

Oponentský posudek na diplomovou práci Bc. Kamily Hantové

„Předpověď struktury vrstev ZnO a ZnO_x vytvářených atom po atomu pomocí různých verzí klasické molekulární dynamiky“

Práce je zaměřena na modelování růstu ZnO vrstev klasickou molekulární dynamikou, která je v současné době stále častěji využívanou metodou v oblasti materiálového výzkumu. Z tohoto hlediska je téma práce aktuální. Práce mimo úvodu, cílů práce a závěru obsahuje tři hlavní části.

V první části zaměřené na současný stav problematiky autorka začíná popisem zkoumaného materiálu a postupně přechází k jeho modelování, kapitoly tak na sebe vhodně navazují. Jsou zde uvedeny všechny nezbytné informace pro další části práce. Teoretická část je přehledná a srozumitelná. V kapitole 2.2 se na straně 3 uvádí, že kyslíkové vakance přispívají k vodivosti ZnO. Pravděpodobněji jsou to zinkové intersticiály. Nicméně, někteří autoři i toto uvádí a bylo by tedy vhodné sem umístit referenci.

Druhá část práce je zaměřena na metody simulace a jejich testování i s ohledem na výpočetní rychlost. Tato část je velmi detailně zpracována a přitom zůstává dobře srozumitelná. Zaměřuje se na Buckinghamův potenciál a jeho modifikace a potenciál Reactive force field. Popisuje zvolení velikosti simulační buňky, použití termostatu, časový krok a jejich celkový počet nebo ohřívání substrátu a další parametry pro simulaci. Velmi oceňuji, že jednotlivé postupy byly důsledně testovány a nebyly převzaty z literatury.

V poslední části je testován vliv procesních parametrů, zejména pak teploty, energie dopadajících atomů a stechiometrie ZnO. Jsou zde názorně zobrazeny vytvořené struktury, což pomáhá čtenáři se orientovat. Dosažené výsledky jsou zajímavé a myslím, že by měly být více zdůrazněny v závěru.

Práce je vhodně členěná a má standardní grafickou úroveň. Neslabičné předložky s,z,v neměly být samostatně na konci řádku. U obrázků 1, 8 by bylo přehlednější popisky z jednotlivých částí a, b, c sloučit do popisku obrázku. A u obrázků, kde jsou jednotlivé struktury jasně definovány parametrem (např. obr. 29, 39, 40 atd.) je vhodnější nepoužívat k označení ještě písmena. U obrázků 55 a 56 bylo vhodné zmínit plochu povrchu pro dané počty povrchových atomů a pro případné srovnání s jinými simulacemi. Autorka provedla mnoho simulací a získala velké množství zajímavých výsledků, které zpracovala a srozumitelně popsala. Stanovené cíle práce byly splněny, doporučuji ji k obhajobě a navrhuji hodnocení výborně.

K výsledkům práce mám následující dotazy:

- 1) Jak myslíte, že by se asi změnil průběhy simulací a výsledná struktura, pokud by byl použit jiný substrát, např. amorfni SiO₂?
- 2) Je možné zkoumat povrchovou difuzi dopadajících atomů?
- 3) Porovnávala jste výsledky s Thorntovým růstovým modelem pro tenké vrstvy?