

# Oponentský posudek disertační práce

Autor disertační práce: **Ing. Tomáš Kozák**  
Fakulta aplikovaných věd  
Západočeská univerzita v Plzni

Téma disertační práce: **Modelling of high-power impulse magnetron discharges for thin film deposition**

## Struktura práce

Předložená disertační práce má rozsah 100 stran a vedle základního textu obsahuje značné množství grafů, několik tabulek a 11 stran literatury. Text práce je rozdělen do 5 kapitol.

Úvodní část práce podává přehled počítačových modelů plazmatu (fluidní, částicový, hybridní, globální) se zaměřením na současné metody modelování procesů v magnetronech, včetně uvedení potřebných vstupních empirických vztahů a materiálových konstant.

Těžiště práce se soustřeďuje do kapitoly 4 (realizace modelu) a 5 (analýza dosažených výsledků). Těmto kapitolám předchází stručná formulace cílů disertace.

## 1. Zhodnocení významu disertační práce pro obor

Téma disertační práce představuje aktuální oblast výzkumu, metoda HiPIMS (High Power Impulse Magnetron Sputtering) patří k poměrně novým a rychle se rozvíjejícím technikám magnetronového naprašování. Práce vznikala na pracovišti, které má v této oblasti výzkumu mezinárodní renomé.

Hlavním výsledkem práce je komplexní matematický model procesů v impulzních magnetronech s vysokým pulzním výkonem. Principiální správnost modelu byla potvrzena konfrontací jeho výstupů s experimentálně získanými údaji. Model vytvořený autorem umožňuje lépe chápat vliv jednotlivých faktorů na procesy probíhající v plazmatu a zároveň poskytuje přijatelné kvantitativní odhady i u veličin, které jsou nedostupné přímému měření. Model může napomoci k nalezení optimálního nastavení vstupních parametrů reálných procesů.

Práce je mj. i užitečným rešeršním zdrojem. Autorovi se podařilo na jednom místě soustředit množství potřebných experimentálních dat, empirických a teoretických vztahů a modelovacích technik. Data mohou být využita k dalšímu rozvoji původního modelu nebo k tvorbě modelů nových.

## 2. Vyjádření k postupu řešení problému, použitým metodám a splnění určeného cíle

Autor formuloval cíle své práce v pěti bodech.

- 1) Matematický návrh nestacionárního modelu impulsního magnetronového naprašování, který by komplexně zahrnoval procesy od výboje po transport materiálu na substrát
- 2) Shromáždění dostupných experimentálních dat pro atomy pracovního plynu (Ar) a rozprašovaného terčíku (Cu)
- 3) Porovnání modelových výpočtů s experimentálně získanými daty
- 4) Využití modelu ke studiu vlivu vstupních parametrů experimentálního uspořádání na procesní a depoziční charakteristiky
- 5) Porovnání modelu se stacionárním modelem, vyvinutým dříve na domovském pracovišti.

Všechny cíle se podařilo naplnit. V počáteční fázi autor provedl k tématu rozsáhlou rešerši, v práci je citováno 110 publikací, vesměs z poslední doby. Následoval návrh samotného modelu. Hlavním záměrem byl vývoj relativně jednoduchého modelu, vycházejícího ze stávajících tzv. globálních modelů nestacionárního nízkoteplotního plazmatu a z analytických stacionárních modelů. Oproti již existujícím modelům provedl autor některá významná doplnění. V první řadě rozdělil celou oblast magnetronu na dvě oblasti podle charakteru uvažovaných dějů. Vedle termalizovaných elektronů a atomů zahrnul do modelu i rychlé sekundární elektrony a rychlé atomy a ionty odprašovaného materiálu, přičemž charakteristiky rychlých částic určil předem ze simulací Monte Carlo. V tzv. presheathu uvažoval nenulový potenciálový spád a výbojový proud nebyl samostatným vstupním parametrem, ale byl určován výpočtem.

Výstupy modelových výpočtů jsou prezentovány v grafické formě a podrobně fyzikálně zdůvodňovány. Model autorovi umožnil systematicky studovat vliv jednotlivých vstupních parametrů na probíhající procesy, především pak na normalizovanou depoziční rychlost. Pokud byla k dispozici experimentální data, byly diskutovány shody a odchylky numerických výpočtů a měření.

Nastudování současného stavu vývoje teorie, shromáždění potřebných materiálových charakteristik a návrh a realizaci komplexního modelu zvládl autor za necelé tři roky, což je vzhledem k dosaženým výsledkům doba velmi krátká.

## 3. Stanovisko k výsledkům disertační práce a k původnímu konkrétnímu přínosu předkladatele disertační práce

Ačkoli model fyzikálních dějů při magnetronovém naprašování obsahuje nezbytná zjednodušení a spoléhá se na mnoho empirických vstupů, je kvalitativní a částečně kvantitativní shoda výstupů modelu s dostupnými experimentálními výsledky velmi dobrá. Model např. správně vystihuje na první pohled neočekávaný, ale experimentálně potvrzený pokles teploty elektronů s rostoucím napětím. Potvrzuje rovněž, že zvyšování hustoty absorbovaného výkonu vede na jedné straně k žádoucímu zvyšování ionizace odprašovaného materiálu, na straně druhé je ale doprovázeno nežádoucím snižováním normalizované depoziční rychlosti. Jiný zajímavý výsledek se týká vlivu magnetického pole: Pro daný absorbovaný výkon vede nižší hodnota pole k vyššímu stupni ionizace a vyšší normalizované rychlosti depozice. Model umožňuje i studium vlivu podmínek, které dosud nebyly experimentálně realizovány. Zajímavé je v této souvislosti zjištění, že průběh napěťového pulzu při daném výkonu má nezanedbatelný vliv na normalizovanou depoziční rychlost a na



podíl iontů v toku na substrát. Model se tak jeví jako vhodný nástroj k predikci optimální volby parametrů depozičního procesu.

V budoucnu může být model dále upřesňován a doplňován, např. prostřednictvím detailnějšího vystižení geometrie, realističtější aproximaci průběhu magnetického pole apod. Autor plánuje podstatné doplnění modelu o chemické reakce rozprašovaného materiálu se složkami pracovního plynu. Tím by se podařilo obsáhnout i technologicky významné procesy depoziace nitridů a oxidů.

#### 4. Vyjádření k systematicce, přehlednosti, formální úpravě a jazykové úrovni disertační práce

Práce je psána v anglickém jazyce. Pokud mohu jazykovou úroveň posoudit, je standardní a odpovídá úrovni příspěvků v odborných časopisech.

Formální úprava práce je velmi dobrá, přestože text obsahuje množství komplikovaných matematických vztahů a je doprovázen řadou grafů. Připomínky mám k citacím prostřednictvím uvádění jména autorů a roku vydání. Stručnější a přehlednější by byly odkazy ve formě pořadových čísel v hranatých závorkách.

Zejména oceňuji tu část práce, ve které se autor zabývá matematickou stránkou svého modelu. Popis je stručný a přitom výstižný, s četnými odkazy na literaturu.

Poněkud méně přehledná (či méně čtivá) se mi jevila ta část práce, která se zabývá výsledky modelových výpočtů a jejich konfrontací s experimentálními daty. V grafech a v komentářích k nim je podáváno vždy maximální množství informace, takže mi občas dělalo potíže se v nich orientovat. Ne vždy bylo možné dodržet, aby graf a k němu příslušný komentář byly na jedné stránce.

V zápisu rovnic se občas vyskytují některé drobné chyby a překlepy. Níže uvádím nejasnosti, které mám u některých vztahů, překlepy vypisuji zvlášť.

Str. 20, rovnice 2.17: Na rozdíl od v práci používaného normování rozdělovacích funkcí na hustotu částic (viz 2.13) jsou funkce v tomto zápisu normovány na jednotku.

Str. 32, rovnice 4.8b: Neměl by být na pravé straně rovnice ještě faktor  $\exp(-l/\lambda_l^1)$ ?

Str. 40, rovnice 4.45: Potenciálový spád  $U_1$  se týká oblasti I. Neměla by proto být ve členu  $n_{gi}^{II} eU_1 / kT$  hustota  $n_{gi}^{II}$  nahrazena hustotou  $n_{gi}^I$ ?

Str. 17, rovnice 2.9: Nepovedený zápis derivací v Boltzmannově rovnici

Str. 39, rovnice 4.38, a str. 40, rovnice 4.46:  $\tilde{S}_{mf,b} \rightarrow \tilde{S}_{gf,b}$ ,  $\sigma_{mg,ct} \rightarrow \sigma_{gg,ct}$ ,  $\sigma_{mm,ct} \rightarrow \sigma_{gm,ct}$ ?

Str. 41, rovnice 4.51: Opačné znaménko u členu  $n_c^1 eU_1 / kT_c^1$ ?

Str. 51, graf 4.5: Na pravé svislé ose chybí číselné údaje.

#### 5. Vyjádření k publikacím studenta

Autor uvádí k tématu disertační práce osm konferenčních příspěvků, přičemž v šesti je prvním autorem. Publikace v impaktovaných časopisech jsou čtyři. Dvě již vyšly tiskem, jedna byla přijata k publikování, jedna je v recenzním řízení. Ve všech je hlavním autorem, v jedné dokonce autorem jediným. Jak je z kontextu práce patrné, autor se tématem disertace zabýval teprve od roku 2010. Vzhledem k této době považuji v průměru čtyři publikace za rok za dostatečné.

## 6. Jednoznačné vyjádření oponenta, zda doporučuje či nedoporučuje disertační práci k obhajobě

Téma disertace je velmi aktuální, kvalitativní a částečně kvantitativní shoda navrženého modelu s experimentálně získanými daty velmi dobrá. Vysoká odborná úroveň práce je nepřímo potvrzena publikováním jejích dílčích výsledků v renomovaných vědeckých časopisech. Práci doporučuji k obhajobě.

### Otázky k obhajobě

Prosím o stručné shrnutí, jaké výhody a nevýhody má naprašování v uspořádání HiPIMS v porovnání s původním dc magnetronem.

Byla zjišťována citlivost modelu k některým méně jistým vstupním empirickým konstantám a formulím? Nemám nyní na mysli „volné“ parametry  $r$ ,  $s$  a  $\omega\tau$ . Např. empirický vztah 2.4 (str. 11 nebo 49<sub>2</sub>) pro sekundární emisi elektronů je v publikaci A. Anders, Appl. Phys. Lett. 92 (2008), 201501 psán v podobě  $\gamma = 0.032 \times (0.78 E_g - 2E_w)$ .

Grafy 5.1, 5.2 naznačují možnou závislost koeficientu  $r$  zpětného zachytu sekundárních elektronů na napětí a tlaku. Bylo by možné tento koeficient odhadnout z předchozích MC simulací rychlých elektronů?

V Č. Budějovicích 10.1.2013

  
Doc. RNDr. Josef Blažek, CSc.



## Posudek oponenta na doktorskou disertační práci

Ing. Tomáše Kozáka

### “Modelling of high-power impulse magnetron discharges for thin film deposition”

Předložená práce pana Ing. Tomáše Kozáka, doktoranda studijního programu Aplikované vědy a informatika studijního oboru Fyzika plazmatu a tenkých vrstev na fakultě aplikovaných věd Západočeské univerzity v Plzni je věnována velmi aktuální problematice, studiu nového technologického procesu HiPIMS - vysokovýkonovému pulznímu magnetronovému naprašování. Tato technologie je výrazným rozšířením klasického magnetronového naprašování s řadou nových možností. Metodikou práce je počítačové modelování ve velmi těsné vazbě na experimentální výsledky. Téma je důležité z hlediska základního i aplikovaného výzkumu a praxe a zvolená metodika řešení je plně adekvátní pro zadaný úkol.

Cílem disertační práce bylo vybudovat komplexní model magnetronové deposice tenkých vrstev a s jeho pomocí diskutovat fyzikální procesy, které při vysokovýkonové pulzní deposici probíhají. Ihned v úvodu mého posudku mohu konstatovat, že dle mého mínění byl tento cíl v plném rozsahu splněn.

Předložená práce má klasickou strukturu disertačních prací: uvedení přehledu dosavadních znalostí jak z oblasti pulzní magnetronové deposice tak i technik počítačového modelování (kapitola 2), naformulování cílů práce (kapitola 3), popis vyvinutého nestacionárního modelu magnetronové deposice (kapitola 4), shrnutí dosažených výsledků a jejich diskuse (kapitola 5), závěr a přehled literatury (kapitoly 6 a 7). Lze konstatovat, že všechny uvedené oblasti disertační práce jsou vyvážené a velmi bohaté na materiál - např. přehled použité literatury obsahuje 109 citací včetně prací nejnovějších, dále 4 vlastní publikace uchazeče (resp. tři a jednu práci zaslanou do tisku) v kvalitních časopisech a 8 příspěvků autora na konferencích. Podobně bohaté jsou i další kapitoly disertační práce. Též po stránce formální je práce vypracována vzorně - je téměř bez překlepů a s vynikající grafickou úpravou.

Přes to, že práce se mi jako celek velmi líbila, mám k ní dvě otázky, resp. jednu otázku k vlastní práci a jednu otázku navíc do diskuse:

- Jak je v práci na str. 40 uvedeno, při formulování rovnic modelu byla využita drift-difúzní aproximace. Na našem pracovišti jsme vyvíjeli hybridní model interakce nízkoteplotního chemicky aktivního plazmatu s povrchy vnořených pevných látek (sond při sondové diagnostice plazmatu resp. substrátů v plazmatických technologiích) a v jeho spojitě části jsme též využívali drift-difúzní aproximaci. Při srovnání výsledků našeho modelování s experimentem jsme zjistili, že zatímco model byl velmi přesný v oblasti středních a vyšších tlaků, pod 100 Pa již začaly být pozorované určité odchylky a pod 30-50 Pa model přestal být téměř použitelný. Toto chování bylo pozorováno jak v plazmatu bez přítomnosti magnetického pole tak i s tímto polem. Chápu, že geometrie magnetronu se výrazně liší od námi používaných geometrií, přesto ale mám dotaz, zda v

oboru tlaků, kde byl model vyvinutý v disertační práci aplikován, je použití drift-difúzní aproximace oprávněné.

- Druhá otázka se přímo netýká metodiky použité v předložené práci, je určena pro obecnou diskusi.

Autor v úvodní partii práce (kapitola 2) uvádí přehled metodik modelování - od nejpřesnějších kinetických modelů přes fluidní modely až k modelům globálním s tím, že jím vyvinutý model patří do poslední kategorie. Chápu, že modely tohoto typu přinášejí určité výhody - na prvním místě bych uvedl vysokou efektivitu modelu, která do něj umožňuje zavést řadu procesů a mechanismů, které by u složitějších modelů vedly k neřešitelným obtížím. Toho též autor plně využil a do svého nestacionárního dvouzónového modelu zahrnul různé fyzikální procesy, jež mu umožnily získat velmi dobrou až výbornou shodu modelu s experimentem.

Můj dotaz se týká toho, zda omezení nutná v globálních modelech (rozčlenění spojité pracovní oblasti na jednotlivé zóny, dělení částic na pomalé a rychlé, ...) nevnášejí přece jen pozorovatelné nepřesnosti do získaných výsledků a zda použití modelů s vyšší vypovídací schopností (zde mám na mysli především kinetické modely) by tyto nepřesnosti neodstranilo. Je mi jasné, že současný stav používaného hardware a i software vybudování tak komplexního kinetického modelu zatím neumožňuje. Má otázka se proto týká toho, co si autor myslí o budoucím rozvoji modelování v jím studované oblasti, zda vývoj půjde spíše cestou dalšího zpřesňování globálních či fluidních modelů, nebo spíše cestou modelů čistě částicových či hybridních částicově-fluidních.

Závěrem posudku mohu konstatovat, že práce předložená panem Ing. Tomášem Kozákem řeší aktuální problém adekvátními metodami, má vynikající vědeckou úroveň a přináší řadu nových poznatků. Stanovené cíle práce splnila. Doktorand prokázal schopnost samostatné vědecké práce jak předloženou disertační prací tak i množstvím publikací v kvalitních časopisech a sbornících mezinárodních konferencí.

Předloženou disertační práci pana Ing. Tomáše Kozáka doporučuji k obhajobě a navrhuji v případě jejího úspěšného obhájení udělit autorovi akademicko-vědecký titul doktor.

Praha, 19. 1. 2013



Prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc.

Matematicko-fyzikální fakulta

Univerzity Karlovy v Praze