

Oponentský posudek diplomové práce

Studium tepelných transformací šťavelanů metodou rentgenové práškové difrakce

Autor: Bc. Vítězslav Heger
Stud. program: Nanotechnologie
Vedoucí práce: Mgr. Vlastimil Vrba, Ph.D.
Oponent: Doc. RNDr. Libor Machala, Ph.D.

Zaměření práce

Přínos práce: Předložená diplomová práce si kladla za cíl studovat mechanismy tepelných transformací šťavelanu železnatého a šťavelanu měďnatého pomocí in-situ vysokoteplotní RTG práškové difrakce. Přínosem je možnost získávat poměrně jednoduchou syntetickou metodou nanočástice oxidů železa nebo mědi.

Aktuálnost práce: Práci považuji za aktuální, jelikož zapadá do výzkumného směru na Katedře experimentální fyziky.

Typ práce: řešeršní **experimentální** teoretická simulační výuková

Deklarace cílů: jednoznačné nesrozumitelné | **splnitelné** nesplnitelné

Formální hodnocení

Formální úroveň práce: Po formální stránce je diplomová práce na vysoké úrovni. Členění kapitol je pro čtenáře logické a přehledné. V práci se objevuje jen několik málo překlepů. Konkrétní seznam překlepů či nesrovnalostí je uveden v posudku níže. Typografie veličin, jednotek a chemických vzorců je v pořádku.

Grafická úroveň práce: Grafická úroveň práce je vysoká. Experimentální data jsou prezentována obrázky, grafy a tabulkami se srozumitelným a odborně správným popisem.

Citace: **přiměřené** | **odpovídající**
správně citováno nesprávně citováno

Plagiátorství: **bez podezření** s podezřením potvrzené

Rozsah práce: nedostatečný malý **přiměřený** nadprůměrný | **vyhovující**
nevyhovující

Odborné hodnocení

Obsah práce odpovídá tématu: ano ne

Teoretická část: **přiměřený rozsah** malý rozsah | **relevantní** nedostatečný

Originalita: malá průměrná **výrazná**

Struktura odborné části: **vhodně strukturovaná** nevhodná struktura chaotická

Přehlednost prezentace dat: Naměřená data jsou přehledně prezentována ve formě tabulek, grafů a obrázků, zejména záznamů z RTG práškové difrakce.

Úroveň vyhodnocení dat: Experimentální data jsou důkladně analyzována a podpořena v úvodu prezentovanou teorií. Naměřené číselné hodnoty jsou vždy uváděny s nejistotou měření.

Úroveň interpretace a diskuze: Experimentální výsledky jsou dobře a srozumitelně interpretovány a diskutovány.

Celkový komentář

Celkově má diplomová práce vysokou odbornou i formální úroveň. Úvodní část shrnuje teoretický základ metody RTG práškové difrakce včetně metodiky vyhodnocení dat a provádění Rietveldovy analýzy. Domnívám se, že může dobře posloužit dalším studentům, kteří budou využívat RTG práškovou difrakci v rámci svých laboratorních praxí nebo při řešení kvalifikačních prací. Kapitoly výsledkové části jsou přehledně strukturovány na podkapitoly, takže se čtenář v množství prezentovaných dat neztratí. Naměřené výsledky jsou názorně prezentovány velkým počtem tabulek, grafů, obrázků, schémat či fotografií. Lze vyzdvihnout, že popisy grafů a obrázků jsou maximálně informativní, takže čtenář nemusí při zběžném prolistování práce informace dohledávat v textu.

Odborné a formální připomínky

- Str. 5 (poděkování) – správně má být „drahocenné“
- Str. 10 – správně má být „Boltzmannovou“

- Str. 11 – ve vztahu (2) by se pro jistotu měly použít ve jmenovateli závorky upozorňující na přednost vektorového součinu před skalárním součinem.
- Str. 18 – správně má být „...tak v dynamických atmosférách, při **kterých** je i možné určit produkty...”
- Str. 20 – v chemické rovnici (33) má být na levé straně $3/2O_2$
- Str. 21, obrázek 13 – v popisu struktury má být „wüstit“
- Str. 22 – správně má být „Fázový diagram je **možné** vidět na obrázku 14.“
- Str. 23 – spektrální čára K_β by se zřejmě měla označovat s dolním indexem beta.

Otázky k diskuzi

1. Ve vztahu (23) na str. 16 pro výkon difraktovaného záření se objevuje výraz závisující na difrakčním úhlu θ (tzv. Lorentzův-polarizační faktor). Bylo by možné v rámci obhajoby prezentovat, jak uvedená závislost vypadá graficky?
2. V kap. 3.1. na str. 23 se uvádí, že se k experimentům použily dvě šarže dihydrátu šťavelanu železnatého (komerční a laboratorně připravená). Nebylo vhodnější použít pro všechny experimenty jen jednu šarži, aby se vyloučil vliv vlastností prekursoru na produkty transformací?
3. V textu práce se vícekrát objevuje anglické slovo „peak“. Nebylo by korektnější používat nějaký český ekvivalent (např. difrakční maximum, difrakční čára)?
4. Z výsledků je zřejmé, že ke změnám fázového složení docházelo poměrně skokově. Neuvažoval jste zaměřit se na teploty, při kterých ke změnám ve složení dochází, a navrhnout experimenty s pomalejším nárůstem teploty v okolí dané teploty, popř. izotermický experiment?
5. Nebyly alespoň vybrané vzorky po transformaci charakterizovány dalšími experimentálními technikami, jako je např. ^{57}Fe Mössbauerova spektroskopie, elektronová mikroskopie atd.?
6. Nebyl u vybraných záznamů z RTG difrakce proveden výpočet střední velikosti koherentních domén? Jak zhruba velké částice (krystaly) tenoritu bezprostředně po transformaci šťavelanu vznikají?

Závěrečné hodnocení

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

V Olomouci dne 17.8.2021

.....
 Doc. RNDr. Libor Machala, Ph.D.
 Katedra experimentální fyziky
 PŘF UP Olomouc