



Posudek oponenta habilitační práce

Masarykova univerzita	Přírodovědecká
Fakulta	Fyzikální chemie
Obor řízení	<i>Jana Pavlů, Mgr., Ph.D.</i>
Uchazeč	Ústav chemie
Pracoviště uchazeče	<i>Ab initio and semiempirical modelling of intermetallic phases</i>
Habilitační práce (název)	prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.
Oponent	VŠCHT Praha
Pracoviště oponenta	

Text posudku (rozsah dle zvážení oponenta)

Předložená habilitační práce shrnuje výsledky teoretického studia fyzikálně-chemických vlastností vybraných intermetalických sloučenin a systémů tvořených kovovými prvky, které byly autorkou práce získány v letech 2002-2014 a prezentovány v devatenácti publikacích v respektovaných odborných periodikách (např. Computational Materials Science, CALPHAD, Journal of Alloys and Compounds, Intermetallics, Materials Science and Engineering aj.) sledovaných v databázi WoS. Autorkou deklarované podíly na jednotlivých publikacích v rámci kolektivů autorů jsou v rozmezí 15-90 %. Po stránce tematické jsou publikace (resp. autorčiny příspěvky) zaměřené zejména na *ab-initio* výpočty a dále na termodynamické modelování studovaných systémů.

V úvodním komentáři k práci (30 stran textu) jsou představeny základní teoretické přístupy a metodické postupy pro aplikace dvou výše zmíněných metod: (i) teoretických *ab-initio* výpočtů strukturních (objem elementární buňky, mřížkové parametry), energetických (energie tvorby intermetalických sloučenin) a mechanických (objemový modul pružnosti) parametrů studovaných fází a (ii) semiempirických postupů (CALPHAD) při modelování Gibbsových energií jednotlivých fází a výpočtech fázových rovnovah binárních a ternárních systémů kovových prvků. V závěru této části jsou přehledně shrnuty hlavní výsledky dosažené autorkou, kterými jsou zejména doplnění strukturních a termodynamických dat studovaných intermetalických sloučenin, konzistentní termodynamický popis studovaných systémů se zahrnutím výsledků *ab-initio* výpočtů a rozšíření termodynamické databáze prvků (SGTE) do oblasti nízkých teplot. Tyto výsledky pokládám za zásadní přínos autorky v oblasti teoretického studia vícesložkových kovových systémů.

Práce je sepsána v anglickém jazyce, je přehledná a její formální úroveň je vysoká. Pokud bych měl zmínit nějaký nedostatek, tak snad pouze grafické podání některých obrázků (např. 3.3, 3.4 nebo 3.5), ve kterých je vložený popis špatně čitelný. Rovněž překlepů je minimum, v rovnici (3.12) má být správně člen bT^4 místo bT^2 (viz Eq. (1) v práci XIV).

Dotazy oponenta k obhajobě habilitační práce (počet dotazů dle zvážení oponenta)

1. V tabulce 2.4 jsou porovnány vámi vypočtené (*ab-initio*) hodnoty slučovací energií s daty experimentálními. Lze stanovit intervaly spolehlivosti (\pm) vypočtených hodnot a porovnat s těmito údaji pro experimentální hodnoty? V textu uvádíte, že v některých

případech je shoda výpočtu a experimentu dobrá, v jiných ne a vysvětlujete to rozdílnou teplotou pro vypočtenou energii (0 K) a experimentální entalpii (RT a vyšší). Jelikož jsou rozdílné teploty pro všechny porovnávané experimentální hodnoty, pak není toto vysvětlení příliš logické. Rovněž lze namítnout, že pro odhad tepelných kapacit pevných sloučenin (včetně intermetalik) se běžně užívá aditivní Neumannovo-Koppovo pravidlo, které predikuje teplotní nezávislost příslušné slučovací entalpie.

2. Proč byl pro vyjádření tepelné kapacity pevných látek v oblasti nízkých teplot zvolen Einsteinův model, v rámci kterého byla Einsteinova teploty počítána z teploty Debyeovy a ne přímo Debyeův model? V práci M.W. Chase et al.: *Thermodynamic models and data for pure elements and other endmembers of solutions*, CALPHAD 19 (1995) 437-447, ve které jsou tyto modely v rámci CALPHAD přístupu navrženy, je konstatováno: „The Debye temperature model has the advantage of giving the correct temperature dependence at very low temperatures.”

Závěr

Závěrem lze konstatovat, že práce výstižně shrnuje výsledky výzkumu autorky za více než 13 let její činnosti v oblasti teoretického studia fyzikálně-chemických vlastností kovových systémů. Práce má vysokou odbornou úroveň, kterou nejlépe charakterizují výše zmíněné publikace a odkazy na tyto práce v odborné literatuře (více než 170 v databázi WoS k 7. 9. 2016). Habilitační práce Mgr. Jany Pavlů, Ph.D. „Ab initio and semiempirical modelling of intermetallic phases“ **splňuje** požadavky standardně kladené na habilitační práce v oboru Fyzikální chemie.

V Brně dne 7. 9. 2016

prof. Ing. Jindřich Leitner, DrSc.