

POSUDEK VEDOUCÍHO BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Autor práce: **Martin Matula**

Název práce: **Simulace krystalizačního chování amorfních látek**

Předložená bakalářská práce se zabývá simulací třech typů krystalizačního chování ve vzorcích různých velikostí a porovnáním takto stanovených průběhů krystalizace s kinetickými modely používanými v termické analýze. V práci je uvedeno celkem 12 simulací provedených v programu Simucryst 3D a jejich vyhodnocení. Při simulaci byl simulován růst krystalů z již preexistujících nukleí za neizotermních podmínek na základě předem dané teplotní závislosti rychlosti růstu krystalů a jejich hustoty. Z pohledu mechanismu krystalizace byly analyzovány tři varianty, a to růst krystalů v objemu vzorku, růst krystalů pouze z povrchu vzorku a kombinace růstu objemových i povrchových krystalů. Z hlediska tvaru a velikosti vzorku byly zvoleny objemové vzorky ve tvaru krychle, kvádrů o poloviční výšce a plochého vzorku s desetinou výškou. Dále byla provedena simulace růstu krystalů v tenkém filmu. Pro všechna simulovaná data byly nalezeny parametry optimalizovaného kinetického modelu JMA. Avramiho parametr získaný optimalizací byl diskutován z pohledu teoretické dimenzionality růstu krystalů a reálně použitého mechanismu růstu krystalů v kombinaci s tvarem vzorku.

Bakalářská práce je srozumitelná, dobře logicky členěná, po stránce jazykové a grafické odpovídá standardům pro tento typ práce. Přestože je práce stručná, obsahuje zajímavé výsledky a závěry, které dávají nahlédnout více do pozadí kinetických modelů používaných pro popis krystalizace. Jedinou výhradu je třeba vznést u citací, které nejsou v některých případech uvedeny v úplné formě.

Práce splňuje zadání, doporučuji ji k obhajobě a hodnotím známkou

velmi dobře.

V Pardubicích dne 8.8.2017



Ing. Jana Shánělová, Ph.D.

vedoucí bakalářské práce