

## UYJÁDŘENÍ VEDOUČÍHO BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

*Název práce:* Simulace rustu tenkých vrstev vysokoentropických slitin pomocí metod molekulární dynamiky

*Jazyk práce:* český

*Autor práce:* Petr Jaroš

*Škola:* ČVUT v Praze, FJFI

*Studijní program:* Aplikace přírodních věd

*Studijní obor:* Inženýrství pevných látek

*Akademický rok:* 2020/2021

Slitiny s vysokou entropií (high entropy alloys, HEAs) složené typicky z přibližně ekvimolárního množství pěti a více kovových prvků patří v současnosti ke skupině materiálů, které jsou intenzivně studovány díky svým potenciálně unikátním fyzikálním vlastnostem, zahrnujícím například, v závislosti na konkrétním složení, odolnost vůči vysokým teplotám, nízkou tepelnou vodivost, vysokou odolnost vůči radiačnímu poškození či velmi nízkou permeabilitu pro plynné a kapalné substance. Uvedené vlastnosti lze s výhodou využít pro přípravu tenkých ochranných vrstev sloužících jako například tepelné, mechanické či radiační bariéry.

Úspěšné naplnění uvedeného cíle je podmíněno volbou vhodné depoziční metody umožňující přípravu geometricky uniformních vrstev za současného zachování stechiometrie výchozí slitiny. Předkládaná bakalářská práce je věnována teoretickým simulacím takové depoziční metodou molekulární dynamiky (MD). Reálným vzorem k provedeným simulacím splňujícím výše uvedené požadavky je nová depoziční metoda IJD (ionized jet deposition) implementovaná v laboratoři Katedry inženýrství pevných látek FJFI ČVUT v Praze (KIPL FJFI).

V rámci práce na bakalářském projektu byly autorem realizovány rozsáhlé atomistické simulace depozičního procesu přípravy tenkých vrstev HEA o prvkovém složení Fe-Ni-Co-Cu-Cr-Al ve dvou stechiometriích: základní ekviatomární a neekviatomární o složení  $\text{Al}_2\text{Co}_9\text{Cr}_{32}\text{Cu}_{39}\text{Fe}_{12}\text{Ni}_6$ , korespondující s již publikovanými výsledky jiných výzkumných skupin. Simulace byly provedeny v prostředí programu LAMMPS, který poskytuje možnost využití tzv. EAM (embedded atoms model) meziatomových potenciálů vhodných pro popis víceprvkových kovových systémů.

V průběhu řešení bakalářského projektu projevila Petr vysokou péči, teoretickou zdatnost a programátorskou zručnost při přípravě simulačních skriptů a dosáhl řady cenných dílčích výsledků a metodických poznatků. Ty bezpochyby najdou uplatnění v dalším vývoji, verifikaci a následné aplikaci zvoleného simulačního postupu k predikci strukturního chování (a potenciálně i dalších fyzikálních vlastností) tenkých vrstev HEA slitin studovaných v rámci výzkumných projektů na KIPL FJFI.

S prací Petra Jaroše na bakalářském projektu jsem jako vedoucí práce velmi spokojen. Všechna zásadní teoretická východiska, aplikovaný postup, dosažené výsledky a jejich diskuze jsou v přehledném a logickém členění popsány v textu předložené bakalářské práce. Jelikož práce obsahuje všechny požadované náležitosti a naplňuje cíle stanovené v zadání, navrhuji – s přihlédnutím též k ostatním výše uvedeným aspektům - **hodnotit bakalářskou práci Petra Jaroše klasifikačním stupněm A – výborný.**

Praha, 28/8/2021

doc. Ing. Ladislav Kalvoda, CSc.,  
vedoucí práce

