

Válaszok Dr. Gubicza Jenő bíráló észrevételeire, az általa feltett kérdésekre

Mindenekelőtt nagyon köszönöm Dr. Gubicza Jenő, egyetemi tanár, az MTA Doktora, gondos bírálói munkáját, elismerő szavait és pozitív bírálói véleményét.

Feltett kérdéseire, észrevételeire a következő válaszokat adom:

Sajnálom, hogy többszöri újraolvasás ellenére sajtóhibák maradtak a dolgozatban, amiért megértést kérek.

1. „A 9. oldalon a (2.15) egyenletben a $(DA-DB)$ -t tartalmazó tagot nem kell megszorozni $\nabla\rho_A$ -val? Ugyancsak a (2.15) egyenlet felett szerepel, hogy $j'_A = j'_B$. Nem hiányzik itt egy mínusz előjel j'_B előtt?”

Természetesen meg kell szorozni, és a negatív előjel is hiányzik, köszönöm az észrevételt.

2. „Mekkora volt a szinkrotronos mérésekben használt röntgensugárzás hullámhossza? Milyen szempontok alapján választották ezt a hullámhosszat?”

A határfelület élesedésének mérésekor a hullámhossz 0,155 nm, azaz a fotonenergia (a hc/λ formula alapján) 8 keV volt. Két alapvető oka volt annak, hogy ezt a hullámhosszt választottuk. Egyrészt ez lényegében a Cu K-alfa vonalának felel meg, amit a laboratóriumi méréseknél is használtunk az előmérések, valamint számolások során. Másrészt pedig a nyalábot működtető munkatárs is ezt ajánlotta, figyelembe véve a feladatot és a nyalábszatona tulajdonságait.

A Co/a-Si és Ni/a-Si rendszereken végzett diffrakciós mérések esetében a hullámhossz 0,1033 nm (12 keV) volt. Itt a választást a Co, illetve a Ni és a keletkező CoSi, Co₂Si, illetve NiSi, Ni₂Si fázisok rácsparaméterei határozták meg. Így egy kényelmesen mérhető tartományba kerültek a csúcsok.

A szinkrotron állóhullámos módszer esetében a GIXRF méréseknél mindig annak az anyagnak az abszorpciós éléhez közeli, de a feletti, hullámhosszt kell választani, melynek az összetételprofilját meg kívánjuk határozni. Ezért a Co-Si rendszer esetében 0,1569 nm (7,9 keV) volt a választásunk (a Co K abszorpciós éle: 7,709 keV, 0,1608 nm). Az EXAFS méréseknél viszont az abszorpciós él előttről indulva, folyamatosan változtatni kell a nyaláb energiáját, lehetőség szerint addig, míg értékelhető oszcillációkat mérünk. Ezért itt a hullámhosszt a 0,1625 – 0,1459 tartományban változtattuk (7,65 – 8,50 keV). A Ni-Si esetében, hasonló okok miatt 0,1476 nm (8,4 keV) volt a választott hullámhossz a GIXRF mérések esetében (a Ni K abszorpciós éle: 8,333 keV, 0,1488 nm), és a 0,1494 – 0,1442 nm (8,3 – 8,6 keV) tartományban változtattuk a hullámhosszt az EXAFS mérések esetében.

3. „Multirétegek előállításakor gyakran előfordul, hogy a fázishatárokon miszfit diszlokáció hálózat alakul ki. Ráadásul a diszlokáció sűrűség a határokon tovább növekedhet a rétegek plasztikus deformációjakor (pl. hengerlés). A fázishatárokon megnövekedett diszlokáció sűrűség akár nagyságrendekkel is megváltoztathatja a diffúzió gyorsaságát, így a diffúziós együttható helyfüggését nemcsak a koncentráció változása, hanem a diszlokáció sűrűség inhomogén eloszlása is okozhatja. Kérem ismertesse röviden, hogy miként lehetne ezt a hatást beépíteni a modelljébe! A fázishatáron lévő magasabb diszlokáció sűrűség jelentős mértékben megváltoztatja-e a diffúzió kinetikáját és a koncentráció eloszlást multirétegekben?”

A legegyszerűbb és talán legcélszerűbb beépítési lehetőség az, hogy a diffúziós együtthatót (kontinuum modell esetében) vagy az ugrási frekvenciát (KMF modell esetében) megszorozzuk egy helytől függő paraméterrel. Ennek megfelelően változni fog a fluxus is a hely függvényben. Lényegében ebbe a helyfüggő paraméterbe tetszőleges eloszlású és mértékű diffúzióegyüttható változás beépíthető. Természetesen még csak időben állandónak sem kell lennie ennek a függvénynek, a modellezni kívánt hatás (pl. hengerlés) szerint a diffúzióval egyidőben számolható és változtatható, ami visszahat a diffúzióra. Hasonló dolgot már megvalósítottunk, amikor a gömbi geometriában lejátszódó reaktív diffúziót modelleztük. Ott a vakancia források és nyelők helye a fázishatáron volt, amely a fázis növekedésével vándorolt. Ennek kiterjesztésén jelenleg is dolgozunk. A diszlokáció sűrűség modellezésén eddig nem dolgoztunk, de mindenképpen megfontolandó ötlet. Köszönöm a probléma felvetését.

Mindez természetesen jelentősen megváltoztathatja a koncentrációeloszlás alakját és a folyamatok lejátszódásának gyorsaságát is. A folyamat időfüggésére gyakorolt hatás – lineáris-parabolikus átmenetre gondolok – véleményem szerint nagymértékben attól függ, hogy ezt a helyfüggő paramétert időfüggetlennek tételezzük fel vagy sem, illetve ha nem, akkor hogyan függ változása az időtől. Egyértelmű válasz minden bizonnyal csak konkrét esetekben, az adott estre elvégzett modellszámolások alapján adható.

4. „A Ni/Cu határfelület élesedésével kapcsolatos szimulációkban kicserélődéses diffúziós mechanizmust tételeztek fel (40. oldal). Mennyire reális ez a feltételezés? Milyen mértékben befolyásolja a kapott eredményt, ha vakancia mechanizmust feltételezünk?”

Természetesen a valódi mechanizmus nem kicserélődéses. Azonban azokban az esetekben, ahol feltételezhető, hogy a vakanciák koncentrációja nem tér el jelentősen az egyensúlytól, ott általában ez nem rossz közelítés, néha „effektív kicserélődést” is emlegetnek ebben az esetben, hiszen a vakancia „csak asszisztál” a helycseréhez. Végeztünk, illetve mások is végeztek számításokat az élesedésre vonatkozóan vakancia mechanizmust feltételezve, és azt tapasztalták, hogy az élesedés végbemegy, lényegében úgy, ahogyan azt a kicserélődéses mechanizmust feltételezve kaptuk. Kontinuum modellek is erre az eredményre vezettek. A kísérletek is azt bizonyítják, hogy csupán a jelentős diffúziós aszimmetria lényeges, nem a mechanizmus. Természetesen a vakanciák térbeli eloszlása jelentős szerepet játszhat a diffúziós aszimmetriában, például a valamilyen oknál fogva megjelenő nem egyensúlyi vakanciák eloszlásából származó mozgékonyaságváltozás ülhet az egyensúlyi

vakanciakonzentráció melletti diffúziós együtthatók koncentrációfüggésére. Ez pedig jelentősen befolyásolhatja az összetételprofil alakjának változását.

5. „Az 5.3.1 fejezetben a Ge(111) hordozóra növesztett Si réteg amorf illetve kristályos állapota esetén jelentősen más hőmérsékleteket alkalmaztak a diffúziós mérésekben (amorf Si: 623 K, kristályos Si: 740-755 K). Mi volt ennek az oka?”

A beoldódási kísérletek esetében, nagyon gondosan kellett megválasztani a hordozóra felvitt réteg vastagságát, hogy azon keresztül még mérhető jelet kapjunk a hordozóból. Ez volt minden ilyen kísérlet tervezésénél a kiindulási feltétel. Ezután meg kellett találnunk egy olyan hőmérsékleti tartományt, ahol a beoldódás folyamata mérhető gyorsasággal zajlik, azaz se nem túl gyors ahhoz, hogy az alkalmazott módszerrel mérhető legyen, se nem túl lassú ahhoz, hogy kivitelezhetetlenné válik (pl. kivárthatatlan az érdemleges változás). Ezt a tartományt előre, irodalmi diffúziós adatok alapján megbecsültük, majd a kísérletek tapasztalatai alapján pontosítottuk. Az amorf és a kristályos Si esetében ilyen különbség adódott a megvalósíthatósági hőmérséklettartományok között.

Debrecen, 2016. szeptember 27.

.....
Erdélyi Zoltán