

Studium interakce plazmatu s pevnými látkami postupy moderní počítačové fyziky

Vedoucí: Prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc.
Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Anotace

Práce bude věnována počítačovému studiu procesů probíhajících při interakci nízkoteplotního plazmatu s povrchy vnořených pevných látek. Při této interakci se na rozhraní mezi nenarušeným plazmatem a substrátem vytvoří přechodová oblast, která výrazně ovlivňuje procesy probíhající na podložce nebo sondě. Při studiu těchto procesů se vedle základního přístupu experimentálního a případně teoretického uplatňují metody počítačové fyziky – především u složitých problémů jako je studium plazmatu při vyšších tlacích, studium plazmatu tvořeného více druhy částic nebo studium dynamických procesů v plazmatu. Zejména částicové počítačové modelování umožňuje získat detailní informace o studovaných procesech, výraznou nevýhodou této techniky je však velmi malá efektivita programů, především ve více dimenzích. Zde se s úspěchem mohou uplatnit metody moderní počítačové fyziky – evoluční modelování, neuronové sítě, apod.

Zásady pro vypracování:

1. Seznámit se s problematikou.
2. Vytvořit částicový model interakce elektropozitivního plazmatu s vnořenou pevnou látkou ve více dimenzích (kombinací metody molekulární dynamiky a metody Monte Carlo).
3. Rozšířit tento model na multikomponentní plazma.
4. Studovat vliv složení plazmatu na procesy ve stínící vrstvě a na rozdělení nabitých částic dopadajících na povrch vnořené látky.
5. Testovat možnost zvýšení efektivity výsledného programu postupy moderní počítačové fyziky (především evolučním modelováním), případně i prostředky hardwarovými (výpočty s využitím grafických karet, apod.).

Seznam odborné literatury:

- R. Hrach: Počítačová fyzika I, Ústí nad Labem 2003.
F. F. Chen: Úvod do fyziky plazmatu, Academia, Praha 1984.
T. Back: Genetic Algorithms 1,2, IOP Publishing, London 1999 + 2000.
Další literatura po dohodě s vedoucím diplomové práce.

Poznámka: Téma předpokládá samostatnou práci v programovacím jazyku Fortran 90/95 nebo C/C++. V případě zájmu lze téma modifikovat na studium diagnostiky vysokoteplotního plazmatu.

Počítačové studium růstu tenkých kovových a kompozitních vrstev a transportu náboje v nich

Vedoucí: Prof. RNDr. Rudolf Hrach, DrSc.
Katedra fyziky povrchů a plazmatu

Anotace

Tenké kovové vrstvy připravované na dielektrických podložkách jsou v počátečních fázích růstu tvořené izolovanými objekty. Kompozitní vrstvy struktury kov-dielektrikum jsou tvořeny kovovými zrny umístěnými v dielektrické matici. Vlastnosti takových tenkovrstvových systémů velmi silně závisí na koncentraci kovové složky – pro malé koncentrace jsou kovové objekty od sebe zcela izolovány a vrstva má dielektrický charakter, naopak pro velké koncentrace kovové složky se jedná o kovovou vrstvu s dielektrickými oblastmi. Fyzikálně mimořádně zajímavá a i prakticky dobře aplikovatelná je přechodová oblast, kdy se původně izolovaná zrna k sobě přibližují a je možný přenos náboje mezi nimi.

Pro studium procesů nukleace a růstu kovových objektů je velmi vhodné používat kombinaci počítačového modelování a počítačové analýzy experimentálních dat. Vhodné metody počítačové fyziky jsou: metoda molekulární dynamiky pro fázi nukleace, metoda Monte Carlo pro fázi růstu a slévání objektů a metody založené na teorii matematické morfologie a na fourierovské optice pro analýzu obrazu.

Mechanismem přenosu náboje je nejprve tunelový jev a při dalším zvýšení koncentrace kovové složky v kompozitu i přímá ohmická vodivost. Tato oblast se nazývá přechod dielektrikum-kov nebo také perkolační práh a k jejímu studiu lze využít teorii perkolace.

V poslední době se v praxi začíná uplatňovat tzv. pulzní deposice vrstev, která přináší další možnosti ovlivňování vlastností vytvářených tenkovrstvových struktur v průběhu jejich přípravy. I pro studium těchto procesů je velmi vhodná metodika částicového modelování.

Zásady pro vypracování:

1. Seznámení s problematikou.
2. Navržení modelu nukleace založeného na metodě molekulární dynamiky s využitím fyzikálních parametrů tenké vrstvy.
3. Navržení modelu růstu tenké kovové vrstvy založeného na metodě Monte Carlo. Jako vnitřní parametry modelu budou využity výstupy z molekulárně-dynamického modelu.
4. Propojení obou modelů, generování tenkovrstvových systémů pro různé hodnoty modelových parametrů a jejich vyhodnocování vybranými algoritmy zpracování obrazu.
5. Dále se zaměřit na jednu z oblastí:
 - a) modelování kompozitních vrstev a charakterizování jejich morfologie,
 - b) studium pulzní deposice tenkovrstvových systémů,
 - c) studium transportních vlastností tenkovrstvových systémů, tj. nalezení perkolačních trajektorií procházejícího proudu a diskuse vazby mezi tvarem vzniklých vodivostních klastrů, odporem kompozitní vrstvy a morfologií kompozitu.
6. Aplikace vytvořeného počítačového aparátu na analýzu experimentálně získaných dat,

Seznam odborné literatury:

- R. Hrach: Počítačová fyzika I, II, Ústí nad Labem 2003.
J. Šimek: Doktorská dizertační práce, MFF UK 2006.
R. Hrach, S. Novák, M. Švec, J. Škvor: Study of Electron Transport in Composite Films below the Percolation Threshold, Lecture Notes in Computer Science 3991 (2006), 806.
M. Švec: Doktorská dizertační práce, MFF UK 2007.

Poznámka: Téma je vhodné pro posluchače teoretičtější zaměřených oborů (Teoretická fyzika, Matematické a počítačové modelování) a předpokládá samostatnou práci v programovacím jazyku Fortran 90/95 nebo C/C++.