

# Oponentní posudek k bakalářské práci

## Počítačové modelování pulzního vysokovýkonového magnetronového výboje pro depozici vrstev

Vít Teřl

### 1 Shrnutí obsahu práce

Bakalářská práce vypracovaná na Katedře fyziky Západočeské univerzity v Plzni se zabývá modelováním pulzního magnetronového výboje. Hlavním cílem práce bylo vytvořit Monte Carlo simulaci pohybu elektronů v elektrickém a magnetickém poli magnetronu a studovat prostorové rozložení ionizačních srážek elektronů s atomy, přičemž oproti dřívějším, podobně zaměřeným pracím, jsou uvažovány interakce elektronů s atomy pracovního plynu (Ar) i rozprášeného materiálu (Ti). V této práci je využito vhodného zjednodušení pomocí zadaného (statického) elektrického pole a známého rozložení koncentrací neutrálních atomů (výsledek jiné simulace). Při vhodném spojení s dalšími nástroji, lze simulaci využít pro pokročilé simulace vysokovýkonových pulzních magnetronových výbojů.

### 2 Odborné zpracování

Autor použil vhodnou metodiku pro řešení zadané úlohy, splnil zadané cíle a získal cenné výsledky. Ke zpracování bakalářské práce mám ale několik výhrad.

Ačkoliv jednou jsou v práci zmíněny i další důležité srážkové procesy elektronů s atomy (pružné a excitační srážky), zdá se, že při výpočtech byly započteny pouze ionizační srážky. Domnívám se, že (ne)započtení těchto procesů může významně ovlivnit prostorové rozložení hustot ionizace.

Jak autor uvádí, nejsou řešeny dopady nově vzniklých iontů na terč, tudíž je zřejmé, že rozložení proudové hustoty na terč, neboli emise sekundárních elektronů, bylo autorem zadáno. Nikde v práci ale není popsáno jak. Rovněž nejsou v práci diskutovány počáteční rychlosti vytvořených sekundárních elektronů.

Důležitým prvkem simulace je zadané elektrické pole. V práci je vytvořen realistický průběh elektrického pole definovaný pomocí několika parametrů. Uvítal bych, kdyby jejich hodnoty a vliv na výsledky simulace byly blíže diskutovány.

Při popisu simulace a také ve výsledcích by mělo být více zdůrazněno, že rozdíl mezi jednotlivými výpočty spočívá v rozložení neutrálních atomů, které je důsledkem změny výbojového proudu. V práci se mluví pouze o výbojovém proudu, který ale není přímým vstupem simulace.

Autor cituje dostatečné množství zdrojů (17 odkazů). V několika případech, zejména v přehledu současného stavu, autor nedostatečně využívá odkazů na literaturu v textu práce, kdy velmi konkrétní a netriviální tvrzení nejsou podpořena citačním odkazem.

V přehledu současného stavu se autor až příliš zaměřuje na obecný přehled metod simulace plazmatu a zmiňuje např. fluidní a parametrické modely včetně příslušných rovnic. Uvedené informace se však v další části práce nevyužijí. Považoval bych za vhodnější věnovat se detailněji jen metodě PIC a Monte Carlo metodě, které autor v práci aktivně rozvíjí.

V textu práce jsem našel několik chyb (včetně vzorců) a nepřesných formulací, které ztěžují pochopení textu, viz příloha tohoto posudku. Vyjadřování autora není vždy zcela přesné a srozumitelné.

### 3 Formální zpracování

Práce má standardní strukturu. Členění do podkapitol mi místy přijde nelogické, např. kapitoly 2.2.1 (Modelování magnetronových výbojů) a 2.2.2 (Simulace magnetronových výbojů), jsou obsahově zaměnitelné a termíny modelování a simulace nejsou rozlišeny. Obsah kapitoly 4.2, Struktura simulačního programu, neodpovídá zvolenému názvu. Dle mého názoru by šlo sloučit (případně přeskupit) obsah kapitol 4.1 a 4.2 do jednoho celku.

Grafická stránka práce je na velmi dobré úrovni.

Odkaz [7] v seznamu literatury (bakalářská práce na KFY) nemá požadovanou formu – chybí univerzita a rok vydání.

V práci se v nezanedbatelné míře vyskytují překlepy, gramatické chyby či nevhodná slovní spojení, viz příloha tohoto posudku.

### 4 Otázky

1. Uveďte rozložení počátečních pozic a rychlostí sekundárních elektronů vytvořených na terči na počátku simulace.
2. Byly uvažovány i pružné a excitační srážky elektronů s atomy Ar a Ti? Pokud ne, proč? Jaký je jejich vliv na prostorové rozložení hustoty ionizace?
3. Při zpracování prostorových dat byla využita „Gaussovská interpolace“. Popište tuto metodu interpolace.

### 5 Závěr

Autor splnil zadané cíle, ke zpracování práce mám však výše uvedené výhrady. Bakalářskou práci doporučuji k obhajobě a v případě uspokojivého zodpovězení uvedených otázek navrhuji hodnocení **velmi dobře**.

V Plzni dne 30.5.2019



Ing. Tomáš Kozák, Ph.D.  
oponent bakalářské práce

## Příloha

Níže uvádím nepřesné formulace a chyby, které mají vliv na srozumitelnost textu:

- Str. 2, odst. 3: Není vysvětlena anglická zkratka „HIPIMS“
- Str. 2, odst. 3: Tvrzení „Hustota naprašovaného materiálu předčí několikrát hustotu pracovního plynu“ (myšleno v oblasti před terčem) není obecně pravdivá. Ve většině HiPIMS výbojů není intenzita rozprašování tak veliká, aby toto platilo.
- Str. 3, odst. 3: nepřesné tvrzení „Magnetronové naprašování využívá *magnetické pole paralelní s povrchem terče, . . .*“
- Str. 2, odst. 2: Tvrzení „Část kinetické energie rozprašovaného materiálu je přenášena na pracovní plyn, což vede k úbytku pracovního plynu a *přebytku naprašovaného materiálu v blízkosti terče*“ není obecně pravdivé. I přes zředění pracovního plynu je jeho obvyklá koncentrace stále o řád větší než koncentrace rozprašeného materiálu.
- Str. 5, odst. 4: Nesrozumitelný český termín „Časové a prostorové výpočty by měly být prováděny současně a bez *samo-ovlivnění*.“
- Str. 7, odst. 2: „Hodnoty těchto makroskopických veličin jsou získány řešením rovnice *kontinua, toku a bilance energie* pro každý druh částic“. Jsou zřejmě myšleny zákony zachování počtu částic, hybnosti a energie, případně rovnice kontinuity.
- Str. 7, odst. 3: nesrozumitelné „ $S_e$  a  $S_i$  jsou zdrojové složky pro elektrony, respektive, ionty z kolizních a radioaktivních procesů“ – lépe zdrojové členy vycházející z reakcí elektronů a iontů.
- Str. 8, odst. 2: „Proto fluidní modely jsou schopné pozorovat pouze lokální kinetiku částic, . . .“ může být zavádějící. Uvedl bych například: Fluidní modely předpokládají lokální termodynamickou rovnováhu a nedokáží popsat nelokální efekty.
- Str. 9, odst. 3: nefyzikální spojení „síla náboje“, nesrozumitelné tvrzení „Tyto modely ukázaly využitelnost simulace plazmatu.“
- Str. 10, odst. 2: nelogická věta „Simulační prostor je diskretizován v čase i prostoru, tím je vytvořena mřížka.“
- Str. 12, odst. 1: velmi zjednodušené tvrzení „Ionizační srážky jsem simuloval pomocí Monte Carlo srážkové metody, *kde je náhodně rozhodnuto, zda proběhla srážka*“. Vhodnější by bylo napsat, že v Monte Carlo metodě se používá náhodných čísel pro statistické vyhodnocení srážek.
- Str. 12, odst. 3: místo „průměrná diference“ se používá termín *centrální diference*
- Str. 12, odst. 3: „. . . rychlosti jsou vyhodnocovány v mezikrocích  $t + \Delta t$  a  $t - \Delta t$ .“ Správně má být  $t + \Delta t/2$  a  $t - \Delta t/2$

- Str. 12, odst. 3: „Leapfrog metoda minimalizuje numerické ohřívání oproti jiným způsobům diskretizace těchto rovnic.“ Termín numerické ohřívání nemusí být bez dalšího vysvětlení zřejmý. Kumulace numerických chyb také záleží na velikosti integračního kroku. Autor tedy zřejmě měl na mysli, že numerické chyby jsou při použití této metody a pro stejný integrační krok menší než u jiných metod.
- Str. 14, rovnice (4.11): chybně uvedeno  $\mathbf{v}^+$  místo  $\mathbf{v}^-$  na pravé straně. Správně má mít rovnice tvar  $\mathbf{v}^+ = \mathbf{v}^- + \mathbf{v}^- \times \mathbf{t}$
- Str. 15, rovnice (4.17): Vzorec počítá pouze s jedním druhem terčových atomů o koncentraci  $n_t$  a celkovým účinným průřezem  $\sigma_T$ , přičemž v práci jsou započítány možné interakce se dvěma druhy atomů zároveň. Pro ilustraci metodiky je tento zápis dostatečně zřejmý, ale neodpovídá přesně realitě.
- Str. 19, obr. 4.6: Obrázek by zasloužil delší popis, kde by bylo vysvětleno, co reprezentují jednotlivé úsečky případně plochy ohraničující simulační oblast a jakou roli hrají červené tečky v obrázku.
- Str. 23, odst. 1: Chybí odkaz na obr. 4.9.
- Str. 24, popisek obr. 4.9: Není mi jasná metoda Gaussovské interpolace dat použitá při zpracování všech prostorových dat. V textu není vůbec vysvětleno.
- Str. 25, odst. 1: Tvrzení „Provedl jsem tři různé simulace lišící se výbojovým proudem přivedeným na terč, ...“ není dostatečně přesné. Jelikož výbojový proud nebyl primárním vstupním parametrem simulace, mělo být v první řadě uvedeno, že rozdíl mezi simulacemi spočíval v rozložení koncentrace atomů Ar a Ti.
- Str. 27, odst. 6: Nepřesné tvrzení „Atomy Ti jsou pro tento proud už rozprašovány dále od terče ...“. Není pravda, že by vzdálenost rozprašených atomů Ti od terče rostla s výbojovým proudem. Tvrzení autora zřejmě vychází z toho, že v důsledku intenzivnějšího rozprašování Ti je jeho koncentrace vyšší i ve větší vzdálenosti od terče než v případě nižšího proudu.
- Str. 27, odst. 7: „... poměr hustot ionizace atomů Ti a Ar je uveden na obr. 5.4, ...“ – má být odkaz na obr. 5.6
- Str. 34, obr. 5.9: Dle popisku grafu je v pravém sloupci zobrazen poměr  $\text{Ti}/\text{Ar}_{max}$ . Pak bych ale očekával nárůst absolutních hodnot tohoto poměru pro rostoucí výbojový proud. Zdá se ale, že data představují poměr  $\text{Ti}/\text{Ti}_{max}$  jako na obr. 5.3, 5.5 a 5.7.

Dále se v práci vyskytují následující formální chyby, překlepy, či jazykově nevhodná slovní spojení:

- Str. 2: „vyrábění tenkých vrstev“, „materiálové vrstvy“, „dlouhý počet let“
- Str. 2, odst. 3: „Na zmírnění některých z těchto *problému* ...“

- Str. 2, odst. 4: špatně umístěná čárka ve větě „... počítačový model pomocí, kterého lze sledovat ...“
- Str. 4, odst. 1: „Rozlišujeme dva různé typy, častější Typ-2, a to je pokud vnější magnet je silnější než vnitřní“
- Str. 4, odst. 3: „Podobné vlastnosti *byli* ...“
- Str. 5, odst. 1: „Elektrické vlastnosti *byli* ...“
- Str. 5, odst. 4: „Časové a prostorové výpočty by *měli* být prováděny ...“
- Str. 8, odst. 5: místo „totální toky iontů“ raději *celkové toky iontů*
- Str. 8, odst. 5: „koeficientů elektronové sekundární emise  $\gamma_{mg}$  a  $\gamma_{mg}$ “ – symbol  $\gamma_{mg}$  uveden dvakrát, přičemž není v rovnicích, ani v textu dále využit
- Str. 15, odst. 3: „... následovaná excitační srážkou ze *základní* stavu ...“
- Str. 15, odst. 4: „totální účinný průřez“ lze nahradit *celkový účinný průřez*
- Str. 16, odst. 3: překlepy v zápisu intervalu  $\langle 0, 1 \rangle$ .
- Str. 17, odst. 3: místo „equidistantně“ má být *ekvidistantně*
- Str. 17, odst. 4: místo „má tvar cylindru“ lépe použít *má tvar válce*
- Str. 20, popis obr. 4.7: místo „ $B_r$  a  $B_z$ “ má být  $B_r$  a  $B_z$
- Str. 21, odst. 3: anglický termín „sheath“ by měl být vhodně přeložen, nebo alespoň uveden v uvozovkách
- Str. 22, odst. 2: „V této práci *byli* zvoleny následující hodnoty parametrů“, překlep „ $f_{up}$ “ místo  $f_{up}$
- Str. 25, odst. 2: místo „v racetracku“ mělo být *v erozivní zóně terče*
- Str. 25, odst. 5: „Tato část se věnuje prostorovému rozložení objemové hustoty ionizace normované pomocí maximální hodnoty této hustoty v prostoru a *vzájemným podílem hustot ionizace* atomů Tr a Ar“. Zde se vyskytuje překlep Tr místo Ti. Druhá polovina věty gramaticky nesedí s první. Upravil bych na *vzájemného podílu hustot ionizace* (ve smyslu: tato část se věnuje prostorovému rozložení vzájemného podílu hustot ionizace).
- Str. 35, odst. 2: „... počítačový program na sledování ionizací *vydaných* sekundárními elektrony ...“

