

Oponentský posudek disertační práce Ing. Martina Matase

## Design tenkovrstvých materiálů a vysvětlení jejich vlastností pomocí simulací na atomární úrovni

Předložená disertační práce se zabývá teoretickým zkoumáním nových materiálů pomocí kvantové mechaniky za využití teorie funkcionálu hustoty. Kromě zkoumání samotných materiálů se práce věnuje i optimalizaci některých aspektů představených výpočtů. Práce začíná obecným úvodem, pokračuje představením různých materiálů, které pak disertant teoreticky zkoumá a dále obecně představí výpočetní metody využívané při modelování materiálů a jejich vlastností. Následně se disertant věnuje představení vlastních příspěvků disertanta k novým metodám při výpočtu vlastností molekul a materiálů, případně na jejich optimalizaci. Dále jsou již uvedeny výsledky teoretického studia různých materiálů –  $Ta_2N_2O$ ,  $Hf(M)SiBCN$  ( $M = Y, Ho, Ta, Mo$ ),  $Ti_{0,25}Zr_{0,25}Hf_{0,25}Ta_{0,25}B_2$  a  $HoN$ . Zkoumané problémy jsou ve světě aktuální. Jednak jsou nové zkoumané materiály, ale i teoretické modelování jako takové je metodou stále důležitější a jen díky kombinaci teoretického modelování a experimentu jsme schopni vysvětlit mnoho do této doby nevysvětlitelných vlastností materiálů.

Samotná práce má formu kompendia disertantových článků. Je prezentováno pět článků, 4 již publikované a jeden odeslaný do časopisu. Tři články jsou články prvoautorskými. Práce je psána v češtině, má celkem 122 stran a z toho 118 číslovaných. Práce je rozdělena do pěti sekcí. První sekce uvede čtenáře do studované problematiky z hlediska materiálů i výpočetních metod. Tato sekce obsahuje přes 180 citací, což ukazuje přehled disertanta ve studovaném oboru. Druhá kapitola shrnuje cíle, kterých má daná práce dosáhnout. Třetí kapitola obsahuje disertantovy vložené články, kde se každý článek věnuje jednomu zkoumanému problému z předchozí kapitoly. Čtvrtou kapitolou je závěr, kde je zhodnoceno, jak znalosti představené v článcích splňují cíle si na začátku práce vytyčené. Všechny cíle byly splněny. Poslední kapitolou je seznam prací disertanta a následuje Résumé a abstrakt v angličtině.

Práce je přehledně napsaná a má i velmi dobrou grafickou úroveň. Text se dá snadno sledovat. Mou jedinou výtkou je, že práce v kapitole 1 obsahuje některá příliš rozmáchlá a nebo nepřesná tvrzení, například že většinu hmotnosti vesmíru tvoří horké plazma. Tyto drobnosti však nesnižují jinak velmi dobrou úroveň práce. Výsledky práce jsou jasné a jsou i mezinárodně respektované, což je vidět díky jejich publikaci v mezinárodně uznávaných časopisech. Jeden článek byl publikován v *JVST A*, jeden v *Acta Materialia*, jeden v *Journal of Physics: Condensed Matter* a jeden v *Ceramics International*. Navíc disertant publikoval článek v *Molecular Simulation*, který v práci není zařazen. Disertant je také prvním autorem šesti konferenčních příspěvků, které i prezentoval mezinárodnímu publiku. I toto ukazuje na dobrou vědeckou kvalitu disertanta.

Předložená práce splňuje nároky kladené na disertační práce v oboru a disertant ukázal schopnosti a znalosti potřebné pro samostatnou vědeckou tvůrčí práci. Předloženou práci **doporučuji** k obhajobě.

K práci mám několik otázek:

1. Modelování krystalických materiálů je relativně přímočaré. Modelování amorfních materiálů je však složitějším oříškem. Mohl by disertant shrnout možnosti a svoje zkušenosti z modelování amorfních látek? Jaká byla závislost modelovaných vlastností například na velikosti cely, jaká byla opakovanost výsledků s různým „náhodným“ rozložením atomů ve stejně velké cele, případně zda nebyl problém v artefaktech zaviněných periodickým opakováním menší „náhodné“ cely v materiálu?
2. Může disertant popsat problémy v modelování vlastností materiálů, které přinese začlenění magnetických prvků do materiálu?
3. Může disertant zhodnotit reálné výpočetní možnosti modelování materiálů, které by se velikostně blížily reálným vzorkům o velikosti několika milimetrů čtverečních, třeba vlastnosti na ostrých hranách vzorků?

V Brně,

22. 4. 2023

doc. Mgr. Pavel Souček, Ph.D.

## Oponentský posudek na disertační práci

Ing. Martina Matase

„Design tenkovrstvých materiálů a vysvětlení jejich vlastností pomocí simulací na atomární úrovni“

Předkládaná disertační práce je věnována aktuálnímu tématu aplikace metod počítačového modelování k predikci vlastností nových materiálů, vysvětlení experimentálně určených vlastností materiálů nebo k určení optimálního způsobu přípravy materiálů o požadovaných vlastnostech se zaměřením na fyziku tenkých vrstev. Byl použit model pevných látek na atomární úrovni využívající teorii funkcionálu hustoty (DFT). Výsledky práce byly předloženy v podobě pěti časopiseckých článků, popisujících a rozvíjejících metodiku DFT a aplikujících ji na předpovězení struktur a vlastností vybraných materiálů a to převážně těch, které byly připravovány experimentálně na pracovišti, kde práce vznikla. Výsledky uvedené v této disertační práci získal autor během doktorského studia na katedře fyziky Fakulty aplikovaných věd Západočeské univerzity v Plzni. Lze konstatovat, že zvolené téma má plně disertabilní charakter, je perspektivním směrem v oboru Fyzika plazmatu a tenkých vrstev a přispívá k rozvoji technologií vytváření nových materiálů a struktur.

Práce o celkovém rozsahu 118 stran, včetně pěti vložených publikací, je členěna v logickém sledu do pěti kapitol, tj. úvodu a metodologii, cílům práce, výsledkům a diskuzi, závěru a seznamu prací disertanta.

V první kapitole, tj. rešeršní části práce, uvádí autor systematický a podrobný přehled současného stavu poznání v oblasti studia zkoumané problematiky. Tato část je věnována hlavně popisu vlastností a možných aplikací zkoumaných materiálů, tj. krystalických binárních a ternárních mononitridů přechodových kovů včetně magnetických nitridů vzácných zemin, amorfních multikomponentních nitridů, krystalických oxynitridů tantalu a krystalických multikomponentních diboridů přechodových kovů. Část této kapitoly je věnována i metodám depozice tenkých vrstev těchto materiálů, nebo materiálů na nich založených. Následně je velmi podrobně popsána teorie funkcionálu hustoty, včetně jejích možných rozšíření, jako výpočetní metody, klíčové pro získání výsledků této disertační práce. Závěr této kapitoly je věnován metodickým poznatkům autora, které nejsou uvedeny v příložených publikacích.

Na tomto místě bych chtěl ocenit přístup autora práce k vypracování této rešeršní části práce. Tato kapitola je napsána komplexně a velmi podrobně a přitom přehledně, což svědčí o pečlivém studiu a analýze rešeršních materiálů. Seznam použité literatury obsahuje 182 odkazů na práce jiných autorů, které jsou v práci bohatě citovány.

Po přesném vyspecifikování cílů práce v druhé kapitole je nejrozsáhlejší, třetí kapitola, věnována dosaženým výsledkům a diskuzi. Výsledky, které představují těžiště disertační práce, jsou prezentovány ve formě čtyř článků publikovaných v mezinárodních impaktovaných časopisech a jednoho rukopisu článku předloženého k posouzení k publikaci v impaktovaném mezinárodním časopise. V textu každého článku je popsána a případně zoptimalizována potřebná metodika a následně jsou vypočítány požadované vlastnosti konkrétních materiálů. Tyto publikace shrnují nejzásadnější výsledky získané autorem a jeho spolupracovníky na katedře fyziky Fakulty aplikovaných věd Západočeské univerzity v Plzni a pokrývají plně všechny cíle práce. Autor provedl naprostou většinu publikovaných výpočtů *ab initio*. Autor dále přesně specifikuje svůj autorský podíl na jednotlivých publikacích. Kvalitu uveřejněných publikací není třeba diskutovat, ta je zaručena „peer review“ recenzí v renomovaných časopisech, tak i následnými citacemi.

Čtvrtá kapitola je věnována stručnému a přehlednému shrnutí dosažených výsledků práce a předkládá závěry práce ve struktuře odpovídající stanoveným cílům.

V závěrečné části práce je uveden seznam publikací autora práce. Tento přehled publikační činnosti autora práce obsahuje celkem 6 článků v impaktovaných mezinárodních časopisech (4 zařazené do disertace, 1 nezařazený do disertace a 1 odeslaný do impaktovaného časopisu a zařazený do disertace) a 7 příspěvků na mezinárodních konferencích.

Práce je po stránce stylistické i grafické na velmi dobré úrovni, v práci jsem nenalezl překlepy, ani jiné formální nedostatky. Pouze v první kapitole v části věnované experimentální depozici tenkých vrstev (str. 9 až 15) lze občas nalézt ne zcela vhodné formulace, jako např. na str. 9 - „*Atomy...následně cestují prostorem depoziční komory.*“, nebo na str. 10 - „*Přítomností kationtů a volných elektronů se tak plyn v depoziční komoře mění na plazma.*“.

Celkově lze tedy hodnotit předloženou disertační práci následovně:

- a) Hlavní výsledky, kterých autor v této práci dosáhl, jsou původní a rozšiřují doposud známé poznatky v oblasti počítačových simulací na úrovni kvantové mechaniky při modelování pevných látek a simulaci některých procesů při jejich vzniku. Kromě samotné aplikace existujících metod na případy konkrétních materiálů práce také studuje a optimalizuje některé metodické aspekty výpočtů.
- b) Autor provedl rozsáhlou řadu systematických počítačových výpočtů *ab initio*, diskutoval a analyzoval teoretické i dostupné experimentální výsledky. Kromě optimalizace vybraných prvků metodiky teorie funkcionálu hustoty (DFT) tuto metodu využil k předpovězení struktur a vlastností vybraných materiálů.
- c) K věcnému vědeckému obsahu předkládané práce nemám připomínek a v dané práci jsem nenašel podstatné a závažné nedostatky.
- d) Byly zvoleny adekvátní metody a disertační práce splnila stanovené cíle.

Na dané práci osobně velmi oceňuji do budoucna velký potenciál těchto výpočtů pro předpovídání trendů mechanických a elektronických vlastností vybraných materiálů a případné vysvětlení výsledků experimentálních měření těchto vlastností. Nelze opomenout ani ten fakt, že výpočty tohoto charakteru mohou ušetřit čas a náklady spojené s rozsáhlými experimenty nebo poskytnout poznatky experimentálně zatím nedostupné.

K vědecké části práce nemám žádné podstatné faktické připomínky nebo dotazy. K práci mám pouze následující dva formální dotazy.

1) Co autora vedlo k tomu, že metodické poznatky, které nejsou uvedeny v příložených publikacích a obsahují výsledky práce autora, uvedl v závěru první kapitoly tj. v rešeršní části? Formálně by podle mne bylo možná vhodnější tuto část přiřadit k třetí sěžejní kapitole věnované dosaženým výsledkům autora.

2) Mohl by autor v rámci obhajoby uvést, v čem by mohla v budoucnu práce pokračovat a jaký další prostor pro výzkum dalších materiálů v této oblasti otevírají dosažené výsledky?

Autor předloženou disertační prací prokázal schopnost samostatné vědecké práce. Jeho publikační činnost a řada prezentací výsledků na konferencích dokazují i jeho schopnost referovat o své práci a prezentovat dosažené výsledky.

Domnívám se proto, že předložená práce Ing. Martina Matase „*Design tenkovrstvých materiálů a vysvětlení jejich vlastností pomocí simulací na atomární úrovni*“ splňuje všechny požadavky kladené vysokoškolským zákonem č. 111/198 Sb. na disertační práci a doporučuji přijmout disertační práci k obhajobě a po úspěšné obhajobě udělení titulu Ph.D.

V Ústí nad Labem, dne 26. 4. 2023

Doc. RNDr. Jaroslav Pavlík, CSc.  
Katedra fyziky PĚF UJEP v Ústí nad Labem