Oponentský posudek k práci „Počítačové modelování napouštění reaktivního plynu pro vysokovýkonové pulzní magnetronové naprašování oxidů kovů“ Milady Krejčové

V posledních několika letech pracovníci naší katedry fyziky vyvinuli nový důmyslný řízený systém pro reaktivní depozice pomocí vysokovýkonového pulzního magnetronového naprašování (HiPIMS). Tento systém je navržen tak, aby se vzájemně kompenzovaly problémy, které mají reaktivní naprašování a HiPIMS odděleně. Výsledkem jsou depozice hustých stechiometrických oxidů s depozičními rychlostmi řádově většími než v jiných systémech a možnost depozice oxynitridů, které jiné systémy vůbec nejsou schopny připravit. Pro činnost systému je důležitý způsob napouštění kyslíku trubičkami před terčem tak, aby vznikl přetlak směrem k substrátu oproti směru k terči. Bohužel možnosti měřit tlak lokálně a zejména ve výboji jsou omezené, ale můžeme si pomoci počítačovými simulacemi. Milada ve své práci udělala první krok—simulaci proudění a tlaku kyslíku bez výboje.

Svou práci Milada napsala jasně a přehledně až na občasné nevyhnutelné překlepy a drobné nepřesnosti; ty, které jsem našel, přikládám v příloze. V úvodu, tedy první kapitole, nejprve během jedné stránky byla schopná zasadit svoji práci do širšího kontextu plazmových technologií. V druhé kapitole prokázala znalost současného stavu měření tlaku, reaktivního naprašování s jeho dvěma módy a hysterezním přechodem, HiPIMS se zpětným tokem rozprášených ionizovaných částic na terč a konečně zde vyvinutého systému pro reaktivní HiPIMS. Ve třetí kapitole popisuje metody modelování proudění plynu, přičemž se postupně zaměřila na molekulární režim a v něm na stochastické metody přímé simulace Monte Carlo s popisem vztahů pro srážky molekul mezi sebou a se stěnami a s výsledky z literatury pro HiPIMS, které vyšly lépe než kontinuální simulace.

Jádro práce tvoří pátá a šestá kapitola. V páté kapitole Milada nejprve popisuje různé softwarové nástroje na vytvoření geometrie včetně výkresu, na vytvoření výpočetní sítě, na vlastní simulaci a na vizualizaci výsledků. Je rozumné, že si simulaci nejprve vyzkoušela pro proudění v trubce, pro nějž existuje analytické řešení. Pak provedla simulaci pro vakuovou komoru s předpoklady a zjednodušeními, které přehledně uvedla na jednom místě. K tomu navíc rozumně změnila průřez trubičky z kruhového na čtvercový, aby nebyl problém se síťováním dvou spojených válců. Pro oba případy, trubka a komora, uvádí přehledně parametry výpočtu. V šesté kapitole Milada popisuje a diskutuje výsledky simulace. Pro proudění v trubce získala výsledky v dobré shodě s analytickým řešením jakožto test samotného postupu. Aby lépe porozuměla svým výsledkům pro komoru, studovala postupně vliv různých parametrů: průtoku komorou, vzdálenosti místa napouštění od terče, okrajové podmínky tlaku na plášti komory a velikosti oblasti simulace. Výsledky vyšly fyzikálně rozumně: větší průtok vede k většímu tlaku v komoře, větší vzdálenost od místa napouštění vede k menšímu tlaku a zvýšení tlaku na okraji vede ke zvýšení tlaku uvnitř o stejnou hodnotu. Rozšíření velikosti oblasti simulace vede jen k malé změně.

K práci mám jen několik drobných otázek:

1. Můžeš podrobněji vysvětlit, kde je v DSMC náhodnost? Je nějaká souvislost s Metropolisovým MC?
2. Obr. 6.8: Proč nebyla změna teploty taky v testovací trubce? Tepelná energie se mění na kinetickou energii proudění—není to v rozporu s druhou větou termodynamiky?
3. Čekal bych, že při rozšíření oblasti poklesne tlak všude. Proč na substrátu naopak naroste?

Celkově práce splnila všechny cíle, takže ji doporučuju k obhajobě a po obhájení navrhuju známku výborně.

V Plzni 25.8.15 Šimon Kos

Šimon Kos

Příloha: Seznam překlepů a drobných nepřesností

Str. VI: „Ve zvolených metodách zpracování popisuje navržení testovací úlohy - proudění v trubce a také navržením simulace napouštění reaktivního plynu do vakuové komory pomocí metody Direct Simulation Monte Carlo." Má být „navržení" i podruhé?

„Ve výsledcích jsou porovnávány teoretické hodnoty tlaku, rychlosti a průtoku pro proudění argonu v trubce s hodnotami ze simulace." Co jsou „teoretické" hodnoty když ne ze simulace? Možná by bylo dobré říct, že trubka má analytické řešení: „…navržení testovací úlohy s analytickým řešením—proudění v trubce…" a pak „…porovnávány teoretické hodnoty analytického řešení pro tlak, rychlost a průtok proudění argonu v trubce s hodnotami ze simulace."

„Dále byl studován vliv průtoku a vzdálenosti napouštěcí trubky od terče (substrátu) s orientací otvoru směrem k terči pro simulaci napouštění reaktivního plynu (kyslíku) do vakuové komory." Vliv na simulaci? Nebo na výsledky simulace?

Str. IX: „A" má být „Příloha A" podle str. 60 nebo „Dodatek A" podle str. 40. Asi by bylo dobré vybrat jedno označení.

Str. 1: „Jedním z faktorů, který určuje konkrétní stechiometrii produktu, je parciální tlak reaktivního plynu." Má být „které určují"?

Str. 4: typ I a typ II, kdežto na obrázku je typ 1 a typ 2.

Str. 5: „anoda sloužící pro uzavření siločar" mělo by se říct „elektrických"?

Str. 6: „poissoned" má být „poisoned".

Str. 8: „Rychlost odezvy systému optického emisního spektroskopu je řádově 10 ms, jinak není možné včasně reagovat na změny ve vakuové aparatuře." Možná lépe říci „jinak by nebylo…"

Str. 9: „V [10] je popsána detekce oblouků při ve vysokovýkonovém pulzním magnetronovém naprašování (viz dále)." Má být „při" nebo „ve"?

„Proud se zastaví odpojením kondenzátorů od cívky, a tím se zabrání dalšímu nabíjení cívky od výboje." Myslíš „nabíjení kondenzátorů"? Možná lépe říct „indukce"

Str. 10: „Tyto rané HiPIMS zdroje je možné charakterizovat pomocí maximálního počátečního napětí v řádech kilovoltů následovaný poklesem na několik stovek voltů, což je typické operační napětí při běžném magnetronovém naprašování [9]." Má být „následovaného".

Str. 11: „**Příklady použití vysokovýkonnového reaktivního pulzního magnetronového rozprašování**" Sjednotit počet „n" ve „vysokovýkonový" na různých místech práce.

„Další výhodou využití HiPIMS je snížení teploty substrátu během přípravy hliníku ve fázi κ na 430 °C oproti zhruba 1000 °C, kterých je zapotřebí při chemické depozici [10]." Myslíš „oxidu hliníku"?

Str. 13: „Grafické znázornění používaných matematických modelů pro kontinuálního i molekulárního proudění v závislosti na Knudsenovo čísle je zobrazeno na obr. 3.1." Má být „pro kontinuální i molekulární" a „Knudsenově"? Boltzmannova rovnice—nepředpokládá spojité rozdělení, tj. kontinuum?

Str. 14: Obrázek 3.1, proč je Eulerova rovnice pro menší hodnotu *Kn* než Navier-Stokesova?

Str. 15: „Další problém při řešení představují poruchy (perturbace)." Myslíš poruchy vůči rovnováze?

V rovnicích použít velké C pro rychlost jako na str. 13.

Rovnice (3.6)…rozvoj do řady v *Kn*, které je ale velké v molekulárním režimu. Opět, neznamená to, že pro Boltzmannovu rovnici potřebujeme naopak kontinuum?

Str. 16: Proč maxwellovská rozdělovací funkce dělá BGK nelineární a proč integro-diferenciální?

Str. 17: Proč MD funguje jen při vysoké hustotě?

Str. 20: Proč je jemnější síť prostorově než časově podle (3.12)?—překlep

„Důvodem je omezení vzdálenosti, na kterou se srážky odehrají." Má být „na které"?

„Při předpokladu nepružných srážek je možné použít například
Larsenovo-Borgnakkeho model." Má být „Larsenův", tak jako na následující stránce?

Str. 21: Index viskozity—čím je větší ω, tím je větší η, takže *d* klesá rychleji s rychlostí *c*. Je to tak správně?

Str. 23: „V [3] se autoři zabývali porovnáváním řešení získané metodou DSMC implementovanou v programovém balíku OpenFOAM…" Asi má být „získaného".

Proč FLUENT dá turbulence a DSMC ne?

Str. 26: Co jsou 2D skicy? Co je typ kóty a čím je některý nejvhodnější? Co jsou modely?

Str. 27: Gmsh vytváří síť sám nebo jsi to udělala ručně z těch základních tvarů?

Str. 28: „Programový balík OpenFOAM využívá objektové orientované programování…" Má být „objektově"?

Rozumím dobře, že OpenFOAM umí jak kontinuální tak molekulární režim? Uživatel si vybere? DSMC je diskrétní metoda? Na str. 18 píšeš, že diskretizační metody jsou založeny na buněčných automatech a nehodí se pro inženýrské výpočty. Navíc co znamená síť pro pohybující se částice?

„Program poskytuje také nástroje pro tvorbu geometrie a výpočetní sítě, ty jsou ale
vhodné pro tvarově jednodušší geomterie. Pro tuto práci byla použita možnosti importu
sítě generované v programu Gmsh." Má být „geometrie" a „možnost"?

„…nebo je možně si vytvořit vlastní pomocí programovacího jazyka Python." Má být „možné"?

Co je výpočetní vlákno? Porovnávání se těžko dělá v ParaView, tak jsi ho dělala v Matlabu?

Str. 30: „Byla Předpokládána trubka o délce 1 metru a průměru 10 cm." Má být „předpokládána". Možná dobré sjednotit označení jednotek, zda zkratka nebo celé slovo.

Dobré, že jsi napřed simulovala něco, pro co je analytické řešení, tj. trubka.

Str. 31: Co je referenční teplota v Larsen-Borgnakke modelu? Souvisí nějak s referenční rychlostí v (3.13)? Jaký je vztah mezi Relaxation collision numer a podílem neelastické složky? Podíl = $(E_i^*-E_i)/E_c$? Pak nemůže být 5, tj. větší než 1.

Též str. 38: vysvětli nulovou rychlost proudění na stěně.

Str. 33: dobré, že jsi uvedla předpoklady pohromadě.

*Str. 34: proč jsi využila rovinu symetrie kolmou na trubku a ne rovnoběžnou? Daly by se využít obě?

Rozšířená geometrie: zvětšení poloměru o 2cm a délky pod terč a nad substrát taky o 2 cm? Ale na obr. 5.6 vypadají ty vzdálenosti jako různé. Na obr. 5.7 vypadají jako stejné.

Str. 35: Jak jsi zvolila číslice za desetinnou čárkou v kótách? Kvůli odmocnině z pí?

Str. 40: Proč tlak vychází systematicky vyšší v simulaci než v teorii, kdežto pro rychlost a průtok se to otočí někde kolem 0,2Pa?

Proč máš v rovnici (6.4) obyčejnou derivaci podle *x* a v dodatku A parciální?

Proč je zkrácen graf teorie, kde spočteš derivace přesně?

„…kde p a v jsou teoretické průběhy tlaku a teploty…“ Myslíš „tlaku a rychlosti“?

Str. 43: „Při porovnání obrázků 6.13a a 6.4b (záměrně
zvolená stejná barevná škála) můžeme vidět výrazný rozdíl v parciálních tlacích kyslíku,
což odpovídá navýšení průtoku z 0,5 na 10 sccm.“ Je 6.13a tentýž jako 6.4a? V tom případě není lepší se odvolat na 6.4a? Ale asi nejsou stejné, protože 6.13a je rozšířená oblast.

Jaký má vliv přítomnost Ar na výsledky? Stálo by zato zkusit výpočet jen s kyslíkem bez argonu?

Str. 44: je obr. 6.7 dán obr. 6.4 + 2Pa? Tj. je parciální tlak argonu konstantní?