

Prof. dr hab. Jacek Szade,
Instytut Fizyki im A. Chełkowskiego
Uniwersytet Śląski

Tychy, 4.09.2020 r.

Opinia o rozprawie doktorskiej mgr Dawida Maciążka
pod tytułem:
**„Badanie efektów morfologicznych podczas bombardowania
powierzchni atomami oraz klastrami o energiach keV-owych”**

Rozprawa doktorska Dawida Maciążka powstała na Uniwersytecie Jagiellońskim, na Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, pod kierunkiem prof. dr. hab. Zbigniewa Postawy. Rozprawa stanowi podsumowanie siedmiu artykułów naukowych powstałych w latach 2016-2020, w których Doktorant jest współautorem. Do rozprawy zostały dołączone oświadczenia współautorów wraz z określeniem ich wkładu, a także jasno opisany wkład samego Doktoranta. Większość publikacji powstała we współpracy z bardzo dobrymi ośrodkami naukowymi z zagranicy. Dawid Maciążek jest pierwszym autorem w dwu publikacjach, w pozostałych figuruje na drugim lub trzecim miejscu. Wszystkie publikacje pochodzą z bardzo dobrych czasopism o wysokich współczynnikach wpływu (impakt faktorach). Są to czasopisma o szerszym zasięgu, jak Physical Review czy Journal of Physical Chemistry, albo bardziej specjalistyczne, jak Journal of American Society of Mass Spectrometry czy Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B.

W oświadczeniu Doktoranta o współautorstwie publikacji figuruje zawsze „zaprojektowanie oraz przeprowadzenie symulacji komputerowych metodą dynamiki molekularnej” oraz „przeprowadzenie analizy wyników symulacji...”, a także dyskusja wyników. W sześciu pracach Pan Maciążek stwierdził, że brał „udział w pisaniu części manuskryptu dotyczącej modelowania” natomiast w pracy opublikowanej w Analytical Chemistry stwierdza, że pisał manuskrypt. W tej samej pracy określił też swój wkład jako „stworzenie koncepcji modelu”. Wyróżnia to więc tę publikację jako najbardziej bezpośrednio związaną z rozprawą doktorską i w pewnym stopniu podsumowującą całą rozprawę.

Dawid Maciążek przygotował swoją rozprawę w jasny i przejrzysty sposób. W swoim przewodniku po publikacjach stanowiących wkład do doktoratu zawarł krótki wstęp przedstawiający zagadnienie badawcze rozprawy oraz jej kontekst naukowy. Udało mu się w sposób kompaktowy, ale bardzo treściwy opisać metodę obliczeniową będącą podstawowym narzędziem jego pracy badawczej. Zagadnienie badawcze czyli próba określenia związku morfologii próbki z bombardowaniem pociskami atomowymi i klastrowymi to ważny i aktualny problem współczesnej fizyko-chemii powierzchni. Ciekawym pomysłem jest podejście do tematu z „obu stron” czyli zbadanie wpływu morfologii powierzchni na efekty bombardowania, a także wpływu bombardowania na morfologię.

Doktorant wykorzystał w swych obliczeniach program LAMMPS, posiadający dobrze ugruntowaną pozycję wśród specjalistów od dynamiki molekularnej (MD). Algorytm programu wymaga ogromnych mocy obliczeniowych, a realizacja obliczeń zależy od warunków brzegowych, z których decydująca jest ilość atomów uwzględnianych w symulacji. Wykorzystane rozmiary próbki do modelowania miały rozmiary rzędu dziesiątek nanometrów, co oznacza kilka milionów uwzględnionych atomów. Inne warunki brzegowe są równie istotne, na przykład określenie kształtu obszaru, dla którego jest przeprowadzana symulacja. Doktorant skorzystał tu z metod opracowanych wcześniej w grupach prof. Postawy i prof. Garisson. W metodzie MD ważny jest dobór odpowiednich potencjałów oraz ich parametryzacja. Te wykorzystane w obliczeniach mgr Maciążka były standardowe dla poszczególnych próbek, a efekty ich zastosowania zostały sprawdzone przez porównanie z wynikami eksperymentu.

Drugi rozdział rozprawy został poświęcony omówieniu poszczególnych publikacji składających się na pracę doktorską. Dla każdej z nich omówienie podzielono na trzy akapity: motywacja, metodologia i wnioski. Przedstawione omówienie publikacji jest dobrze przygotowane, Doktorant wybrał najważniejsze wyniki nie ograniczając się do prostego streszczenia. Wykazane jest też powiązanie poszczególnych prac. Podano też podstawy formalizmu krateru oraz symulacji Monte Carlo co ułatwia śledzenie omówienia grupy prac dotyczących wpływu bombardowania na morfologię. Jedyne problemy w tej części rozprawy to błędna numeracja rysunków, która znalazła się w tekście na stronie 31.

Doktorant umieścił w tytule rozprawy związek efektów bombardowania powierzchni z jej morfologią. To rzeczywiście, oprócz metody obliczeniowej, wspólny mianownik wszystkich prac. Jednak warto podkreślić, że w publikacjach pojawia się szereg innych zagadnień badawczych o dużym znaczeniu dla fizyko-chemii powierzchni. Jednym z nich jest modelowanie profili głębokościowych. Ograniczenia możliwości obliczeniowych spowodowały konieczność zastosowania równania adwekcji-dyfuzji zaproponowanego przez Tuccitto. Zaproponowana metodologia parametryzacji na podstawie symulacji, ale też przy wykorzystaniu danych eksperymentalnych okazała się skuteczna dla układu NiCr, a także dla polistyrenu na podłożu krzemu, gdzie dodatkowo włączono reakcje chemiczne. Dla tych układów udało się dobrze

odtworzyć zależności profili od typu wiązki, a także w przypadku polistyrenu zbadać efektywność działania cząsteczek NO redukujących proces sieciowania na jego powierzchni.

Ciekawy i trochę odrębny problem został zbadany w pracy dotyczącej dysocjacji wiązań C-O podczas bombardowania przy wykorzystaniu wiązki $(\text{CO}_2)_n^+$. Zastosowanie symulacji metodą obliczeń dynamiki molekularnej pozwoliło na pokazanie dlaczego następuje fragmentacja molekuł CO_2 , mimo że energia kinetyczna na molekułę była mniejsza niż energia dysocjacji. W tym przypadku też okazało się, że morfologia powierzchni ma istotny wpływ na wyniki. Zbadano zarówno efekt dla płaskiej powierzchni Au, jak i chropowatej Ag.

Formowanie morfologii powierzchni to główne zagadnienie pozostałych prac. Wykorzystano tu formalizm funkcji krateru, którego istotą jest dość złożone równanie ruchu, w którym trzeba uwzględnić wiele efektów aby uzyskać między innymi informację, czy będą indukowane struktury powierzchniowe takie jak riple, czy też nastąpi wygładzanie powierzchni. Dla tych prac metoda dynamiki molekularnej została porównana z metodą Monte Carlo, rozwijaną w grupie prof. Hoblera z Wiednia. Ciekawe jest, że stosowana przez Doktoranta metoda symulacji, jako oparta na bardziej podstawowych założeniach posłużyła do sprawdzenia jakości obliczeń metodą Monte Carlo i pozwoliła na wprowadzenie do niej poprawek zwiększających dokładność obliczeń współczynników rozpylania. Ciekawym wynikiem jest wprowadzenie szorstkości powierzchni symulowanej metodą MD do obliczeń Monte Carlo. Mimo, że badania te zostały wykonane dla powierzchni modelowych, jak krystaliczny, czy amorficzny krzem, to można się spodziewać, że uzyskane wyniki będą wykorzystane na przykład podczas wytwarzania różnych nanostruktur przy użyciu zogniskowanych wiązek jonowych.

Mgr Maciążek zdaje sobie sprawę, że stosowane przez niego metody symulacji, zwłaszcza te bazujące na funkcji krateru są oparte na złożonych matematycznych modelach i żmudnych obliczeniach więc pokusił się o sformułowanie intuicyjnego modelu modyfikacji powierzchni przez klastrowe wiązki jonowe (praca w Analytical Chemistry). Zadając pytanie jaki jest efekt transferu masy w pobliżu powierzchni na jej topografię był w stanie uzyskać proste zależności tego transferu od kąta padania wiązki. Wybrał wiązki Ar_{3000} o energiach od 15-30 keV oraz podłoże krzemu i złota. Wyniki zostały porównane z eksperymentalnymi obrazami uzyskanymi metodą AFM. Uzyskano konkretne wartości kąta padania wiązki nazwane kątem krytycznym, rozdzielające obszary dla których następuje wygładzanie powierzchni oraz rozbudowa nanostruktur. Jest to bardzo ważny wynik, mimo, że według autorów może być zastosowany tylko dla klastrow, gdyż dla atomowych pocisków efekt rozpylania nie może być pominięty.

Ważnym wynikiem publikacji włączonych do rozprawy jest pokazanie rezultatów symulacji dla konkretnych wartości parametrów wiązki takich jak kąt padania, rodzaj i rozmiar pocisku, często dla różnych podłoży. Takie wyniki mogą być zastosowane podczas realizacji eksperymentów i być wykorzystane do wytwarzania nanostruktur czy optymalizacji procesu profilowania głębokościowego.

Dawid Maciążek wykazał w swojej rozprawie doktorskiej, że znakomicie opanował metody symulacji metodą dynamiki molekularnej, potrafi odpowiednio dobrać warunki brzegowe i parametry do danego zagadnienia. W zestawie publikacji włączonych do rozprawy pojawia się duży zestaw wiązek jonowych, włączając w to takie, jak rzadko używane $(\text{CO}_2)_n^+$. Szerokie jest też spektrum bombardowanych powierzchni. Dla osoby wykonującej symulacje oznacza to konieczność właściwego przygotowania każdego modelowania, dopasowanego do rozwiązywanego problemu.

Uważam, że oparta na siedmiu publikacjach rozprawa doktorska mgr Dawida Maciążka zawiera bardzo dużo wartościowych wyników naukowych i wnosi istotny wkład w zrozumienie procesów zachodzących podczas bombardowania powierzchni wiązką jonową.

Stwierdzam, że rozprawa mgr Dawida Maciążka spełnia wymogi stawiane rozprawom doktorskim i wnioskuję o dopuszczenie Doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

J. Dole