

Posudek vedoucího bakalářské práce

Název práce: Předpověď struktury vrstev ZnO a ZnO_x vytvářených atom po atomu pomocí různých verzí klasické molekulární dynamiky

Autor práce: Kamila Hantová

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

Pracoviště: Katedra fyziky, Fakulta aplikovaných věd, Západočeská univerzita

Jde o teoretickou práci popisující růst tenkých vrstev ZnO_x pomocí klasické molekulární dynamiky založené na empirických interakčních potenciálech. Použitý simulační protokol v rámci možností přesně reprodukuje to co se děje při experimentu. Práce představuje velký kvalitativní krok vpřed, konkrétně jde nejen o jeden z mála případů modelování růstu ZnO prostřednictvím reaktivního interakčního potenciálu, ale hlavně o jeden z velmi mála případů - a asi dosud nejhlubší případ - modelování růstu nikoliv jen vrstev ZnO₁ ale vrstev ZnO_x (což teprve umožňuje naplno využít výhod reaktivního potenciálu, oproti například Buckinghamovu potenciálu založenému na konstantních nábojích jednotlivých atomů).

Je třeba zdůraznit že jde o samostatnou práci, o simulace které by jinak nebyly provedeny, nikoliv jen o podíl na tak jako tak probíhajícím projektu nějakého staršího kolegy. Výsledky jsou dostatečně zajímavé, zejména ta jejich část která je již zmíněna výše (závislost na x v ZnO_x), a ne vždy intuitivní (kvalitativně různé závislosti koordinačního čísla Zn a O na x , nejlepší krystal pro x různé od 1, atd.). Vedle samostatnosti projevila Kamila také pracovitost a zodpovědnost; práce byla odevzdána včas pro řádný termín obhajob.

Jako relativní slabiny práce lze uvést jednostrannost přehledu literatury (je využívána v minulosti popsaná modelovací metodologie, ale prakticky nejsou diskutovány v minulosti získané modelovací výsledky), určitou povrchnost některých komentářů k vlastním výsledkům (ještě více v raných samostatně vypracovaných verzích), neopravení nejméně jedné přímé chyby diskutované na konzultaci v jednom z obrázků.

Na základě porovnání s jinými mnou vedenými pracemi navrhuji klasifikaci **velmi dobře**.

V Plzni 22.6.2021

doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.