako prekurzory pro přípravu aplikačně potenciálních materiálů. In-situ experimenty rentgenové práškové difrakce v tomto ohledu poskytují velmi užitečné informace a jsou aktuálně často využívaným prostředkem na pracovišti.
- Typ práce :** práce zaměřená na analýzu experimentálních dat
Deklarace cílů : jednoznačné | splnitelné

Formální hodnocení

- Formální úroveň práce:** Diplomová práce je rozdělena do celkem čtyř kapitol. První kapitola obsahuje teoretický úvod ke krystalové struktuře a rentgenové práškové difrakci. Druhá kapitola shrnuje poznatky o vlastnostech a tepelných transformacích vybraných šťavelanů a produktech jejich dekompozice. Třetí kapitola poskytuje informace o provedených experimentech a jejich analýze. Čtvrtá kapitola obsahuje výsledky a diskuzi. Po formální stránce je práce na velmi dobré úrovni.
- Grafická úroveň práce:** Obrázky, grafy a tabulky v práci jsou přehledné a kvalitně zpracované. S ohledem na velký počet datových výstupů byla zvolena rozumná míra výsledků prezentovaných v hlavní části práce. Ostatní výsledky jsou uvedeny v pětistránkové příloze.
- Citace:** přiměřené | odpovídající | správně citováno
Plagiátorství: bez podezření
Rozsah práce: přiměřený

Odborné hodnocení

- Obsah práce odpovídá tématu:** ano
Teoretická část: přiměřený rozsah | relevantní
Originalita: výrazná

Struktura odborné části:	V hlavní kapitole jsou prezentovány výsledky analýzy čtyř různých experimentů, lišících se použitým vzorkem a reakční atmosférou. Pro každý experiment je systematicky uveden nejdříve kvalitativní popis difrakčních záznamů, následuje podrobný popis použitého modelu fitování a poté jsou popsány výsledky kvantitativní analýzy. Ve specifických podkapitolách jsou potom prezentovány hlavní výsledky srovnání jednotlivých modelů a vlivů vybraných parametrů ve zvolených datových oblastech. Odbornou část práce hodnotím jako vhodně strukturovanou.
Přehlednost prezentace dat:	Ke kvalitativnímu popisu transformací autor vhodně dokládá naměřené difrakční záznamy. Popis modelů fitace je doplněn přehlednými schémata. Výsledky Rietveldovy analýzy jsou doprovázeny grafy s vývojem fitovaných parametrů a nafitovanými experimentálními daty.
Úroveň vyhodnocení dat:	Analyzované experimenty čítají řádově stovky difrakčních záznamů. K analýze byla použita semi-automatická procedura, nicméně pečlivé vyhodnocení a srovnání výsledků různých modelů je velmi náročný proces. Fázové transformace byly vyhodnoceny prakticky v celém rozsahu vznikajících produktů, srovnání modelů pak bylo provedeno na specifických oblastech (např. stabilní vs. dynamicky se měnící fázové složení).
Úroveň interpretace dat a diskuze:	Výsledky Rietveldovy analýzy, včetně vývoje fázového složení, jsou v práci podrobně diskutovány. Interpretace výsledků je dále řádně srovnávána s dostupnými informacemi z vědeckých studií.

Celkový komentář

Diplomovou práci celkově hodnotím jako kvalitní. Student dokázal nastudovat a následně aplikovat velké množství poznatků v rámci složité problematiky analýzy difrakčních experimentů. Výsledky dosažené v této práci budou velmi přínosné pro následné analýzy dalších in-situ experimentů.

Odborné a formální připomínky

- S ohledem na relativně vysokou míru převzetí teoretického postupu z citovaného zdroje [1] v první kapitole by možná bylo vhodnější explicitně uvést na začátku této kapitoly, že „teoretická část podrobně sleduje popis v textu [1]“.
- Vliv teplotních faktorů v sekci 4.2.5 na straně 35 je zčásti komentován v textu a zčásti prezentován ve formě tabulky. Srovnání by bylo pro čtenáře jasnější, kdyby v obou případech byla zvolena tabulková forma.
- Hodnoty a nejistoty parametrů v Tab. 5 na straně 35 nejsou správně zaokrouhlené.

Otázky k diskuzi

Bez otázek

Závěrečné hodnocení

Splňuje požadavky na práci: ano
Splňuje deklarované cíle práce: ano
Doporučuji k obhajobě: ano
Navržené hodnocení: A

V Olomouci dne 19. 8. 2021

.....
 Mgr. Vlastimil Vrba, Ph.D.
 Katedra experimentální fyziky
 Univerzita Palackého v Olomouci