

Posudek vedoucího bakalářské práce

Název práce: Modelování vlivu kinetické energie atomů kovu a kyslíku na růst krystalických oxidů"

Autor práce: Martin Matas

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

Pracoviště: Katedra fyziky, Fakulta aplikovaných věd, Západočeská univerzita

Jde o teoretickou práci popisující růst tenké vrstvy Al_2O_3 pomocí klasické molekulární dynamiky založené na Buckinghamově empirickém interakčním potenciálu. V minulosti byly podobné simulace provedeny zejména pro monoenergetický tok částic, práce toto rozvíjí pro řadu jiných rozložení energií přilétajících atomů Al a O. Pro každý z prvků jsou přítomny rychlé atomy se zvolenou energií i pomalé atomy. (Z experimentálního hlediska reprezentují ionty a neutrály, v rámci zjednodušení daného empirickým potenciálem mají ovšem všechny již při příletu stejný náboj jako v iontovém krystalu.)

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).
- (ii) V metodologické části (kapitola 4) je velmi poctivě prozkoumán vliv parametrů simulace, přestože oficiálně nejde o výsledkovou část tak již tato kapitola obsahuje řadu vlastních výsledků.
- (iii) V literatuře dostupný Buckinghamův potenciál (v minulosti úspěšně použitý pro relativně nízké energie částic) nebyl jen převzat, ale také upraven (v rámci KFY poprvé) tak aby umožňoval i správný popis srážek částic s vysokými energiemi (mnoho set eV).
- (iv) Výsledková část (kapitola 5) obsahuje dostatečné množství zajímavých výsledků naplňujících výše uvedený záměr práce.
- (v) Nad rámec uvedeného záměru výsledková část dále studuje vliv cutoffu Buckinghamova potenciálu (v zásadě van der Waalsovy interakce). Uvedený vliv (a) jde logickým směrem a (b) nemění trendy, tj. neohrožuje platnost výsledků v předchozím bodě. Kvantitativně je ovšem překvapivě silný, to že v daném rozsahu (5-10 Å) ještě není zanedbatelný je v rámci mě známé literatury originální a důležitý poznatek¹ stojící za další studium (po důkladnějším prostudování možná i směřující k případné publikaci).

Autor v průběhu práce zvládl základní funkce simulačního programu LAMMPS, provedl popsané simulace a zpracoval všechny jejich výsledky. Autor prokázal schopnost pracovat samostatně. Po relativně pomalém rozjezdu v rámci předmětu PRJ5 prokázal v době před odevzdáním i schopnost pracovat dostatečně rychle. Práci doporučuji k obhajobě a navrhuji klasifikaci výborně.

V Plzni 20.6.2016



doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.

¹ To platí bez ohledu na paralelní otázku jaký cutoff vede na výsledky kvantitativně bližší experimentálním - krystalinita při vyšším cutoffu je s ohledem na experimentální obtížnost přípravy $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ až podezřele dobrá a je např. na místě otázka zda konkrétní použitý interakční potenciál tento jev nepřeceňuje. (Jinými slovy: změna cutoffu přináší zdánlivě zanedbatelnou energii v řádu tisíců eV na vazbu, že to není zanedbatelné je zajímavé a překvapivé bez ohledu na to zda ony tisíce eV přináší v souladu nebo v rozporu s experimentem.)