

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: **Adam Sikora**

Název práce: **Počítačové simulace charakteristik desorpce kovů z povrchu Si(111)**

Studijní program a obor: **Fyzika / obecná fyzika**

Rok odevzdání: **2014**

Jméno a tituly oponenta: **Mgr. Josef Mysliveček, Ph.D.**

Pracoviště: **KFPP MFF UK**

Kontaktní e-mail: **josef.myslivecek@mff.cuni.cz**

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky oponenta:

V předložené bakalářské práci se autor zabývá otevřenou otázkou teorie růstu tenkých vrstev - jaké atomární procesy jsou zodpovědné za desorpci nultého řádu pozorovanou při desorpci kovů z povrchu polovodičů. Řešení hledá pomocí počítačového Monte Carlo modelu desorpce, který pro výpočet difuzní energie atomů uvažuje počáteční i koncovou polohu atomu. Autor dochází k závěru, že tento model desorpci nultého řádu neumožňuje a pro její vysvětlení je pravděpodobně nutné kromě povrchové difuze uvažovat i jiné atomární procesy.

Práce je prezentována systematicky a přehledně. Autor vytvořil a popsal počítačový program pro simulaci Monte Carlo, demonstroval jeho funkčnost na řadě kvalitativních i kvantitativních příkladů a popsal výsledky snahy o získání desorpčních spekter nultého řádu. V práci s modelem a pro posuzování jeho výstupů si autor dobře uvědomil a demonstroval možnosti počítačové simulace poskytovat široké spektrum výstupů – morfologii vrstvy, statistiku morfologie nebo četnosti různých desorpčních událostí a snažil se tyto informace využít pro diskusi fyzikální podstaty simulovaných jevů. Autor prokazuje znalost aktuální literatury a práci dobře zasazuje do aktuálního kontextu. Jediný zřejmý nedostatek je chybějící detailní popis uvažovaných atomárních dějů v modelu včetně vztahů pro výpočet aktivačních energií přeskoků pro různé počáteční a koncové pozice atomů.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Otázka 1: V kapitole 3.5 (Optimalizace) zmiňujete, že při každém kroku simulace se vypočítávají sousední polohy určitého atomu. Tradičně se sousední polohy atomů vypočítávají před začátkem simulace a ukládají se pro použití během simulace jako neměnné pole ukazatelů. V čem je Váš přístup výhodnější?

Otázka 2: V kapitole 5.5 (Hledání podmínek pro nultý řád desorpce) uzavíráte, že Váš model neposkytuje výstup odpovídající nultému řádu desorpce. Hlavním důvodem je absence strmého poklesu desorpční rychlosti na konci desorpce. Rád bych se zeptal, jak je strmost poklesu desorpční rychlosti ovlivněna FFT filtrací hrubých dat z modelu, kterou popisujete v kapitole 5 (Zkoumání desorpčních spekter) a na Obr. 5.1?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

V Praze 9. 6. 2014

Josef Mysliveček