Posudek vedoucího diplomové práce na téma

Studium slitin s vysokou entropií HfNbTaTiZr

vypracované Bc. Štěpánem Nekvindou

Diplomová práce Bc. Štěpána Nekvindy se zabývá teoretickým studiem slitin s vysokou entropií, se zaměřením na pětiprvkovou slitinu HfNbTaTiZr. Fenomenologický teoretický popis je zaměřen na určení výpočtu termodynamicky rovnovážného stavu v závislosti na teplotě a koncentraci jednotlivých komponent, za předpokladu, že prvky jsou umístěny v pravidelné mřiži (např bcc, fcc) a pozice jednotlivých prvků je náhodná. Vlastní výpočet hledání rovnovážného stavu a fázových přechodů je pak založen na numerickém hledání minima Gibbsovy volné energie.

První část práce je úvod do tematiky slitin s vysokou entropií, následován fenomenologickým popisem hledání termodynamické rovnováhy pomocí hledání minima Gibbsovy energie. Obě tyto části jsou jasně a přehledné zpracovány. Práce pokračuje vlastními výpočty určování termodynamické stability slitin, nejprve dvou-prvkových a poté finální pětiprvkové slitiny HfNbTaTiZr. Na práci cením, že aplikant k výpočtu nepoužil komerční software (např. Calphad, OpenCalphad), ale výpočet si naprogramovat sám. Originální část práce je výpočet „super-stabilních slitin", určující koncentraci jednotlivých komponent (pro každou teplotu vzlášť), pro které Gibbsova energie nabývá svého globálního (nikoliv lokálního) minima (Obr. 26-28). Myslím, že tuto část by v budoucnu bylo vhodné dokončit a opublikovat.

Na druhou stranu, simulace pro nedostatek času nejsou dokončeny. Např. bylo by zajímavé dopočítat závislot globálního minima pro pozměněné složení slitiny prvky či určení teplot fázových přechodů pro pevné koncentrace prvků.

Na této diplomové práci bych rád vyzvedl, že tato teoretická tematika je nová v naší pracovní skupině. Aplikant načetl značné množství literatury k tomuto tématu a prokázal samostatnost při jak při orientaci v této tematice, tak při návrhu modelu a jeho řešení. Práci hodnotím jako zdařilou. Přesto, pro jeji nedokončenost, ji navrhuji ohodnotit zámkou dobře – C.

V Praze 1.9.2021

Mgr. Jaroslav Hamrle, Ph.D.
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT
115 19 Praha 1