

Doporučení školitele disertační práce

Autor disertační práce: Ing. Iva Voleská

Název disertační práce: **Kombinovaný přístup ke studiu struktury a elektronických vlastností chalkogenidových skel**

Disertační práce je zaměřena na studium chalkogenidových skel se složením GaGeTe₇ a AsS₂ a AgAsS₂. Byla použita kombinace teoretického a experimentálního přístupu. Vzorky byly připraveny syntézou z čistých prvků a jejich strukturní vlastnosti byly získány pomocí těchto experimentálních technik: X-ray difrakce, neutronová difrakce, EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) a Ramanova spektroskopie. Experimentální data byla využita pro simulace metodou reverzní Monte Carlo. Výpočty optimalizace struktury na úrovni DF-MD (Density functional – Molecular Dynamics) byly provedeny na základě RMC optimalizované struktury.

Výsledné struktury periodického modelu nekystalických materiálů byly analyzovány a byly vyhodnoceny délky a druhy vazeb v materiálu, velikosti vazebných úhlů, vakance, koordinační čísla, band gapy. Ramanovana spektra byla interpretována pomocí klastrových modelů. Výsledná struktura, byla korelována s experimentálními daty. Výsledky a závěry byly diskutovány. Byla nalezena výborná shoda mezi vypočítanými a experimentálními daty a potvrzena tak možnost využití kombinovaného přístupu ke studiu podobných amorfních chalkogenidových materiálů.

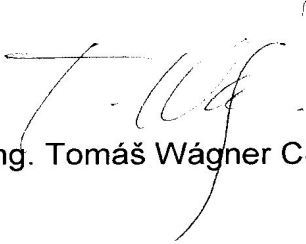
V průběhu PhD. studia Ing. Iva Voleská získala a absolvovala i dlouhodobé odborné stáže v zahraničí; v Department of Physics, Tampere University of Technology, Finland (Dr. Jaakko Akola); Deutsches Elektronen-Synchrotron, Hamburg, Germany (Dr. Pal Jovari).

Autorka se zhostila svého úkolu s nadšením, vysokou odpovědností a schopností pracovat samostatně a inventivně. Zvládla speciální postupy syntézy chalkogenidových skel, teoretický i praktický výpočetní aparát a programy s tím související. Komplexní přístupy k řešení problému přispěly k získání nových poznatků o studovaných jevech i potenciálních aplikacích.

Výsledky její práce jsou předmětem **3** prací v zahraničních časopisech (již publikovaných), další publikace je v recenzním řízení. Dále byly výsledky prezentovány a publikovány v 16 příspěvcích na zahraničních konferencích.

Disertační práci doporučuji k obhajobě.

2. 9. 2015


prof. Ing. Tomáš Wágner CSc.