

Oponentský posudek diplomové práce pana Bc. Miroslava Lebedy „Simulace iontové implantace“.

Téma diplomové práce je velmi zajímavé a důležité pro vývoj nových materiálů s vylepšenými vlastnostmi pro různé průmyslové a biomedicínské aplikace a velmi mne osobně zaujala. Přesný nastíněný teoretický popis procesu iontové implantace může značně usnadnit odhadnout vhodné materiály a usnadnit tak následné experimenty.

Teoretická část diplomové práce je zpracována velmi detailně, čtenář je velmi dobře seznámen s teoretickými základy molekulární dynamiky a DFT metod. Je evidentní, že této části autor věnoval velkou pozornost a velmi dobře vysvětluje jednotlivé použité potenciály a jejich možné modifikace. Celá teoretická část je velmi dobře zpracována s využitím relevantních odkazů na literaturu i když v některých případech bych doporučil další odkazy na literaturu doplnit např. str. 53 u rovnice 2.57 nebo str. 63 rovnice 5.2 a zvláště str. 21, 3. řádek odspoda „(existuje řada článků, jež to potvrzuje)“, ale nejsou uvedeny. Rovněž se v textu dle mého názoru nachází poměrně mnoho syntaktických a formálních chyb např. nevhodně odkliknuté odstavce (str. 12, 24), chybějící nebo nevhodně skloňovaná slova (např. str. 13, 33, 38, 39, 42), nesprávně zapsané rovnice např. 1.5, 1.6, 1.7, 1.51, 1.113, 2.27, 2.28, 2.42, 2.47. Ještě si dovoluji poznámku k citacím, je uváděno obvykle první jméno autora resp. dvou jmen a u více autorů s et al., ale najdou se výjimky např. u Perdew, dále někde jsou uváděny roky vydání publikací sestupně (Rautray) jinde vzestupně (Vlcak), jde celkově o drobnosti, ale i tak doporučuji autorovi příště více důslednosti a zachovat jednotné schéma citací a dát velký důraz i na přesné a bezvadné formální zpracování.

V další části nás autor dle mého názoru až velmi stručně seznámí s použitými simulačními programy a zkoumanými materiály i s ohledem na detailní teoretický úvod. Dle mého názoru by bylo možno tyto kapitoly více rozvést. V následující kapitole autor popisuje velmi výstižně metodu iontové implantace a uvádí efekt iontového kanálování, na který se ve výpočtech pomocí molekulární dynamiky zaměřuje a pro jehož popis se mi tato metoda jeví jako velmi vhodná. Výsledky výpočtů ukazují, že se autor pouští na dosud ne příliš prozkoumanou oblast a v některých aspektech více v jiných méně se mu daří simulovat procesy ve shodě s experimentálními daty. Na základě prezentovaných výsledků se domnívám, že je autor velmi dobře seznámen s výpočetními metodami, je schopen fitovat potřebné parametry a optimalizovat výpočetní postupy včetně vytváření si vlastních užitečných scriptů. Je si vědom slabých stránek výpočetních simulací a dle mého názoru správně uvádí dosavadní slabiny

provedených výpočtů jako je např. zanedbání náboje iontu, což může ovlivnit hloubku jeho průniku. Dále se domnívám, vzhledem k mé zkušenosti ze simulací jiných materiálů, že by bylo vhodné se detailněji věnovat nastavení časového kroku, který bývá velmi důležitým parametrem a který je dle mého názoru v práci lehce podceněn viz. např. tvrzení na str. 12 „Jistý vliv na přesnost bude mít také volba časového kroku.“. Celkové vyznění diplomové práce považuji za velmi zdařilé a důležitý první krok k popisu iontové implantace simulačními metodami, zvláště molekulární dynamikou. Přeji autorovi úspěšné pokračování studia v nastaveném směru a dosažení plánovaných výsledků a rád bych se dotázal na následující:

Jak jsem uvedl zmínku o časovém kroku, mohl by autor více rozvést jakým způsobem byl proměnný časový krok v LAMMPS počítán? Zkoušel jste i jiné nastavení než je uvedeno ve výsledcích diplomové práce? Obvykle správná volba časového kroku má na výpočet větší vliv než zvolená vyšší teplota.

Mohl byste pohovořit více o časové náročnosti výpočtů? Na straně 67 je časová náročnost zmiňována dosti neurčitě. Zvažujete kromě využití MetaCentra využít i např. výpočetního času na IT4 v Ostravě formou grantových aplikací?

Zvažujete do budoucna, po úspěšné optimalizaci potenciálového pole MEAM, optimalizovat eventuálně MEAM i pro jiné ionty a materiály popř. jejich kombinace. Jaký je Váš pohled na složitost těchto výpočtů a co vše obnáší tato procedura?

Konstatuji, že výsledky předložené diplomové práce jsou uplatnitelné pro vývoj nových biokompatibilních materiálů s cíleně vylepšenými vlastnostmi jak pro medicínské tak průmyslové aplikace a představují tak první krok i v nastíněném plánu pro budoucí pokračování studia iontových implantací autorem. Diplomová práce svým rozsahem, obsahem a kvalitou zpracování splňuje stanovené cíle a podmínky kladené na diplomové práce a doporučuji ji k obhajobě. Diplomovou práci hodnotím známkou B.

Praha 13. 7. 2020

doc. RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.
Katedra chemické fyziky a optiky
Univerzita Karlova, Matem.-fyz. fakulta
Ke Karlovu 3
12116 Praha 2