

I. IDENTIFIKAČNÍ ÚDAJE

Název práce:	Simulation of the nanoindentation process using molecular dynamics
Jméno autora:	Bc. Tibor Košťál
Typ práce:	diplomová práce
Fakulta:	Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská (FJFI)
Katedra:	Katedra inženýrství pevných látek
Oponent práce:	Ing. Jaroslav Čech, Ph.D.
Pracoviště oponenta práce:	ČVUT v Praze, FJFI, Katedra materiálů

II. HODNOCENÍ JEDNOTLIVÝCH KRITÉRIÍ

Zadání <i>Hodnocení náročnosti zadání závěrečné práce.</i>	průměrně náročné
Zadání práce je průměrně náročné. Jedná se o simulaci indentace do titanu pomocí molekulární dynamiky.	

Splnění zadání <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>	splněno
Zadání práce bylo splněno.	

Zvolený postup řešení <i>Posuďte, zda student zvolil správný postup nebo metody řešení.</i>	vhodný
Zvolený postup řešení a použité metody jsou vhodné. Na rešeršní část navazuje tvorba MD modelu, který umožňuje posouzení vlivu různých parametrů (jak parametrů zatěžování, tak materiálových parametrů) na výsledky simulací indentační zkoušky.	

Odborná úroveň <i>Posuďte úroveň odbornosti závěrečné práce, využití znalostí získaných studiem a z odborné literatury, využití podkladů a dat získaných z praxe.</i>	podprůměrná
Odborná úroveň je nízká. Rozsah práce (rešeršní část 18 stran, experimentální část 20 stran) je malý. Rešeršní část zachycuje základní znalosti a podstatu použitých metod, popis je však velmi stručný, některé informace jsou nepřesné a někdy dokonce chybné. Parametry pro MD model jsou převzaty z literatury, v práci jsou však popsány zmateně a nelze ověřit, že byly použity správně. Samotný experiment je v principu správný, potřeboval by však více rozpracovat, a především lépe popsat výsledky.	

Formální a jazyková úroveň <i>Posuďte správnost používání formálních zápisů obsažených v práci. Posuďte typografickou a jazykovou stránku.</i>	podprůměrná
Grafické provedení práce je v pořádku. Práce je napsána v anglickém jazyce. V počátečních částech práce je formálně a jazykově na dostatečné úrovni. Kvalita se však postupně stále zhoršuje (pravděpodobně z nedostatku času na vypracování). Některé odkazy na obrázky jsou neplatné (např. str. 17), časté jsou překlepy, chyby ve formátování indexů a některé věty nedávají smysl. Popis veličin používaných ve vzorcích je místy nedostatečný a samostatný seznam veličin práce neobsahuje. Jen na okraj – v anglickém jazyce je správně indenter (nikoliv indentor).	

Výběr zdrojů, korektnost citací <i>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</i>	podprůměrné
--	--------------------

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.

Práce obsahuje celkem 27 citací, což na diplomovou práci není mnoho. Citace jsou z formálního hlediska v pořádku (ve formátování byly nalezeny pouze drobné nedostatky). Prameny odpovídají tématu práce. Některé informace z literatury nejsou odcitovány, ačkoliv autor v textu zmiňuje přímo autory práce (viz např. článek autorů Doenera a Nixe). Citace by nebylo obtížné doplnit a rozšířit jak v teoretické, tak v praktické části. Některé citace vedou k jiným informacím, než je zmiňováno v textu (například obr. 1.2 není z článku [2], citace [14] pojednává o wolframu, nikoliv titanu, atd.).

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.

Po stručné rešeršní části, ve které je řada nepřesností (např. nepřesné rozlišování elastické a plastické deformace) i chyb (např. rovnice 3.8)), následuje popis modelu, provedení experimentu a samotné výsledky s diskuzí. Popis studovaného materiálu (kapitola 4.1) je zmatený, je pomíchán alfa a beta titan a jejich různé orientace. Samotné výsledky popisují vliv hloubky indentace, přesnost a stabilitu simulací, vliv rychlosti indentace, tvaru hrotu a krystalové orientace Ti. Jedná se o parametry, jejichž vliv je potřeba studovat, a proto je téma práce pro vědeckou komunitu důležité. U prvních simulací není napsáno, jaký hrot je používán a která orientace alfa Ti je pro experimenty uvažována (čtenář si musí domýšlet a vyvozovat až z porovnání v dalších kapitolách), takže je obtížné zhodnotit dosažené výsledky. Výsledky maximální indentační síly v tabulce 5.1 neodpovídají hodnotám v obrázku 5.1. Názvy měření do jednotlivých hloubek nejsou zvoleny vhodně (při popisu výsledků se pletou s jevy označovanými také hloubkou). Tabulka 5.7 má popisovat vliv tvaru použitého indentoru, v tabulce ale není tvar hrotu popsán, a navíc se shoduje s první částí tabulky 5.5. Diskuze výsledků je stručná a v některých případech zavádějící (např. srovnávat tvrdost čistého Ti se slitinou Ti-24Nb-4Zr-7.9Sn, navíc připravenou speciální metodou, nedává dobrý smysl). V příloze práce je popsán zdrojový kód, který diplomant k simulacím používal.

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.

Diplomová práce pojednává o důležitém tématu simulace nanoindentace pomocí molekulární dynamiky. Pro komunitu je toto téma zajímavé a aktuální, protože může pomoci pochopit základní děje, které se při deformaci materiálu odehrávají. Diplomová práce však obsahuje řadu nepřesností a chyb, jak formálního, tak faktického charakteru, což snižuje její celkovou úroveň. Některé nedostatky pravděpodobně vznikly z důvodu časové tísně při odevzdávání a bylo by jistě možné je snadno odstranit. Množství chyb a nejasností je velkým záporům této práce. Během obhajoby by měly být zodpovězeny alespoň následující otázky:

- 1) Jaké orientace alfa a beta titanu byly pro simulace zvoleny a proč tyto konkrétní?
- 2) Kde je měřena hloubka vtisku při simulaci (hrot/substrát) a proč? Jaký vliv má místo měření na data v obr. 5.2?
- 3) Z jaké části odlehčovací části indentační křivky (obr. 5.3) byla určována směrnice a proč lineárním fitem?
- 4) Je známo, že velikost modelu (okrajové podmínky) vzhledem k velikosti vtisku má zásadní vliv na výsledky nanoindentace. Obvykle se udává, že např. maximální hloubka vtisku by neměla překročit desetinu tloušťky vzorku pro správné určení tvrdosti (u Youngova modulu ještě méně). Jak je to v případě MD a v této práci?

Předloženou závěrečnou práci hodnotím klasifikačním stupněm **E - dostatečně**.

Datum: 24.5.2024

Podpis:

