Posudek vedoucího práce k diplomové práci Miroslava Lebedy

S Miroslavem Lebedou spolupracuji od jeho bakalářské práce, kde jsme se věnovali jak experimentálním technikám, tak počítačovým simulacím v rámci DFT teorie na systému $SrTiO_3$. V následujícím roce jsme se již zaměřili na prohloubení zkušeností s DFT simulacemi. Pro diplomovou práci jsme se rozhodli vzít nové téma, které pokračuje v oblasti atomistických počítačových simulací, ale je zaměřeno na využití molekulární dynamiky.

Téma práce „Simulace iontové implantace", postavilo diplomanta před nelehkých úkol, začít s novou problematikou. Nejde jen o nový koncept simulací, ale také o nový materiál a metodu modifikace jeho povrchu. Téma je částečně ve stylu „proof of concept" či kam až jsme se schopni dostat, připravuje živnou půdu pro disertační práci a zvyšuje uplatnění diplomanta ve vědeckých týmech.

Práce je napsaná v českém jazyce a obsahuje z mého pohledu velmi dobře srozumitelný úvod k atomistickým počítačovým simulacím, který může sloužit k pedagogickým účelům, jako úvod do problematiky. Zejména část věnovaná nevazebnému potenciálu typ EAM (Metoda vloženého atomu) je myslím v českém jazyce ojedinělá. Své zkušenosti s DFT výpočty diplomant uplatnil při optimalizaci a stanovení parametrů potenciálu MEAM pro systém Ti-N. Ač v rámci diplomové práce nebyl prostor pro testování tohoto vlastního potenciálu, zkušenosti zde získané, přinesly přínosný vhled do problému optimalizace potenciálního pole a budou zajisté uplatněny v následujících letech.

Během řešení se diplomant sám rozhodl pro přechod od navrženého, pro něj dobře známého, simulačního prostředí v programovém balíku Materials Studio k programu LAMMPS, který nabízel více možností v nastavení simulací, avšak za cenu horšího uživatelského prostředí. Sám se s tímto programem seznámit na takové úrovni, že byl schopen napsat vlastní skripty pro simulaci iontové implantace. Pro získání hloubkových průběhů koncentrace dusíku v titanové matrici z nasimulovaných struktur rozšířil své programovací dovednosti v programu Python.

Bohužel se nám, přes veškerou snahu, nepodařilo zajistit instalaci programu LAMMPS na výpočetní server Hyperion a veškeré výpočty probíhali na osobních počítačích a později také na výpočetních serverech Metacentra. Z tohoto důvodu nejsou nasimulované průběhy srovnané s experimentálními daty, které by vyžadovali větší výpočetní kapacity, ale jen z dobře zavedeným programem TRIM. Průběh práce byl také z komplikován probíhající koronakrizí a omezení osobních konzultací. O píli a zájmu studenta svědčí i fakt, že jsme si během této krize vyměnili téměř 200 emailů.

O původnosti a rozsahu práce mimo jiné svědčí okomentované přiložené skripty pro programy Materials Studio, LAMMPS a Python. Celá práce má včetně příloh 109 stránek a obsahuje 133 citací. Svým rozsahem obhajovaná práce výrazně převyšuje standard a hodnotím ji stupněm A - výborně.

V Praze dne 17. července 2020

Ing. Jan Drahokoupil, Ph.D.