

I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

Název práce:	Simulace difúze stříbra v titanu molekulární dynamikou
Jméno autora:	Bc. Šimon Svoboda
Typ práce:	diplomová
Fakulta/ústav:	Fakulta strojní (FS)
Katedra/ústav:	Ústav fyziky
Oponent práce:	Ing. Petr Sedlák, Ph.D.
Pracoviště oponenta práce:	Ústav termomechaniky AV ČR, v.v.i.

II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

Zadání	mimořádně náročné
<i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce.</i>	
Hlavním cílem diplomové práce bylo využití molekulární dynamiky (MD) pro simulaci difúze stříbra v α -Ti. Simulace difúzních procesů v pevných látkách pomocí MD je mimořádně náročná jak vzhledem k sestavení modelu a jeho řešení, tak i k vyhodnocení získaných výsledků a jejich interpretaci.	

Splnění zadání	splněno
<i>Posuďte, zda předložená závěrečná práce splňuje zadání. V komentáři případně uveďte body zadání, které nebyly zcela splněny, nebo zda je práce oproti zadání rozšířena. Nebylo-li zadání zcela splněno, pokuste se posoudit závažnost, dopady a případně i příčiny jednotlivých nedostatků.</i>	
V zadání diplomové práce byly konkretizovány čtyři následující body:	
<ol style="list-style-type: none"> <i>Současný stav poznání o systému Ti-Ag a difúzi Ag v Ti:</i> v prvních dvou kapitolách diplomové práce je přehledně popsána jak fenomenologická, tak i atomistická teorie difúze a jsou zde shrnuty základní vlastnosti systému Ti-Ag. Tato část práce je vypracována velmi kvalitně. <i>Návrh podmínek difúzního děje v uvedeném slitinovém systému:</i> autor navrhl a sestavil dva modely umožňující simulaci difúze v systému Ti-Ag – model páru nekonečných médií, jež simuluje difúzní článek a model difúze homogenně rozloženého Ag v monokrystalu α-Ti na základě vyhodnocení středního kvadratického posunutí Ag atomů, jež nemá žádný experimentální ekvivalent (měření difúze bez makroskopického koncentračního gradientu). <i>Volba meziatomového potenciálu a realizace simulací molekulární dynamikou:</i> autor použil moderní 2NN-MEAM meziatomový potenciál vhodný k simulaci kovových materiálů. Parametry potenciálu byly převzaty z literatury (Lenzi et al., 2021). Samotné simulace byly provedeny v kódu LAMMPS na rozsáhlých systémech čítajících okolo 20 000 atomů. <i>Zpracování, vyhodnocení dat a jejich validace:</i> Difúzní koeficienty Ag v α-Ti (vzhledem k symetrii α-Ti se jedná o dva nezávislé koeficienty) a Ti v Ag byly vyhodnoceny na základě časového vývoje středního kvadratického posunutí. Ze simulací byly určeny difúzní koeficienty pro teploty 500, 600 700 a 800°C a výsledky byly porovnány s dostupnými experimentálními daty z literatury. 	

Zvolený postup řešení	vynikající
<i>Posuďte, zda student zvolil správný postup nebo metody řešení.</i>	
Postup řešení hodnotím jako správný, využívající všech aktuálních možností MD simulací kovových materiálů - použití 2NN-MEAM meziatomového potenciálu a integrace rozsáhlého atomárního systému v prostředí LAMMPS.	

Odborná úroveň	A - výborně
<i>Posuďte úroveň odbornosti závěrečné práce, využití znalostí získaných studiem a z odborné literatury, využití podkladů a dat získaných z praxe.</i>	
Práce je zpracována na vysoké odborné úrovni. Z úvodních částí práce (kapitoly 1-3) je zřejmé, že si autor osvojil nezbytné teoretické základy difúze a molekulární dynamiky. Samotné simulace MD jsou popsány kvalitně, případné dotazy či připomínky shrnuji v závěru posudku.	

Formální a jazyková úroveň, rozsah práce

A - výborně

Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku.

Po formální stránce je práce na velmi vysoké úrovni.

Výběr zdrojů, korektnost citací

A - výborně

Vyjádřete se k aktivitě studenta při získávání a využívání studijních materiálů k řešení závěrečné práce. Charakterizujte výběr pramenů. Posuďte, zda student využil všechny relevantní zdroje. Ověřte, zda jsou všechny převzaté prvky řádně odlišeny od vlastních výsledků a úvah, zda nedošlo k porušení citační etiky a zda jsou bibliografické citace úplné a v souladu s citačními zvyklostmi a normami.

Autor zpracoval velké množství literatury, v práci využívá relevantní a aktuální zdroje. Bibliografické citace jsou v souladu s citačními zvyklostmi.

Další komentáře a hodnocení

Vyjádřete se k úrovni dosažených hlavních výsledků závěrečné práce, např. k úrovni teoretických výsledků, nebo k úrovni a funkčnosti technického nebo programového vytvořeného řešení, publikačním výstupům, experimentální zručnosti apod.

Ačkoliv získané výsledky z MD simulací – difúzní koeficienty Ag v Ti a Ti v Ag a jejich teplotní závislosti budou vyžadovat ještě detailnější verifikaci, práce hezky ukazuje nové možnosti MD simulací, jež se v budoucnu můžou stát jedním ze základních teoretických nástrojů pro studium strukturních procesů v kovech.

III. CELKOVÉ HODNOCENÍ, OTÁZKY K OBHAJOBĚ, NÁVRH KLASIFIKACE

Shrňte aspekty závěrečné práce, které nejvíce ovlivnily Vaše celkové hodnocení. Uveďte případné otázky, které by měl student zodpovědět při obhajobě závěrečné práce před komisí.

Celkově hodnotím práci jako tematicky zajímavou a kvalitně zpracovanou.

K předkládané práci mám následující připomínky a dotazy:

- 1) Lze z provedených simulací určit dominantní mechanismus difúze Ag v Ti a Ti v Ag?
- 2) Můžete detailněji popsat použitý termostat a barostat (v simulacích byl použit NPT soubor) a ukázat průběh teploty a tlaku a jejich případné fluktuace.
- 3) Model páru nekonečných medií, str. 59: „Od povrchové roviny stříbra, jež je naproti rozhraní obou medií, je oddálena stěna realizující periodickou okrajovou podmínku, aby nedocházelo k interakcím stříbrných atomů s pevně fixovanými titanovými atomy na druhé straně boxu“ – Jak je tato podmínka zaručena během výpočtu? Jak je s touto podmínkou udržován v systému konstantní tlak 1 bar?
- 4) Obr. 5.3: Proč v simulovaném Ag chybí dolní rovina atomů? Jak daleko byla teplota simulace od teploty tání Ag? Výsledná struktura Ag vypadá velmi neuspořádaně.
- 5) V textu je uvedeno, že vzhledem k velikosti jednotlivých atomů lze předpokládat vakanční mechanismus difúze (str. 55). V diskuzi výsledků je neočekávaný teplotní průběh koeficientu difúze $D_{\text{Ag}}^{\text{Ti}}[001]$ vysvětlován možnou přítomností difúzních kanálků v Ti ve směru [001]. Považoval jste za tyto kanálky oktaedrické intersticiální polohy v hcp struktuře? Je třeba vzít v úvahu, že velikost těchto intersticiálních poloh je pouze 41% velikosti atomů tvořících hcp strukturu.
- 6) V diskuzi je uvedeno, že získané vyšší hodnoty difúzních koeficientů mohou souviset s tím, že byla simulována difúze na dokonalém krystalu a že by difúzní koeficienty na polykrystalu mohly být nižší. Jaký by mohl být fyzikální důvod nižší difuzivity v polykrystalu?

- 7) Dal by se difúzní koeficient v modelu páru nekonečných médií vyhodnotit i ze získaných difúzních profilů (Obr. 6.7-6.18)?

Předloženou závěrečnou práci hodnotím klasifikačním stupněm **A - výborně**.

Datum: 22.8.2022

Podpis: