

Oponentský posudek bakalářské práce Petra Jaroše “ Simulace růstu tenkých vrstev vysokoentropických slitin pomocí metod molekulární dynamiky“

Předkládaná práce je zaměřena na modelování vysokoentropické slitiny FeNiCoCuCrAl pomocí molekulární dynamiky, konkrétně pak na simulaci procesu nanášení tenkých vrstev z této slitiny na Si substrát pomocí metody IJD s cílem najít souvislost mezi parametry depozice a výslednou mikrostrukturou nanášené vrstvy.

V úvodní části jsou shrnuty teoretické základy molekulární dynamiky: jsou zde základy statistická termodynamiky, popis integračních algoritmů používaných v molekulární dynamice, typy potenciálů (tzv. forcefieldů) popisující vzájemné atomární interakce a metody globální minimalizace energetických funkcí. Tato část je zpracována velmi kvalitně a ukazuje, že si student dobře osvojil základy metod molekulární dynamiky a dobře se orientuje v aktuálně používaných algoritmech implementujících tyto metody.

Popis vlastních simulací je popsán v kapitole 2. Simulace byly provedeny v programu LAMMPS a zaměřily se na proces nanášení vrstev ve dvou různých stechiometriích - $\text{Al}_2\text{Co}_9\text{Cr}_{32}\text{Cu}_{39}\text{Fe}_{12}\text{Ni}_6$ a ekvatomární AlCoCrCuFeNi . Student v této části prokazuje schopnost sestavení, řešení a analýzy rozsáhlých úloh zahrnujících tisíce simulovaných atomů. Ukazuje se zde též problematická volba atomárních potenciálů, jež zásadním způsobem ovlivňuje jak výsledky simulací efektivity depozice vrstvy na substrát, tak i výslednou mikrostrukturu deponovaných vrstev. Dobré kvantitativní shody s experimentálními výsledky dosahují simulované radiální distribuční funkce získaných vrstev.

Po stránce formální i věcné je práce na vysoké úrovni. Obecně bych pouze doporučil zaměřit simulace pouze na část celého procesu přípravy vrstev, např. na simulace vlivu koncentrace Al na výsledné fázové složení slitiny. Simulace celého procesu přípravy vrstev mi přijde příliš ambiciózní vzhledem k současným možnostem molekulární dynamiky.

Celkově hodnotím práci jako velmi zdařilou a doporučuji ji k obhajobě s hodnocením **A – výborně**.

V Praze dne 31. 8. 2021

Ing. Petr Sedlák, Ph.D.

K práci mám následující otázky:

- EAM potenciál: v práci byla diskutována vhodnost atomárního potenciálu navrženého v ref. [35] a diskutován problém s nezabudováním atomů Fe. Byl použitý potenciál z ref. [35] testován pouze při simulacích objemových vlastností slitiny FeNiCoCuCr nebo byl i testován k simulaci povrchu této slitiny? Lze obecně EAM potenciály optimalizované k simulaci objemových vlastností použít k simulaci povrchu?
- Si substrát: na základě čeho byla zvolena tloušťka Si substrátu v simulacích. V simulovaných systémech dominují atomy Si substrátu nad atomy nanášené vrstvy. Zůstává během simulací Si substrát stále krystalický?
- Krystalinita výsledných struktur: v práci je porovnávána výsledná radiální distribuční funkce (RDF) s RDF FCC a BCC struktur. Lze však nějak charakterizovat míru

krystalinity výsledné mikrostruktury? Poloha prvního maxima u RDF by mohla dobře odpovídat prvnímu maximu u BCCa FCC pouze na základě velikosti atomárních poloměrů a toho, že obě struktury, FCC a BCC, odpovídají těsnému uspořádání atomů.

Formální nedostatky:

- Srozumitelnost grafů Obr. 2.17 (c), (d), 2.28 (b).