

Oponentský posudek na diplomovou práci Michala Šuly „Monte Carlo simulace napouštění reaktivního plynu pro reaktivní magnetronové naprašování vrstev“

Během posledních několika let šikovní lidi na naší katedře vyvinuli nový systém kombinující reaktivní magnetronové naprašování s vysokovýkonovým pulsním módem. Tento systém je v lecčems jednodušší než dosud vymyšlené přístupy k vysokovýkonovému reaktivnímu naprašování, a tím má spolehlivější provoz, jehož výsledkem je řádové zvýšení depoziční rychlosti kvalitních densifikovaných stechiometrických vrstev oxidů, nitridů a dokonce oxynitridů s laditelným složením anionů. Klíčovou rolí v systému hraje způsob napouštění reaktivního plynu trubičkami před terčem. Proto Michalova práce má za úkol první krok k detailnímu pochopení napouštění reaktivního plynu do komory pomocí numerických simulací, a to jak pro homogenní tlak pracovního plynu bez výboje napouštění závisí na různých parametrech.

Michal práci napsal jasně, stručně a přehledně, až na občasné překlepy, drobné gramatické chyby a nepřesnosti, které jsem spolu s drobnými náměty napsal do přílohy. Po úvodu, ve kterém dobře motivuje numerické simulace, následuje přehledová kapitola 2, v níž Michal přehledně diskutuje vlastnosti a problémy reaktivního naprašování (možná bych tady doporučil zmínku též o vysokovýkonovém pulsním módu) a metody Monte Carlo: obecný princip, důležitost a vlastnosti generátoru náhodných čísel a konečně použití metody Monte Carlo pro naprašování tenkých vrstev v programu TRIM a jeho derivátech.

Jádro práce tvoří kapitoly 4 a 5. V kapitole 4 Michal formuluje úlohu a její předpoklady, popisuje uvážené fyzikální procesy (srážky a interakce s povrchy) a jejich zahrnutí do algoritmu a konečně vstupy a výstupy programu. V kapitole 5 pak Michal diskutuje výsledky. Přehledně uvádí závislosti napouštění reaktivního plynu, konkrétně kyslíku, na základních parametrech: směru výpustí, tlaku, umístění trubiček a průtoku. Závislosti, které získal, jsou fyzikálně rozumné a Michal je dobře komentuje. Kladně hodnotím také to, že Michal naznačuje další směry výzkumu: na str. 19 vliv přítomnosti plazmatu a na str. 37 závislost tlaku reaktivního plynu ve výpustí na průtoku.

K obhajobě mám následující otázky:

1. Na str. 27 píšeš, že klesající účinný průřez s rostoucí relativní rychlostí částic vede k rychlejšímu růstu viskozity s teplotou. Můžeš vysvětlit, jak zmenšení účinného průřezu vede k zvětšení viskozity?
2. Na str. 42 píšeš: „Při otočení na substrát je mezi začátkem simulace a momentem, kdy částice mohou dopadnout na substrát, přibližně trojnásobná doba oproti situaci při otočení k terči.“ To dáváš do souvislosti s třikrát větší vzdáleností k substrátu než k terči. Při difúzi ale doba šíření roste s kvadrátem vzdálenosti. Můžeš tedy ocenit roli difúze v tvých simulacích a její projev v rozděleních na obr. 5.2 a 5.3?
3. Na str. 37 píšeš, že hodnoty rychlostí v tabulce 5.1 mohou být nadhodnocené. Můžeš odhadnout skutečné hodnoty?

Celkově je Michalova práce přínosná a na aktuální téma, takže ji doporučuji k obhajobě a navrhuji známku výborně.

V Plzni 17.6.16

Šimon Kos

Šimon Kos

Příloha: seznam překlepů a drobných gramatických chyb, drobných nepřesností a drobných námětů

Str. 1:

- „Ač se jedná ekonomicky a vědecky významnou a zajímavou technologii,...“ chybí „o“.
- „... místo uvnitř vakuové komory kde je reaktivní plyn napouštěn...“ chybí čárka; podobně taky jinde v textu
- „Tento model bude poté implementován jako počítačový algoritmus, a přispět tak k lepšímu poznání depozičního procesu.“ Má být „přispěje“.

Str. 2:

- „... , tak aby docházelo k dostatečné míře následné ionizaci...“ asi má být „v dostatečné míře k následné ionizaci“.

Str. 4:

- v popisku k Obrázku 2.1 b) chybí slovo „funkce“

Str. 5:

- „(viz. obr. 1)“ nemá být tečka za „viz“ a má být obr. 2.1.
- „Jeho vznik lze vysvětlit především snížení rozprašovací rychlosti...“ má být „snížením“
- „Druhý jev způsobí snížení spotřeby reaktivního plynu na stěnách komory, a z toho vyplývající změny parciálního tlaku reaktivního plynu.“ Má být „reaktivního“ a nemá být čárka.
- „V metalickém módu odpovídajícím...“ má být „odpovídajícím“
- „Toto zpomalení je způsobeno vrstvou materiálu na povrchu terče, které ještě nebyl odprášený vlivem nízké rozprašovací rychlosti.“ má být „způsobeno“ a „který“

Str. 6:

- (2.2) má být max (- derivace).
- „Experimenty ovšem prokázaly, že pro tyto 'zakázané' hodnoty p_{RG} odpovídají filmy s $x=1$ a podstechiometrické filmy s $x<1$.“ Má být „těmto zakázaným hodnotám“.

Str. 8:

- Chybí odkaz na obr. 2.2 v textu.
- „Délka trvání zapnutého pulzu je dána tak, aby se na dielektriku nestáčilo nahromadit množství náboje vyšší, než je kritická hodnota a nedošlo k vytvoření mikrooblouku.“ Chybí čárka.

Str. 9:

- „V případě použití terčů z různých materiálu lze deponovat kompozitní vrstvy.“ Má být „materiálů“.

Str. 10:

- „Hrabě Buffon navrhl pokus, kdy se papír s rovnoběžnými linkami vzdálenými od sebe d opakovaně házela jehla o délce L ...“ chybí „na“

Str. 11:

- „Pravděpodobnost, že jehla dopadne tak, že protne linku je...“ chybí čárka

Str. 12:

- „(a společně s tím i ostatními numerické přístupy)“ má být „ostatní“

Str. 14:

- „... a bývající bity jsou smíchány do pseudonáhodného stavu.“ Má být „zbývající“.
- „... protože neopotřebuje operaci vyhledávání a součtu celých čísel.“ Má být „nepotřebuje“.
- * Možná trochu vysvětlit: proč pro $c=0$ je čtyřikrát kratší cyklus? Co je operace vyhledávání celých čísel? Může být X_n záporné?

Str. 15:

- „... , který obsahuje funkcionalitu TRIMu a rozšiřuje jí o další funkce.“ Má být „ji“.
- * Možná by stálo za to zdůraznit, že pro 2GeV/amu už je potřeba uvážit jaderné reakce.
- * „Během kolizí mají atom a ion Coloumbický potenciál, včetně výměnné a korelační interakce mezi překrývanými elektronovými obaly.“ Má být coulombický. Věcně: byla by lepší přesnější formulace, co myslíš coulombickým potenciálem pro neutrální atom.
- * „Rozložení náboje iontů uvnitř terče je popsán jako velikost efektivního náboje iontů, včetně rychlosti iontů závislé na náboji a celkového elektronového moře terče.“ Má být „popsáno“ a chybí čárka. Věcně: trochu nejasná formulace

Str. 16:

- * „Předpona SD znamená zkratku „static-dynamic“, tedy že program umožňuje jak statické tak dynamické výpočty.“ Možná by bylo dobré říct explicitně, že se tím myslí statické a dynamické, co se týče terče.

Str. 18:

- * „Rozměry vakuové komory, umístění otvorů napouštěcích trubiček, terče a substrátu odpovídají depozičnímu systému použitému v [20], [19].“ Nemá být tečka za „v“. Možná by bylo dobré popsat tenhle systém víc v detailu a možná už v sekci 2.1, když je to vlastně hlavní motivace pro tuhle práci.

Str. 19:

- „V rámci výpočtů programu, který je součástí této práce, nejsou tyto jevy uvažovány a program tak uvažuje tlak pracovního plynu rovnoměrně rozložený po celém simulovaném prostoru.“ Lépe by se hodilo o dva odstavce níž.
- „Uvnitř komory pomocí magnetronu vytvořeno magnetické pole.“ Chybí sloveso.
- „V tomto prostředí se poté zapálí doutnavý výboj, který je zdrojem ionizovaných částic reaktivního plynu.“ Má být pracovního?
- „Při simulaci transportu reaktivní plynu byly zanedbány interakce...“ má být „reaktivního“.
- „Metoda se omezuje se pouze na modelování...“ dvakrát „se“.

Str. 22:

- * „Po načtení počátečního nastavení program vygeneruje zadané množství částic reaktivního plynu v počáteční pozici.“ Možná by bylo dobré říct, že to je jen vybraná podmnožina částic, takže proto na str. 32 se může kromě počtu částic zadat taky tlak, teplota a δ_t jako nezávislé veličiny, a přeskálování na skutečná čísla je dáno vahou w zavedenou na str. 37 vztahem (5.1). Tedy zdůraznit, že to jsou jednotlivé částice, ne soubory částic, a proto prodělávají jednotlivé srážky.
- * nadefinuj pV proud.

Str. 23:

- * Možná trochu lépe vysvětlit, proč používáš inverzní erf.
- * „2. Výpočet dráhy molekuly reaktivního plynu do další srážky s vygenerovaným partnerem, v závislosti na rychlosti srážkového partnera a rychlosti molekuly.“ Možná dobré napsat explicitně, že rychlosti molekuly a partnera určí dráhu do další srážky kvůli závislosti (4.7), která se dosadí do (4.6) a odtud do (4.5).

•* „Na konci každého cyklu hlavního výpočtu pro danou částici program porovná vnitřní dobu běhu simulace pro momentálně simulovanou částici s parametrem Δt .“ Možná by bylo dobré říct explicitně, že ta vnitřní doba běhu simulace nemá žádný elementární krok, nýbrž přibývá po časových intervalech daných pohybem mezi srážkami.

Str. 24:

•* „... místo toho se uloží hodnota simulačního času převyšující Δt pro danou částici a pozice částice v čase Δt .“ Možná by bylo dobré podrobněji říct, proč se uloží pozice v jiném čase než je uložena hodnota času.

• „V opačné případě částice nemohla kolidovat...“ má být „v opačném“.

• „Vývojový diagram běhu programu je vyobrazen na obrázku 4.4.“ má být 4.3.

Str. 25:

• nový vektor rychlosti se generuje podle rovnic (4.25)-(4.30).

Str. 26:

•* vstupní soubor popsán v 4.4.1. Věcně: Pro $E \leq \epsilon$ můžeš skočit za rozhodování $t < \Delta t$. Navíc s ϵ by se měla srovnávat rychlost, ne energie podle posledního odstavce 4.4.1 na str. 34.

Str. 27:

• „Koeficient viskozity u hard spere modelu je úměrný odmocnině z teploty, resp. $T^{0.5}$.“ má být „tj.“

• „Tato pozorování vedla k zavedení modelu aproximujícím částice jako nedeformovatelné koule s proměnnou velikostí.“ Má být „aproximujícímu“. Tato formulace je lepší než formulace „model nedeformovatelných tvrdých koulí“ na začátku stránky.

•* Byly by lepší přesnější a jasnější formulace ve větách:

„Rychlost klesání je přímo úměrná změně koeficientu viskozity v závislosti na změně teploty.“

„Bylo zjištěno že důsledky změny molekulárního modelu v analytických a numerických studiích silně koreluje se změnou efektivního účinného průřezu.“

„ale poměr hybnosti k takto získané hodnotě účinného průřezu zůstává konstantní, ovšem správně by se poměr měl měnit exponenciálně v závislosti na viskozitě.“

Str. 28:

•* „Ve výpočtech, uváděných v části 5 této práce, jsou parametry d_{ref} , ω a α vždy stejné, pokud není uvedeno jinak.“ Lépe by bylo říct, že jsou pevně nastavené.

• v rovnici (4.10) chybí jednotky

• „Zachování hybnosti lze snadno odvodit v tzv. „center of mass“ (CoM) souřadnicového systému, tedy systému souřadnic pohybuujícího se konstantní rychlostí...“ má být „souřadnicovém“ a „pohybuujícímu“.

• ve (4.14) má být znaménko -?

Str. 29:

• rovnice (4.2,4.3) mají být (4.14,4.15) a (4.5,4.6) mají být (4.17,4.18)?

• „Lze tak odvodit, že výsledné hybnosti po srážce budou také stejné velikosti a působící na opačné strany.“ Má být „směřující“?

•* „V CoM systému souřadnic tedy celá kolize proběhne v jedné rovině.“ Je tu předpoklad centrálních sil? Je splněný? Při nebudové částici může být přenos mezi orbitálním a vnitřním momentem hybnosti?

Str. 30:

• v textu má být odkaz na obr. 4.3.

Str. 31:

• rovnice (4.23) má mít v čitateli mínus.

• v textu má být odkaz na rovnice (4.19-23).

•* bylo by dobré napsat formuli analogickou (4.24) pro generování úhlu χ po srážce.

Str. 33:

• otocení má být definováno naopak (srov. Str. 22 dole). Taktéž na str. 36 a na str. 38.

• ϵ má mít jednotky m/s.

• „Za lomítkem je vždy nutné nechat ještě jeden prázdný řádek, aby funkce namelist správně načetla soubor.“ Možná lépe říct, že je tam potřeba dát znak CR.

•* Možná užitečně říct, že se do binárního souboru zapisuje počet srážek kvůli srovnání s \max_ttl , a vysvětlit proč je celková velikost souboru 27MB.

• Má být odkaz na obrázek 4.2?

Str. 34:

•* není potřeba zavádět veličiny r_ar , r_rg . Možná dobré říct, že c_{ref} pro vztah (4.7) se počítá v programu.

•* „Pokud částice ztratí dost energie na to, aby zpomalila pod tuto hranici, je uvazována jako termalizovaná.“ Má být „uvažována“. Možná lépe „je považována za termalizovanou.“ Věcně: Možná lepší zvolit jiné označení než „termalizace“ (též na str. 19 a 23), protože ϵ je menší než termální rychlost odpovídající teplotě t_k . Navíc by asi bylo dobré říct explicitně, že takhle zpomalené částice jsou vyloučené z výpočtu, a kolik zhruba takhle vyloučených částic bylo.

Str. 35:

•* bylo by dobré říct, proč se ukládá délka výpočtu, když je zadána jako parametr ve vstupním souboru. Taktéž k čemu je dobré uložit počáteční rychlosti částic.

Str. 37:

• „... a rychlosti v tabulce 5.1 tak mohou oproti skutečné situaci do určité míry nadhodnocené.“ Chybí sloveso.

• „Obrázky prostorového rozložení hustoty částic uvnitř komory jsou řezy prostorem vakuové komory, vedenými v rovině kolmé na terči, obsahující ústí napouštěcích trubiček.“ Má být „vedené“

•* možná dobré říct explicitně, že buňky se zavádějí jenom pro zobrazení, ne pro výpočet.

• říct, že Δt je totéž co Δt a že N_{celk} je totéž co $pocet_castic$.

Str. 38:

• „Za účelem vizualizace významu toho to parametru byly provedeny dva výpočty...“ má být „tohoto“.

• „Pokud jsou otvory napouštěcích trubiček otočeny směrem k terči, je největší hustota částic mezi tubičkami a terčem.“ Má být „trubičkami“.

Str. 39:

• „Prostorové rozložení hustoty částic ve stacionárním stavu...“ Možná by bylo dobré diskutovat stacionární stav už v textu, co to znamená a za jak dlouho je zhruba dosažený.

Str. 42:

•* „Při otočení na substrát je mezi začátkem simulace a momentem, kdy částice mohou dopadnout na substrát, přibližně trojnásobná doba oproti situaci při otočení k terči.“ Možná dobré diskutovat, že lineární závislost doby na vzdálenosti znamená, že moc nedochází k difúzi, jak též ukazuje nerovnoměrné rozdělení na obr. 5.2 a 5.3.

- „Na substrátu je rozložení dopadů mnohem rovnoměrnější než na terči...“ má být „na terči“.

Str. 43:

- „Zvýšením tlaku se tak zkrátí vzdálenost od první srážky, kterou částice musí urazit, aby dopadla na terči.“ Možná říct jasněji, že se myslí první srážka, která částici obrátí směr pohybu směrem k terči. Podobná formulace je též na str. 49 nad 5.3.2, ale tam není potřeba měnit směr pohybu, takže srážka není nutná.

Str. 48:

- oba panely jsou pro ústí otočené k substrátu. Asi není potřeba dva stejné popisy obrázku na str. 43 dole a str. 50 dole. Na str. 43 by stačila diskuse závislosti na tlaku a na str. 50 diskuse závislosti na průtoku.

Str. 49:

- * proč jsou vzdálenost trubičky a velikost průtoku podsekce tlaku?

Str. 54:

- flow je totéž co předtím prtok?

- „Tím se významně zvyšuje počet jednotlivých dopadů na terči, viz obr. 5.14.“ má být 5.13.

Str. 55:

- * „Pro $\gamma = 0.015$ tak došlo k největšímu počtu dopadů, ale počet chemisorpci je velmi nízký.“ Možná by stálo za to říct, že s klesajícím γ se zvyšuje počet dopadů, ale pomaleji než $1/\gamma$.