

# Oponentní posudek k diplomové práci

## Teoretický popis otráveného terče při reaktivním rozprašování feromagnetických kovů pod a nad Curieovou teplotou

Bc. Tereza Lerchová

### 1 Shrnutí obsahu práce

Diplomová práce se zabývá kvantově-mechanickými výpočty základního stavu povrchu feromagnetických kovů (Fe, Co, Ni) s adsorbovanými atomy kyslíku, pomocí metody DFT (*density functional theory*). Hlavním cílem práce bylo prozkoumat všechny možné kombinace rozložení adsorbovaných atomů kyslíku na povrchu a vyhodnotit, zda je preferována tvorba homogenního suboxidu nebo směs kovu a stechiometrického oxidu – navíc v závislosti na množství kyslíku na povrchu kovu a jeho magnetickém stavu. Jelikož výpočty pro paramagnetické stavy nebyly úspěšné, práce se nakonec věnuje výhradně feromagnetickým stavům (pod Curieovou teplotou). Práce navazuje a doplňuje dřívější výpočty J. Houšky (pro dia- a paramagnetické kovy) a je originálním příspěvkem k současnému stavu poznání. Výsledky jsou cenné například pro pochopení procesů oxidace povrchu materiálu při reaktivním magnetronovém naprašování.

### 2 Odborné zpracování

Autorka zvládla zvolenou metodiku kvantově-mechanických výpočtů metodou DFT. Provedla řadu přípravných výpočtů pro stanovení optimálních parametrů výpočtů a následně provedla a zpracovala velké množství výpočtů popisujících jednotlivé konfigurace povrchů kovů s adsorbovanými atomy kyslíku. Získané výsledky jsou adekvátně zobrazeny v grafech a vysvětleny v textu. Autorka tak prokázala schopnost samostatné tvůrčí práce.

Kladně hodnotím, že výsledky pro feromagnetické kovy jsou diskutovány v kontextu s výsledky pro ostatní kovy a velmi dobře doplňují dříve zjištěné trendy. Při diskuzi je odkazováno i na jiné relevantní práce a je citováno velké množství zdrojů (51). Autorka v práci zmiňuje i postup při modelování paramagnetických stavů povrchů, který ale nevedl ke konvergenci výpočtů a tento cíl tedy nebyl naplněn. Vzhledem k rozsahu ostatních získaných výsledků toto nijak nesnižuje kvalitu práce.

### 3 Formální zpracování

Práce má standardní strukturu, ale obsahově není logicky uspořádána. Například kapitola 2.3 popisuje detailně předchozí výsledky, ačkoliv metodika klíčová pro jejich pochopení je z větší části popsána až v části 4. Také jednotlivé kapitoly v části 4 nejdou logicky za sebou, vhodnější by bylo členění do více úrovní.

Metodika výpočtů a její motivace není dle mého názoru dostatečně (srozumitelně) vysvětlena. Domnívám se, že bez mé znalosti práce [32], na kterou tato navazuje, by bylo mnohem obtížnější práci porozumět. Není například dlouho jasné, co jsou jednotlivé „konfigurace“. Veličina „celková kvadratická vzdálenost“ není nikde definována. Na více místech se pracuje s veličinami, které jsou vysvětleny až dále v textu (např. energy cut-off, k-pointy). Práce obsahuje některé nepřesné formulace a chyby (viz příloha na konci posudku). Grafické zpracování je velmi dobré, pouze v obr. 16, 17 a 19 nejsou prakticky viditelné tečkované čáry, v obr. 16 a 17 jsou přitom zásadní.

Celkově je dle mého názoru práce obtížně srozumitelná, obzvláště pro čtenáře, který se zkoumanou problematikou aktivně nezabývá.

#### 4 Otázky

1. Vysvětlíte tvrzení ze str. 28 „Polarizace spinů je započítána při výpočtech referenční energie základního stavu před adsorpcí tripletu molekuly  $O_2$ “. Jako úlohu zde hraje molekula  $O_2$ ?
2. Uvedte, jak byla vypočítána celková kvadratická vzdálenost  $D$  a jak tato veličina popisuje homogenní/heterogenní konfiguraci adsorbovaných atomů.
3. Obr. 19 (vývoj enthalpie) kvalitativně souhlasí se zjištěnou preferencí zkoumaných kovů tvořit suboxydy. Je obecně možné hlavní závěry této práce odvodit pouze na základě těchto závislostí  $H$  a  $G$  (např. i pro jiné kovy)? Diskutujte v tomto smyslu výhody či unikátní přínos Vaší práce oproti zjištěním založeným pouze na základě vývoje  $H$  a  $G$ .
4. Na str. 51 a v závěru je zmíněno, že při chemisorpci kyslíku dochází k oddálení povrchových atomů kovu od sebe. Můžete kvantifikovat tyto geometrické změny a uvést porovnání s experimentem?

#### 5 Závěr

Práce přináší cenné výsledky, které rozšiřují dosavadní stav poznání. Autorka prokázala schopnost samostatné tvůrčí práce. Formální zpracování práce má však značné nedostatky. Diplomovou práci doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnocení **velmi dobře**.

V Plzni dne 15. 6. 2020



Ing. Tomáš Kozák, Ph.D.  
oponent diplomové práce

## 6 Příloha

Níže uvádím nepřesnosti a chyby, které mohou mít vliv na srozumitelnost práce (citace z práce jsou uvedeny kurzívou):

- Str. 1, odst. 1: *se zakázaným pásem v rozmezí 2,0 – 2,2 což umožňuje absorpci zlomku slunečního spektra* – chybí jednotka eV, nepřesné vyjádření
- Str. 1, odst. 3: *jeho substechiometrické oxidy  $NiO_x$ , kde  $x > 1$*  – má být zřejmě „ $x < 1$ “
- Str. 4, odst. 1: *HiPIMS ...k tomu se drží stejný průměrný výkon (v daném pulzu) jako u konvenčního stejnosměrného magnetronového naprašování (dcMS)* – u HiPIMS je cekový průměrný výkon (ne v pulzu, ale v periodě) srovnatelný s DC naprašováním
- Str. 5, odst. 3: *Otravování terče je způsobeno ...(2) adsorpcí stechiometrického oxidu nebo suboxidu na povrchu terče* – není přesné, zřejmě je myšleno, že dochází k adsorpci atomů kyslíku na povrchu terče, a následně dojde k vytvoření vrstvy oxidu nebo suboxidu.
- Str. 6, odst. 2: Schrödingerova rovnice, uvedeno  $\hat{H}(r)\Psi(r) = E(r)\Psi(r)$  – vlastní hodnota energie  $E$  by neměla záviset na poloze
- Str. 6: v kapitole 2.1 není rozlišeno mezi používanými veličinami  $\Psi$  a  $\Psi_e$
- Str. 8, odst. 1: *Základní atomové jednotky se položí rovné jedné* – jsou zřejmě myšleny „veličiny“ (hmotnost elektronu, elementární náboj, ...)
- Str. 9, odst. 3: *Kyslík je ve své podstatě vysoce reaktivní a jeho oxidace ...je simulována ...* – fyzikálně nepřesné, mělo by být např. „Kyslík je ve své podstatě vysoce reaktivní a jím způsobená oxidace povrchu ...je simulována ...“
- Str. 14, odst. 3: *Na závěr práce demonstruje využití takto získaných výsledků na statických a dynamických Monte Carlo simulacích naprašování a jejich výsledky* – přesněji jde o simulace „rozprašování zoxidovaného terče“, tedy jen proces uvolňování atomů z terče a nikoliv depozice atomů na substrát (naprašování)
- Str. 17, odst. 1: *Obr. 4 a Obr. 5 charakterizují konfiguraci vedoucí na nejnižší energii (tedy na  $E_{\text{conf}} = E_{\text{ads}} - E_{\text{ads\_min}} = 0$ )* – obrázky zobrazují všechny konfigurace a závislost  $E_{\text{conf}}(D)$ , nejen jednu konfiguraci  $E_{\text{conf}} = 0$ , jak by mohlo plynout z uvedené věty.
- Str. 17, odst. 1 a str. 45, odst. 1: *...stechiometrický oxide a suboxide* – má být „stechiometrický oxid a suboxid“, zřejmě autokorekce, objevuje se vícekrát

- Str. 17, odst. 1: ...*vychází pro částečně ionizované povrchy následující implikace* – zřejmě má být „částečně zoxidované povrchy“
- Str. 40, odst. 1: ...*Obr. 13. Závislost je ostře rostoucí pro železo a kobalt* – zřejmě má být „ostře klesající“ při pohledu zleva doprava a zobrazené záporné a klesající hodnoty adsorpční energie
- Str. 50, obr. 20 – popis osy *Plocha na atom kovu* není sám o sobě srozumitelný, myšleno plocha povrchu připadající na jeden atom kovu – mohlo být dovysvětleno v popisku
- Str. 51, odst. 1: *Na Obr. 22 a Obr. 22 si můžeme povšimnout ...* – myšleno „Na Obr. 21 a obr. 22“