

Oponentský posudek na bakalářskou práci „Předpověď struktury vrstev ZnO vytvářených atom po atomu pomocí klasické molekulární dynamiky“ Kamily Hantové

Oxid zinečnatý, ZnO, je oxidový polovodič se širokým zakázaným pásem a tím pádem potenciálně užitečný pro průhlednou elektroniku a případně sluneční články. Jeho tvorba v podobě tenkých vrstev v nerovnovážném nízkoteplotním plazmatu při magnetronovém naprašování dává vzniknout novým materiálovým vlastnostem oproti rovnovážnému růstu tohoto materiálu v objemové podobě. Tyto vlastnosti je užitečné zkoumat jak teoreticky tak experimentálně a práce Kamily Hantové je hodnotným příspěvkem k teoretickému studiu.

Cílem práce bylo po prostudování literatury zvládnout techniku klasické molekulární dynamiky a pak ji použít na simulaci růstu vrstev ZnO a najít vlastnosti těchto vrstev v závislosti na procesních parametrech. Kamila všechny tyto cíle splnila. Po výběru interakčního potenciálu, jeho parametrů a jeho úpravě na krátkých vzdálenostech našla vhodnou tlumící dobu termostatu a časový krok. S takto připraveným výpočetním nástrojem pak provedla svoje simulace. Výsledky a jejich diskusi přehledně rozdělila na dvě paralelně jdoucí sekce kapitoly 5 podle toho, jestli substrát, též ze ZnO, byl krystalický s orientací 0001 nebo amorfni. V obou případech pak zkoumala vliv energie dopadajících částic zhruba rovnoměrně na logaritmické škále od 0,1 do 100eV na vlastnosti rostoucí vrstvy. Zjistila podobnosti a rozdíly mezi oběma případy. Hlavní podobností je, že v obou případech je zhruba uprostřed této logaritmické škály oblast energií dost velkých na to, aby vzniklá vrstva měla hladký povrch, a zároveň dost malých na to, aby v ní nevzniklo příliš defektů. Kromě názorné vizuální prezentace výsledků kvantifikovala Kamila tyto vlastnosti narostlých vrstev kvantitativně pomocí koordinačních čísel po předchozím určení vzdálenostních cutoffů z radiální distribuční funkce a pomocí ringů ve struktuře.

Práci napsala Kamila přehledně a logicky. Po výstižném abstraktu a stručném úvodu shrnula přehledovou část do kapitoly 2, v níž popsal důležité vlastnosti materiálu ZnO a obecně simulace pomocí molekulární dynamiky, které pak rozvedla a konkretizovala v kapitole 4 po vyspání cílů práce v kapitole 3. Popis a diskuse výsledků pak je v kapitole 5, jejíž obsah jsem už popsal v předchozím odstavci. V práci jsem našel jenom občasné nevyhnutelné drobné překlepy, gramatické chyby nebo nepřesnosti, které spolu s různými náměty ke zvážení přikládám v příloze.

Závěrem práci doporučuji k obhajobě a po jejím obhájení navrhuju známku výborně. K obhajobě mám tři dotazy:

1. Můžeš vysvětlit, proč termostat vytváří oscilace teploty ukázané na obr. 8 a jak tyto oscilace rozkmitají krystalovou mřížku?
2. Na str. 27 a 37 píšeš, že při nízkých energiích nemají dopadající atomy dostatečnou energii na vytvoření vazby. Proč potřebují dostatečnou energii, když potenciál na obr. 5 má pouze jedno minimum a žádnou potenciálovou bariéru na cestě k němu od velkých vzdáleností?
3. Můžeš odhadnout závislost vlastností vrstev taky na toku částic, zejména na tom, nakolik se při přiletu nové částice disipovala energie od předchozích částic?

V Plzni, 19.6.2019

Šimon Kos
Šimon Kos

Seznam nalezených drobných překlepů, gramatických chyb, nepřesností a námětů ke zvážení

•str. 1

„K porozumění souvislostí mezi vlastnostmi látek je využívána fyzika pevných látek,“ možná lepší formulaci
„Největším z přínosů k chodu simulací vytváření těchto materiálů je velký nárůst výpočetní kapacity počítačů.“
Možná trochu uvést simulace samy o sobě.

•str. 2

Možná dát konkrétní informace o ZnO až za obecné o krystalické struktuře, modelování atd.?
„Oxid zinečnatý (ZnO) je bílá krystalická látka, jejíž krystalická struktura je známá jako wurtzite.“ Nebo spíš, že je známo, že její krystalická struktura je wurtzite?
„ZnO se v přírodě vyskytuje jako nerost zinkit, ve kterém se vyskytuje oxid zinku s příměsí manganu.“ ZnO se vyskytuje v nerostu zinkit s příměsí manganu?
Možná nepsat chemické vzorce kurzívou?
„ZnO je ve formě tenké vrstvy transparentní a vodivý,“ v objemové formě není transparentní a vodivý?
„Jedním z nich je rozptyl na defektech (ionized impurity scattering), který však zároveň zodpovídá za samotnou přítomnost nosičů.“ Za přítomnost nosičů zodpovídají defekty, ne rozptyl na nich?

•str. 3

„Tato symetrie se dělí na několik typů: zrcadlová rovina, inverze, rotační osa, identita a jejich kombinace: zrcadlová rotační osa a inverzní rotační osa.“ Rozlišit prvky a operace symetrie? Dát identitu jako první mezi operacemi?
„nebo kubickou plošně centrovanou s těsně uspořádanou mřížkou (fcc), u které je třetí vrstva v poměru k první pootočená“ možná lepší říct, že je posunutá vůči druhé jako druhá vůči první?
„Polovina tetrahedrálních děr je zaplněna atomy zinku a při obsazení obou podmřížek stejným prvkem, vzniká struktura hexagonálního diamantu.“ Co je tetrahedrální díra? Bez čárky?

•str. 4

„Krystalická struktura ZnO (wurtzite) složená z 2880 atomů ze dvou různých bočních pohledů.“ Možná napsat explicitně, ze kterých krystalografických směrů koukáme?
„Modré kuličky reprezentují atomy zinku a černé kuličky atomy kyslíku.“ Možná dát víc rozdílné barvy?
„Nejpřesnější metodou pro výpočet a simulaci chování atomů je metoda výpočtů ab-initio.“ Možná říct explicitně, z jakého počátku vycházejí, tj. např. kvantová chemie nebo DFT, o kterých píšeš na další stránce?
„Tato metoda jde při výpočtech až na úroveň hustoty elektronových stavů a Schrödingerovy rovnice.“ Možná říct jen úroveň elektronových stavů?
„která využívá principy klasické fyziky pracující s celými homogenními atomy.“ Co je homogenní atom?
„Díky této metodě jsou výpočty poměrně rychlé, přestože doba výpočtů stoupá s množstvím atomů v simulaci.“ Říkat množství spíš než počet atomů?
„Při modelování krystalických látek se pracuje s elementární buňkou nebo s její celočíselným násobkem.“ Překlep jejím?

•str. 5

„která provádí výpočty základních stavů vlnové funkce pro systém s mnoha elektrony.“ Spíš vlnové funkce základních stavů? I když v DFT je to právě hustota a ne vlnová funkce?
„Mezi hlavní vstupní parametry pro simulaci patří složení toku částic (atomy a ionty),“ říct explicitně už tady, že modeluješ konkrétně růst vrstvy, ne až na další stránce?
„K popisu využívá Lennard-Jonesovu rovnici, či Buckinghamovu, která je v této práci využívána.“ Spíš formulí než rovnici?
„Potenciály four- a three-body počítají i“ je nějaký důvod, proč čtyři je před tři?

•str. 6

„Pro modelaci se tedy používají periodické okrajové podmínky ve směrech osy x a y.“ zavést explicitně směr os?
„bez kontroly teploty rostoucí vrstvy, ale s kontrolou teploty substrátu (NVE)“ vysvětlit jasněji, jak NVE drží teplotu substrátu? Kontrolou myslíš řízení?

•str. 7

„Tlumící doba termostatu nesmí být příliš malá, aby se neprojevila vlastní vibrační frekvence materiálu.“ Možná vysvětlit, jak by se projevila (nebo projevil) vlastní vibrační frekvence materiálu v závislosti na tlumící době? Nebo odkázat na další text?

•str. 8

Možná by bylo dobré dát vedle příkladu na SP taky příklad na CNA?

„Obě metoda pro určení“ metody?

•str. 10

„Dobře nabitovaný interakční potenciál vede k minimální energii pro dané rozměry primitivní buňky a, c.“ možná zavést rozměry primitivní buňky v diskusi materiálu ZnO?
„Pro posouzení správnosti potenciálu byly počítány minimální celkové energie substrátu“ počítala jsi je Ty nebo někdo v literatuře?

„Jako další metodou posouzení potenciálu je nalezení minimální potenciální energie zkoumaných interakčních potenciálů, která byla vydělena 1440, čímž jsem získala hodnotu potenciální energie pro dvojici atomů Zn-O (energie na formovací jednotku (F. U.)).“ Neměla bys počítat energii vazby, kterých je dvakrát víc než atomů?

•str. 11

„Formovací energie třech zbylých potenciálů odpovídaly experimentálním hodnotám alespoň řádově.“ Řádová shoda stačí? Experimentální hodnoty se shodují?

Co je parametr b?

•str. 12

Říct, jakého prostředí je permitivita?

•str. 13

„Dalším možným řešením je aproximace Buckinghamova potenciálu v dané oblasti exponenciální funkcí, což je případ i této práce.“ Můžeš napsat explicitně vztah jako pro samotný Buckinghamův potenciál? Dát odkaz na obr. 5 do textu? Též dále někdy nejsou v textu odkazy na obrázky.

•str. 14

„teplotu nebo-li kinetickou energii atomů.“ Bez pomlčky?

•str. 15

„Z obrázku 6 lze vidět, že nejnižší výslednou potenciální energii měly simulované vrstvy, jejichž povrch byl tvořen atomy zinku či kyslíku, které byly spojeny šikmou vazbou s opačně nabitými atomy.“ Překlep obrázku? Dá se vysvětlit, proč šikmá vazba má nejnižší energii? A proč svislá vazba a 1/2 monovrstvy mají stejnou energii?

•str. 16

Odkaz na obr. 7 v textu? Je to pohled shora?

•str. 17

Podobně jako na str. 7, proč malá tlumící doba vede k oscilacím teploty?

•str. 19

„Ze závislosti frekvence potenciální energie (teploty) je vidět“ proč teplota neobsahuje taky kinetickou energii? Vlastně teplota by měla být dána přímo kinetickou energií?

•str. 20

„protože by dráha, kterou atom urazí za takový časový krok, byla přibližně stejná jako délka vazby mezi atomy.“ Říct, že hlavně by se na té dráze výrazně změnilo zrychlení?

•str. 21

Proč v popisku obr. 11 nejsou časové kroky uspořádány?

•str. 23

Jak se dostane, že 1/4 energie je 36K?

•str. 25

Proč jsou spodní atomy zamrzlé?

•str. 27

„U příliš nízkých energií se některé atomy nebyly schopny „přilepit“ k povrchu, a tedy vytvořit vazbu s atomy na povrchu.“ Podobně na str. 37—proč je potřeba energie na vytvoření vazby, když potenciál na obr. 5 na str. 14 nemá bariéru na vzdálenostech delších než délka vazby?

•str. 28

„Za povrchový atom považujeme atom, který v rozmezí 45 stupňů nad sebou nemá žádný další atom.“ Nad sebou znamená ve směru osy z nebo v jakémkoliv směru?

•str. 29

„Podle polohy minima mezi 1. a 2. píkem byl určen cutoff pro vazbu Zn-0: 2,425 Å a Zn-Zn a 0-0: 0 Å.“ Jak může nula být mezi 1. a 2. píkem?

„Takto byly určeny cutoffy pro všechny vzniklé tenké vrstvy, které se pohybovaly v rozmezí 2,375 – 2,675 Å a následně vypočteny koordinační čísla“ pro každou vrstvu jsi hledala vlastní cutoff? Má být vypočtena? Taky dále v textu.

•str. 30

„Závislost koordinačních čísel na délce vazby“ překlep? Jak jsi dostala délku vazby?

„Hodnota délky vazby Zn-0 se od hodnoty v mřížce wurtzite (1,9758 Å)“ nemá wurtzite dvě délky vazby?

•str. 31

„Víme-li, že tenká vrstva vznikla přilétáním atomů o energii je 10 eV krystalická. Můžeme předpokládat, že počet ringů se s měnící energií nebude pro krystalické vrstvy výrazně měnit.“ Možná lepší formulace?

•str. 32

„Podobnost s touto strukturou je vidět i na obrázku 14 a dokazuje jí i koordinační číslo, které se pohybuje v blízkosti hodnoty 4, která je pro mřížku wurtzite charakteristická.“ Ji?

•str. 34

„Pro energie 0,1–0,5 eV a 30–100 eV označuje šipka hranici substrátu.“ Jednotky stojatě? Kde je šipka pro 0,1–0,5 eV? Proč zrovna pro tyto energie ukazuješ substrát?

„Průřezy vrstvami pro energie 20 eV viz. obrázek 24.“ Má být větší než?

•str. 35

„že se nezlepšuje krystalidita vrstvy.“ Překlep?

•str. 37

„Na rozdíl od krystalického substrátu, kde se atomy s vysokými energiemi odprašovaly opět více, u amorfního substrátu množství odprášených atomů, klesá.“ Proč? Možná s tím souvisí výrok na další stránce „Na rozdíl od hodnot pro tenké vrstvy vzniklé na krystalickém substrátu, hodnoty čísel se stále zvyšují.“

„U vyšších energií je povrch terminován atomy kyslíku a u nižších energií je počet povrchových atomů zinku a kyslíku srovnatelný.“ Proč?

•str. 40

Proč jdou spolu ringy 4 a 10?

•str. 42

„Mezi úkoly pro napsání této práce patřilo nalezení a prostudování literatury popisující modelování tenkých vrstev na atomární úrovni a seznámit se s metodami výpočtů a simulací těchto procesů.“ Nalezení a seznámení?