

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Benjamín Andreides

Název práce: Modelling of precursors for electron-beam induced deposition

Studijní program a obor: Physics/Biophysics and chemical physics

Rok odevzdání: 2022

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Doc. Mgr. Michal Fárník, PhD. DSc.

Pracoviště: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského v.v.i. AV ČR

Kontaktní e-mail: michal.farnik@jh-inst.cas.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/opponenta:

Práce Benjamína Andreidese se zabývá se teoretickým modelováním procesů s molekulou pentakarbonylu železa, která se používá jako prekurzor pro tvorbu 3D nanostruktur z atomů Fe metodou FEBID. Základem metody je depozice molekul $\text{Fe}(\text{CO})_5$ na povrch a disociace CO ligandů po interakci s elektrony a tyto procesy práce studuje.

V úvodu se autor věnuje vysvětlení FEBID metody, $\text{Fe}(\text{CO})_5$ molekule a základním procesům jako je ionizace a záchyt elektronu. Tato kapitola je velmi stručná a obsahuje některé nepřesnosti (okomentovanou verzi mohou poskytnout). Přestože se nejedná o jeho vlastní výzkum ale

v podstatě o výtah z existující literatury, mohl zde autor textu i obrázkům věnovat větší pozornost. Smysl takového „cvičení“ je, že vznikne text, který mohou dostat do rukou další studenti jako jednoduché úvodní čtení do dané problematiky – ovšem takový text by měl být kvalitnější.

V druhé kapitole autor uvádí čtenáře nejdříve do problematiky simulací obecně. Student používal ve své práci v podstatě komerční simulační program, ale rozsáhlá kapitola zatížená množstvím vzorců naznačuje, že pochopil a pronikl detailně do simulačních metod. Ve zbytku kapitoly pak představuje konkrétní studované systémy.

Pro mě nejzajímavější kapitolou byla následující kapitola s vlastními výsledky simulací a jejich srovnáním s experimenty. Výsledky jsou přinejmenším zajímavé a příslušná diskuse relevantní.

- Nejprve se soustředí na fragmentaci CO ligandů po ionizaci izolované $\text{Fe}(\text{CO})_5$ molekuly elektronem a srovnává výsledky modelu s publikovaným experimentem. Výsledky simulací se v principu shodují s experimentem a model příliš nezávisí na tom, jestli se přebytečná energie rozdělí statisticky po molekule nebo vloží do jedné vazby. Tato kapitola, ale příliš nových poznatků nepřináší, spíše jen potvrzuje experimentální pozorování.

- V další části student simuluje Ar klastry dopované $\text{Fe}(\text{CO})_5$ molekulou. Zde je zajímavé, že molekula deponovaná na klastr v tzv. „pickup“ procesu se vždy zanoří do klastru – tuto informaci nelze získat přímo z experimentu (jedině odvodit z velmi nepřímých pozorování). Naopak poněkud redundantní mi přijde diskuse ionizace molekul v klastru, když model předpokládá přímou ionizaci molekuly zatímco veškerá experimentální evidence naznačuje, že v klastru je nejdříve ionizován Ar-atom a následně se ionizuje $\text{Fe}(\text{CO})_5$ molekula přenosem náboje – tento mechanismus ale model bohužel nepostihuje, jak autor sám v diskusi konstatuje. Daná simulace je tedy spíše trochu disjunktním „cvičením“ než, že by byla reálným přínosem k pochopení experimentálních výsledků.

- V další podkapitole student zkoumá možnost depozice atomů kovu (Au) na povrch pomocí klastrů argonu, které zabrání vytvoření přímé vazby s povrchem. To je inovativní myšlenka a její teoretický výzkum před eventuálním budováním nákladného experimentu je jistě výborný nápad. Model naznačuje, že případná implementace nebude jednoduchá.

Závěrem k výsledkům obecně: U simulací hraje vždy velkou roli statistika, která mohla být v některých případech lepší – ovšem já nejsem schopen posoudit časovou náročnost simulací, zda tedy na to mohl mít student čas. Obrázky mohly být rozhodně lepší – co do grafického zpracování i co do přehlednosti a promyšlenosti toho, co mají demonstrovat. Text, až na drobné výjimky je v této části velmi dobrý. Celkově je v práci angličtina pěkná, našel jsem relativně málo překlepů (např. „als“ na str. 5) a chyb (např. „fastening up“ na str. 8 není urychlení ale upevnění; v daném kontextu by mohlo být požito např. „speeding up“).

Můj celkový dojem z práce je pozitivní a jen mě mrzí, že v ní vidím potenciál pro mnohem lepší práci. Ta bude jistě odvedena v příslušné publikaci, kterou – jak vím – kolegové chystají, nicméně to už nebude čistě práce Benjamína Andreidese, proto nehodnotím předloženou práci jako vynikající, ale jen jako velmi dobrou (až průměrnou), přestože si myslím, že vědeckým obsahem by při lepším zpracování na vynikající aspirovat mohla.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

S.2, 1. věta: „...gaseous precursor floating above the substrate surface.“ Je ten mechanismus přesně znám? Jsou molekuly prekursoru deponovány na povrch (vázané) nebo opravdu jen „plují nad povrchem, kde do nich narážejí elektrony?

O několik vět níže: „...a scale that is comparable with the size of the electron beam...“ Kolik nm to je a co je principiální limit?

S.15: „...a convenient time for the dissociation process is in a scale of nanoseconds (up to 1 μs)“
Ve fotodisociaci molekul obvykle zvažujeme časové škály typicky v řádu periody vibrace molekuly, které jsou řádově kratší. Proč zde potřebujeme tak dlouhou časovou škálu?

S.15, předposlední odstavec: Není mi úplně jasné náhlé zavedení iontu $\text{Fe}(\text{CO})_5^+$, přičemž výše se stále mluví o neutrální $\text{Fe}(\text{CO})_5$ molekule – uvažuje se pro iont konfigurace neutrálu nebo se simuluje nová rovnovážná konfigurace iontu?

S.30: Navržené „cluster landing“ zní zajímavě. Autor vidí problém v rychlosti Ar paprsku 490 m/s. To ovšem není žádné „magic number“ a podstatně pomalejší paprsky se dají připravit už jen triviálním ochlazením trysky. Samozřejmě, 12 m/s, ke kterým student dospěl na základě simulace už je těžší dosáhnout. Ale je možno střílet klastry na povrch pod velmi malým úhlem $\sim 0^\circ$, pod kterým se nerozbijí. Bylo by zajímavé nasimulovat, zda daný model spočte nějakou brzdou sílu („tření“), která se vytvoří v důsledku interakce mezi povrchem a klastrem letícím těsně nad ním. Zde by naopak mohlo být výhodné použít jiné molekuly než Ar.

Obecně: je známo, že v procesu FEBID hraje roli spíše disociativní záchyt (DEA) pomalých sekundárních elektronů a tvorba záporných iontů než přímá ionizace rychlejšími elektrony. Lze DEA daným softwarem rovněž simulovat jako ionizaci?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: