

## Recenze bakalářské práce Pavly Macháňové

### Předpověď struktur multiprvkových kovových vrstev vytvářených atom po atomu pomocí klasické molekulární dynamiky

Cílem práce je prostudovat literaturu týkající se modelování růstu tenkých vrstev, zvládnout metodologii klasických výpočtů, provést simulace růstu tenkých vrstev a pokusit se nalézt korelace mezi procesními parametry a strukturou rostoucích vrstev.

Po krátkém úvodu je ve druhé kapitole shrnut současný stav zkoumané problematiky: vlastnosti kovových skel, popis krystalické struktury, možnosti modelování růstu pevných látek a analýza pomocí společných sousedů.

K úvodu bych měl několik drobných připomínek a malých dotazů : Jaký je dosah uspořádání ve sklech ?, psal bych polyedr apod. (bez h), jak se dosáhne rychlosti ochlazení milion K za sekundu ?, u popisu molekulární dynamiky bych uvítal nějakou pohybovou rovnici, v odst. 2.2.1 bych uvítal rozsah možností výpočtů pro všechny metody (něco je dále), výraz „rovnice Lenard-Jones nebo Buckingham“ se mi nelíbí, co znamená zkratka LAMMPS ?, význam indexů ijk nesouhlasí s obrázkem 3.

Třetí kapitola uvádí cíle práce, čtvrtá je věnována metodám simulace : diskutuje se fitování empirického potenciálu a jsou uvedeny výsledky fitování, velice stručně je popsán termostat a na základě simulací je zvolena tlumící doba 0.01 ps, obdobně je volen časový krok a nakonec popsán případ bez regulace teploty.

Připomínky a dotazy : Uvítal bych tvar fitovaného potenciálu, na s. 18 by asi byla pro porovnání vhodná v grafech stejná měřítka, hodnoty oscilací teploty se mi nezdají v souladu s obrázkem 8, zdá se, že základna krystalické mříže je 10 x 10 atomů –v textu jsem to ale nikde nenašel.

Pátá kapitola se věnuje výsledkům a jejich diskuzi. V první části vrstvám 50% Cu a 50 % Zr ( s obrázkem), jejich koordinačním čísly, podílu vazeb, složení povrchu, CNA analýze a homogenitě vrstev.

Připomínky a dotazy : ne zcela vhodný popis obrázku 18 ( pro malé energie nejde o odprášené atomy ), Existuje důvod pro větší množství mědi na povrchu ?, Lze interpretovat velice často se objevující klastry s indexy 544 a 433 ?

V druhé části se pak zkoumá případ, kdy dopadající atomy Cu a Zr nejsou v poměru 50 % : 50 %.

Malý dotaz : Lze jednoduše interpretovat krajní hodnoty závislosti koordinačního čísla mědi v obrázku 29 ?

Šestá kapitola shrnuje závěry.

Grafická úroveň práce je výborná.

Při obhajobě bych rád slyšel následující :

- 1) Jak vypadají základní rovnice molekulární dynamiky a hlavně fitovaný empirický potenciál.
- 2) Jaká je role termostatu, s podrobnějším popisem, než je v práci
- 3) Existuje důvod pro vyšší výskyt atomů mědi na povrchu ?

Práci doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnocení *v e l m i d o b ř e*.

V Plzni 13. června 2018



Doc. RNDr. Jan Slavík, CSc.