

ZADÁNÍ
BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Akademický rok: 2022/2023

Ústav:	Ústav fyzikální elektroniky
Student:	Tomáš Rottenberg
Program:	Fyzika – nanotechnologie
Specializace:	Fyzika – nanotechnologie

Ředitel ústavu PŘF MU Vám ve smyslu Studijního a zkušebního řádu MU určuje bakalářskou práci s názvem:

Název práce:	Atomistické modelování amorfních materiálů s pomocí strojového učení
Název práce anglicky:	Machine learning-assisted atomistic modelling of amorphous materials
Jazyk závěrečné práce:	angličtina

Oficiální zadání:

Tato práce bude zkoumat rychlost a přesnost strojově učených interatomárních potenciálů pro molekulární dynamiku a jejich možné využití na modelování atomární struktury amorfních materiálů a výpočet jejich mechanických vlastností. Interatomární potenciál bude vytvořen na základě již existujících přesných ab initio výpočtů energií, sil a pnutí pro malé amorfní modely spočítané s pomocí teorie funkcionálu hustoty. Cílem práce je kriticky zhodnotit vybranou metodu interatomárních potenciálů a její použitelnost při modelování amorfních materiálů a tedy zhodnotit možnosti modelování mnohem větších systémů při lineárním škálování a zachování přesnosti porovnatelné s ab initio výpočty.

Vedoucí práce:	Mgr. Pavel Ondračka, Ph.D.
Konzultant:	prof. Mgr. Petr Vašina, Ph.D. doc. Mgr. Pavel Souček, Ph.D.
Datum zadání práce:	27. 9. 2022
V Brně dne:	23. 5. 2023

Zadání bylo schváleno prostřednictvím IS MU.

Tomáš Rottenberg, 29. 11. 2022

Mgr. Pavel Ondračka, Ph.D., 1. 12. 2022

RNDr. Luboš Poláček, 8. 12. 2022