

Posudek vedoucího bakalářské práce

Název práce: Předpověď struktur multiprvkových kovových vrstev vytvářených atom po atomu pomocí klasické molekulární dynamiky

Autor práce: Pavla Macháňová

Vedoucí práce: doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.

Pracoviště: Katedra fyziky, Fakulta aplikovaných věd, Západočeská univerzita

Jde o teoretickou práci popisující růst tenkých vrstev CuZr pomocí klasické molekulární dynamiky založené na empirickém interakčním potenciálu. V minulosti byly na KFY podobné simulace prováděny zejména pro iontové oxidy kovů, v případě kovových vrstev jde o premiéru. Práce byla proto, vedle své úspěšnosti z hlediska výsledků, cenná i z hlediska metodologie.

Práce je cenná v následujících ohledech

- (i) Především považuji za důležité že jde o samostatnou práci, o simulace které by jinak nebyly provedeny (nikoliv o přihlížení / pomoc tak jako tak probíhajícímu projektu vedoucího nebo doktoranda).
- (ii) V kapitole 4 je velmi poctivě prozkoumán vliv parametrů simulace, včetně některých závěrů reprezentujících rozdíl mezi růstem iontových oxidů a růstem kovů. Tato - oficiálně metodologická - kapitola tedy nereprezentuje jen popis metodologie vyvinuté někým jiným, ale především obsahuje mnoho vlastních výsledků.
- (iii) V literatuře dostupný EAM potenciál pro systém Cu-Zr, nařítovaný pro jiné účely a svými autory testovaný pomocí jiných simulačních algoritmů než je popis růstu vrstev atom po atomu, byl pro uvedený účel úspěšně otestován.
- (iv) Výsledková kapitola 5 obsahuje velké množství zajímavých výsledků naplňujících záměr práce, konkrétně z mnoha hledisek prozkoumanou strukturu vrstev Cu-Zr v závislosti (1) na energii přilétajících atomů a (2) na poměru Cu/Zr. V prvním případě je zajímavý například vliv energie na homogenitu vrstev a obsah ikosahedrálních klastrů, v druhém případě je zajímavý vliv složení na strukturu vrstev v širokém rozsahu, od fcc přes amorfní (se silně proměnným zastoupením ikosahedrálních klastrů) po hcp.
- (v) Poslední z uvedených vypočítaných výsledků je v přesném souladu s nedávným experimentálním výsledkem získaným na KFY (Zeman, Zítek et al.).

Autorka v průběhu práce zvládla základní funkce simulačního programu LAMMPS, naprogramovala některé z pomocných programů pro přípravu vstupních nebo zpracování výstupních souborů, provedla popsané simulace a zpracovala všechny jejich výsledky. Prokázala schopnost pracovat samostatně, zodpovědně a pečlivě. Jde o jednu z nejlepších mnou vedených kvalifikačních prací, oceněnou prvním místem na květnové studentské vědecké konferenci. Doporučuji ji k obhajobě a navrhuji klasifikaci výborně.

V Plzni 15.6.2018

doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.

