

Posudek vedoucího bakalářské práce

Název práce: Předpověď struktury vrstev ZnO vytvářených atom po atomu pomocí klasické molekulární dynamiky

Autor práce: Kamila Hantová

Vedoucí práce: doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.

Pracoviště: Katedra fyziky, Fakulta aplikovaných věd, Západočeská univerzita

Jde o teoretickou práci popisující růst tenkých vrstev ZnO pomocí klasické molekulární dynamiky založené na empirickém interakčním potenciálu. Použitý simulační protokol v rámci možností přesně reprodukuje to co se děje při experimentu, a v minulosti byl na KFY úspěšně použit pro jiné materiály. Pro ZnO (nebo jakýkoliv jiný materiál mající wurtzitovou krystalovou strukturu) byl použit poprvé, a ani v literatuře to není časté.

Součástí práce je (i) důkladné testování empirických interakčních potenciálů pro ZnO nalezených v literatuře a výběr jednoho z nich, (ii) zvládnutí simulací růstu vrstev včetně porozumění roli jednotlivých parametrů simulací a nalezení vhodných hodnot těchto parametrů a (iii) provedení dvou sérií simulací v závislosti na energii přilétajících částic: růst na krystalickém substrátu (tj. jen růst) a na amorfním substrátu (tj. růst plus nukleace).

Považuji za důležité že jde o samostatnou práci (přirozeně využívající počítačových programů napsaných vedoucím práce v minulosti), o simulace které by jinak nebyly provedeny, nikoliv "jen" o přihlížení / pomoc tak jako tak probíhajícímu projektu vedoucího nebo doktoranda. Práce není rutinní, bylo nutné překonat některé metodologické překážky které se při modelování oxidů jiných kovů nevyskytly. Výsledky jsou dostatečně zajímavé. Nabízí se řada směrů jak je rozvinout (od využití nebo vývoje ještě lepšího interakčního potenciálu až po složitější energiové distribuční funkce přilétajících atomů), což by ale bylo nad rámec bakalářské práce.

Práci doporučuji k obhajobě. Na základě porovnání s jinými mnou vedenými pracemi navrhuji klasifikaci **velmi dobře**.

V Plzni 10.6.2019

doc. Ing. Jiří Houška, Ph.D.

