

Recenze bakalářské práce Martina MATASE

Modelování vlivu kinetické energie atomů kovu a kyslíku na růst krystalických oxidů

Práce se zabývá modelováním depozice  $\text{Al}_2\text{O}_3$  metodou molekulární dynamiky pomocí softwaru LAMMPS ( Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator ).

Po krátkém úvodu hýřícím optimismem ( „Člověk tak míří za co nejsmysluplnějším využitím svého života... ) je v druhé kapitole podán stručný přehled zkoumané problematiky, speciálně o samotném modelování depozice  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Třetí kapitola formuluje cíle bakalářské práce.

Ve čtvrté jsou popsány metody zpracování. Je formulována řešená pohybová rovnice pro všechny uvažované částice. Často se mluví o atomech, byť ze souvislosti vyplývá, že se jedná o ionty. Konečně pro částice se uvažuje Coulombovské působení. Parametry této části potenciálu jsou ale uvedeny až o 4 strany dále. Pro krátkodosahovou složku se uvažuje tzv. Buckinghamův potenciál. V obr. 1. zobrazujícím tento potenciál je hodnota vzdálenosti volena trochu matoucí způsobem od hodnoty 1 Å. Vzhledem k nevhodnému chování Buckinghamova potenciálu je tento modifikován v oblasti krátkých vzdáleností. Modifikace je popsána jako aproximace exponenciálou a následná extrapolace. Myslím, že přesnější formulace by nebyla na škodu. Interakční potenciál je po té testován shodou výpočtu krystalových parametrů. Dále je popsána simulační buňka a voleno její ukončení nahoře (terminace). Uvažuje se též o popisu pomocí tepelného souboru. K tomu je prý do modelu přidán termostat. Jeho tvar není popsán. Zkoumá se vhodná velikost tlumící konstanty termostatu  $\tau_{\text{damp}}$ . Autor zvolí hodnotu 0.005 ps. Teprve po té je popsána integrační procedura. Poněkud překvapuje, jak hrubý integrátor program LAMMPS užívá. Hledá se vhodný časový krok, nakonec se volí 0.001 ps. Až na tomto místě je uvedena interpretace teploty pomocí kinetické energie částic. ( Očekával bych ji u termostatu, ) Dále jsou uvedeny simulace dopadu atomů na vrstvu v režimu energetickém a teplotním, uvedeny simulované hloubky vniku do vrstvy a deformace povrchu mřížky. Na závěr je uvedena radiální distribuční funkce pro  $\text{Al}_2\text{O}_3$  ( nejasné zda získaná vlastními simulacemi či odjinud ) a volen cutoff pro vazbu Al-O. Domnívám se, že tato kapitola mohla být zpracována přehledněji a asi i trochu podrobněji.

Pátá kapitola podává výsledky simulací a diskutuje je. Nejdříve je popsán protokol simulace. ( Ten bych byl čekal v předchozí kapitole. ) Zjišťuje se vliv délky výpočtu na koordinační číslo. Vychází se z 5 simulací po 3000 atomech. Volí se doba výpočtu 4 ps s ohledem na výpočetní náročnost. Je uvedeno i procento odprášených atomů a získaná tloušťka vrstvy. Dále autor zkoumá ořezání Buckinghamova potenciálu na vzdálenosti 5 Å resp. 10 Å s překvapivým zjištěním, že pro větší vzdálenost ořezání dostává větší krystalinitu, než při ořezání na kratší vzdálenosti a větší než by se očekávalo. ( Zde bych očekával nějaký odkaz na experiment. ) Ve zbývajících částech se zkoumá vliv podílu rychlých atomů na koordinační číslo, procento odprášených atomů a tloušťku vrstvy. V části variant se energie rychlých atomů daného druhu normuje tak, aby jejich střední energie odpovídala 60 eV, což energii rychlých atomů zvětší až na 296 eV resp. dokonce 738 eV, přičemž energii pomalých zůstává na 1 eV. Situace se mi nezdá příliš fyzikální,

V závěru jsou shrnuty výsledky.

Na autora práce mám následující otázky :

Ve výsledcích uvedených na grafech na s. 21 se objevují oscilace teploty na úrovni stovek K na časové škále ps resp. 0.1 ps. Odkud se berou ?

Z výsledků na s. 31 se mi zdá, že zvláště pro teplotu 800 K systém za 4 ps ještě nerelaxoval. Je autor jiného názoru ?

Jak by se realizovala experimentálně situace, kdy všechny kyslíky mají energii 1 eV, 80 % atomů hliníku také a 20 % hliníků má energii 738 eV ? ( viz s. 45-46 )

Práce obsahuje zajímavé výsledky, doporučuji ji proto k obhajobě, a navrhuji klasifikaci velmi dobře.

V Plzni 17. června 2016



Doc. RNDr. Jan Slavík, CSc.