



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο  
Σχολή Χημικών Μηχανικών  
Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών  
Υπολογιστική Μηχανική

Πολλαπλότητα Λύσεων σε Συμμετρικό Αντιδραστήρα  
Χημικής Απόθεσης από Ατμό:  
Συνύπαρξη Συμμετρικών και Μη-Συμμετρικών Πεδίων  
Ροής

Μεταπτυχιακή Εργασία

Παναγιώτης Η. Γιαννατσέλης

Επιβλέπων: Α. Μπουντουβής, Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, 2014



Στην οικογένειά μου.



## Ευχαριστίες

Πρώτα απ' όλους θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα της εργασίας αυτής, Καθηγητή Ανδρέα Μπουντουβή. Αρχικά, τον ευχαριστώ για τη δυνατότητα που μου παρείχε να εκπονήσω υπό την επίβλεψή του την μεταπτυχιακή μου διατριβή και να ασχοληθώ με αυτό το ενδιαφέρον αντικείμενο. Επίσης, τον ευχαριστώ για τις συμβουλές και τις εύστοχες παρατηρήσεις κατά την εκπόνηση της εργασίας, αλλά κυρίως τον ευχαριστώ για την στάση όχι απέναντι αλλά δίπλα σε εμένα και σε όλους τους φοιτητές.

Κατά την εκπόνηση της εργασίας, εκτός από τον Καθηγητή Ανδρέα Μπουντουβή, οι μεταδιδακτορικοί ερευνητές Ελένη Κορωνάκη και Νίκος Χειμαριός βοήθησαν με συμβουλές αλλά και καθοδήγησή κάποιες φορές καθώς η εμπειρία τους σχετικά με το θέμα είναι μεγάλη. Τους ευχαριστώ για τον χρόνο που αφιέρωσαν για μένα, παρά τον μεγάλο φόρτο εργασίας τους, αλλά και για την άποψη στο θέμα, στην οποία με οδήγησαν οι συζητήσεις μας.

Ευχαριστώ τους φίλους μου που πάντα κατά τη διάρκεια των σπουδών μου είχαν κατανόηση που δεν μπορούσα να τους δω αλλά και για τις στιγμές που ζούμε μαζί. Οι στιγμές αυτές ξαναγεμίζουν τις μπαταρίες μου και δεν θέλω να φανταστώ τη ζωή μου χωρίς αυτές.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου για την υποστήριξη και την πίστη τους σε εμένα και τα όνειρά μου.



## Περίληψη

Η χημική απόθεση από ατμό (ΧΑΑ) είναι μία διεργασία που χρησιμοποιείται ευρέως στην παραγωγή λεπτών μεταλλικών υμενίων με εφαρμογή, μεταξύ άλλων, σε μικρο- και νανο-εξαρτήματα ηλεκτρονικών συσκευών. Σημαντική συνεισφορά στον σχεδιασμό της διεργασίας παραγωγής έχει πλέον η προσομοίωση με προχωρημένες τεχνικές υπολογιστικής ρευστομηχανικής. Εμπορικά λογισμικά όπως το ANSYS/FLUENT μπορούν να προβλέψουν αποδοτικά τη συμπεριφορά του αντιδραστήρα ΧΑΑ για διάφορες τιμές παραμέτρων λειτουργίας, αποτυπώνοντας έτσι τον χώρο λύσεων του μαθηματικού μοντέλου που περιγράφει τη διεργασία. Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία ασχολείται με την πολλαπλότητα λύσεων που εμφανίζεται σε έναν αξονοσυμμετρικό αντιδραστήρα ΧΑΑ, στον οποίο επιπλέον έχουν επιβληθεί αξονοσυμμετρικές συνοριακές συνθήκες. Στόχος είναι η διερεύνηση της συνύπαρξης συμμετρικών και μη συμμετρικών λύσεων για τις ίδιες συνθήκες λειτουργίας.

Αρχικά, αναζητούνται συμμετρικά πεδία ροής σε 3D μοντέλο της γεωμετρίας του αντιδραστήρα. Στους υπολογισμούς δεν λαμβάνονται υπόψη χημικές αντιδράσεις. Η παράμετρος βηματισμού είναι η παροχή μάζας του αερίου στην είσοδο του αντιδραστήρα. Προκύπτουν διάφοροι κλάδοι ευσταθών λύσεων οι οποίοι για κάποιες περιοχές τιμών της παροχής μάζας συνυπάρχουν, δηλαδή για ίδιες τιμές συγκεκριμένων παραμέτρων, υπολογίζονται διαφορετικές λύσεις οι οποίες ανήκουν σε διαφορετικό κλάδο η καθεμιά.

Κατά την επίλυση, βρέθηκαν λύσεις που φαίνονται να είναι συμμετρικές. Γίνεται εκτίμηση της ταύτισης των λύσεων αυτών με τις λύσεις που προέκυψαν από επίλυση με το 2D μοντέλο της γεωμετρίας για τις ίδιες τιμές παραμέτρων λειτουργίας.

Τέλος, στην περιοχή τιμών που παρατηρείται σημείο στροφής κατά την επίλυση με το 2D μοντέλο, η συμπεριφορά των κλάδων των λύσεων που προέκυψαν από την επίλυση με το 3D μοντέλο φαίνεται διαφορετική. Η διερεύνηση συνεχίζεται και είναι το εφεπάλτήριο για περαιτέρω έρευνα.





## Abstract

Chemical Vapor Deposition (CVD) is a process that is employed widely for the production of micro- and even nano-components of electronic devices that have to meet strict quality criteria. Commercial computational fluid dynamics (CFD) software, such as ANSYS/FLUENT, are routinely used for the efficient simulation and prediction of the behaviour of CVD reactors and the computation of their solution space.

In the current Master's thesis the existence of multiple states for the same operating conditions is studied numerically. The purpose is to trace axisymmetric and non-axisymmetric states.

Firstly, the geometry of the reactor is studied and axisymmetric solutions are sought with computations using a 3D model without taking into account the effect of chemical reactions. During the computations with the commercial CFD software ANSYS/FLUENT, first order parameter continuation is used. Computations are carried out for different realistic mass inflow rate values. Several stable branches of solutions are found. Some of those coexist, meaning that, for the same values for every parameter, solutions belonging to different branches are found.

The computations lead to solutions that look axisymmetric. They are compared to solutions that are derived from computations with the 2D model.

Finally, in the parameter range where the 2D solution space has a turning point, the 3D model predicts a different behaviour. Further investigation is underway in this parameter range.

## Ακρωνύμια

ΕΜΠ Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

ΧΑΑ Χημική Απόθεση από Ατμό

3D τριδιάστατος

2D διδιάστατος

ΥΡΔ Υπολογιστική Ρευστοδυναμική

---

CFD Computational Fluid Dynamics

NTUA National Technical University of Athens

# Περιεχόμενα

Περιεχόμενα	i
<b>1 Εισαγωγή</b>	<b>1</b>
1.1 Σκοπός της εργασίας . . . . .	2
1.2 Δομή της εργασίας . . . . .	2
<b>2 Χημική Απόθεση από Ατμό</b>	<b>3</b>
2.1 Η Διεργασία . . . . .	3
2.1.1 Αντιδραστήρας ΧΑΑ . . . . .	4
2.1.2 Περιγραφή των Φαινομένων που Επικρατούν στον Αντιδραστήρα ΧΑΑ [1],[7] . . . . .	5
2.1.3 Κινητική της ΧΑΑ και Απόθεση [6] . . . . .	10
2.2 Πολλαπλότητα και Μη-Αξονοσυμμετρικές Λύσεις σε Συμμετρικές Γεωμετρίες. . . . .	10
2.2.1 Επίδραση Μη-Αξονοσυμμετρικών Λύσεων . . . . .	11
<b>3 Προσομοίωση Χημικής Απόθεσης από Ατμό</b>	<b>13</b>
3.1 Υπολογιστική Ρευστοδυναμική στη ΧΑΑ . . . . .	13
3.1.1 Η Μέθοδος των Πεπερασμένων Όγκων[9] . . . . .	14
3.2 Τεχνική Βηματισμού σε Παράμετρο [3],[7] . . . . .	16
3.3 Απεικόνιση Κλάδων Λύσεων. . . . .	17
<b>4 Παρουσίαση Αποτελεσμάτων</b>	<b>19</b>
4.1 Το Πρόβλημα που Επιλύεται . . . . .	19
4.2 Επίλυση με 2D Μοντέλο . . . . .	21

4.3	Σύγκριση 2D και 3D Αποτελεσμάτων . . . . .	22
4.3.1	Παροχή Μάζας $10^{-5} \frac{kg}{s}$ . . . . .	23
4.3.2	Παροχή Μάζας $3 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ . . . . .	26
4.4	Συμμετρικά Αποτελέσματα από Επίλυση με το 3D Μοντέλο . . . . .	29
4.5	Κλάδοι Λύσεων του 3D Μοντέλου . . . . .	31
4.6	Σύγκριση Λύσεων . . . . .	35
<b>5</b>	<b>Συμπεράσματα - Προτάσεις για Συνέχεια της Διερεύνησης</b>	<b>37</b>
5.1	Συμπεράσματα . . . . .	37
5.2	Προτάσεις για Συνέχεια της Διερεύνησης . . . . .	38

# Κεφάλαιο 1

## Εισαγωγή

Η υπολογιστική ισχύς που μπορεί να διατεθεί για την επίλυση ενός προβλήματος εισάγει περιορισμούς από τη μέρα που εφευρέθηκε ο ηλεκτρονικός υπολογιστής μέχρι και σήμερα. Η τεχνολογία συνεχώς αναπτύσσεται και ο ρυθμός ανάπτυξης της μάλιστα είναι ταχύς. Η ανάπτυξη της τεχνολογίας δίνει τη δυνατότητα ένας προσωπικός υπολογιστής να λύνει σε λίγα λεπτά ένα πρόβλημα, που πριν από λίγα χρόνια, ο τότε καλύτερος υπολογιστής του κόσμου, δεν θα είχε καταφέρει να τελειώσει την επίλυση στα χρόνια που μεσολάβησαν. Από την άλλη πλευρά, οι έρευνες που γίνονται δημιουργούν νέες απορίες και επομένως νέα προβλήματα προς επίλυση. Οι επιστήμονες μπαίνουν στη διαδικασία να επιχειρήσουν προσομοίωση σε διεργασίες που η πολυπλοκότητά τους δεν θα το επέτρεπε παλιότερα. Επίσης, από την τεχνολογική πρόοδο δημιουργούνται νέες ανάγκες και για να τις καλύψει ο άνθρωπος εφευρίσκει νέες διεργασίες. Η “μάχη” αυτή που φαίνεται να κάνει ο μηχανικός που ασχολείται με την Υπολογιστική Μηχανική εναντίον των περιορισμών της τεχνολογίας δεν αναμένεται να τελειώσει σύντομα, γεγονός που έχει το θετικό επακόλουθο ότι ο μηχανικός θα συνεχίσει να λύνει νέα προβλήματα και επομένως θα συνεχίσει να είναι χρήσιμος.

Μία σύγχρονη διεργασία, που χρησιμοποιείται κυρίως στην παραγωγή εξαρτημάτων ηλεκτρικών συσκευών, είναι η Χημική Απόθεση από Ατμό (ΧΑΑ). Η ανάγκη για συνεχή βελτίωση της ποιότητας των προϊόντων της διεργασίας οδηγεί στην απαίτηση για προσομοιώσεις που πλησιάζουν όλο και περισσότερο την πραγματικότητα. Η διεργασία μοντελοποιείται ως μια αντιδρώσα ροή στο εσωτερικό μιας γεωμετρίας. Η αρχική εκτίμηση που έκαναν οι επιστήμονες που επιχείρησαν τις πρώτες υπολογιστικές προσομοιώσεις της διεργασίας, ότι για αξονοσυμμετρικές γεωμετρίες η ροή είναι αξονοσυμμετρική επιβεβαιώνεται μέχρι σήμερα όμως αυτό είναι ένα μόνο τμήμα της πραγματικότητας. Σε πιο πρόσφατες μελέτες έχει επιβεβαιωθεί υπολογιστικά αλλά και πειραματικά πως μη-αξονοσυμμετρικές ροές μπορούν να προκύψουν για κάποιες συνθήκες λειτουργίας, σε κάποιες αξονοσυμμετρικές γεωμετρίες. Ακόμη, για κάποιες συνθήκες λειτουργίας παρατηρείται πολλαπλότητα λύσεων. Για να μπορεί ο χειριστής

του αντιδραστήρα ΧΑΑ να οδηγήσει τη διεργασία ώστε τελικά να προκύψουν προϊόντα προκαθορισμένης ποιότητας πρέπει να κατανοηθούν οι μηχανισμοί που οδηγούν στις διάφορες δυνατές λύσεις.

## 1.1 Σκοπός της εργασίας

Η παρούσα εργασία φιλοδοξεί να αποτελέσει ένα ακόμη βήμα προς την κατανόηση του μηχανισμού δημιουργίας μη-αξονοσυμμετρικών πεδίων ροής και πολλαπλότητας λύσεων στο εσωτερικό αξονοσυμμετρικής γεωμετρίας αντιδραστήρα ΧΑΑ. Η μελέτη εστιάζει στην επίδραση της παροχής μάζας στην είσοδο του αντιδραστήρα για σταθερές τις άλλες συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα.

Ειδικότερα, γίνεται μια προσπάθεια για σύγκριση των λύσεων που προκύπτουν όταν η ροή στο εσωτερικό ενός αντιδραστήρα με αξονοσυμμετρική γεωμετρία επιλύεται με τριδιάστατο μοντέλο επίλυσης. Οι παραπάνω λύσεις, εκτός από την σύγκριση μεταξύ τους, υποβάλλονται σε σύγκριση με τις λύσεις που προέκυψαν όταν η επίλυση γίνεται με διδιάστατο μοντέλο επίλυσης. Χρησιμοποιείται εμπορικό λογισμικό.

Γίνεται προσπάθεια για εύρεση λύσεων σε μια περιοχή τιμών για την παροχή μάζας στην είσοδο που έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον (συνθήκες που εντός του αντιδραστήρα λαμβάνει χώρα το φαινόμενο της μικτής συναγωγής).

## 1.2 Δομή της εργασίας

Η εργασία αυτή, διαρθρώνεται στη συνέχεια ως εξής:

- Στο **Κεφάλαιο 2** περιέχεται η βασική θεωρία σχετικά με τη διεργασία Χημικής Απόθεσης από Ατμό. Περιγράφονται τα φαινόμενα που επικρατούν στο εσωτερικό του αντίστοιχου αντιδραστήρα.
- Στο **Κεφάλαιο 3** παρουσιάζονται οι βασικές αρχές της προσομοίωσης αντιδραστήρα ΧΑΑ με υπολογιστική ρευστοδυναμική (ΥΡΔ).
- Στο **Κεφάλαιο 4** γίνεται η παρουσίαση των αποτελεσμάτων των υπολογισμών που πραγματοποιήθηκαν στα πλαίσια της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας και ο σχολιασμός τους. Γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων που προέκυψαν με χρήση δύο διαφορετικών μοντέλων επίλυσης.
- Στο **Κεφάλαιο 5** παρατίθενται τα συμπεράσματα στα οποία οδήγησε η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία. Επίσης, αναφέρονται προτάσεις για συνέχεια της διερεύνησης προς την κατεύθυνση που κινήθηκε η εργασία αυτή.

# Κεφάλαιο 2

## Χημική Απόθεση από Ατμό

Στο κεφάλαιο αυτό παρατίθενται ενότητες που περιέχουν τη βασική θεωρία σχετικά με τη διεργασία Χημικής Απόθεσης από Ατμό, με την οποία ασχολείται η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία. Περιγράφεται η διεργασία και τα κυριότερα φυσικά και χημικά φαινόμενα που τη διέπουν. (Παραλείπεται το κομμάτι της ΥΡΔ στη ΧΑΑ καθώς, λόγω της μεγάλης σημασίας του για την παρούσα μεταπτυχιακή εργασία, αποτελεί μεμονωμένα αντικείμενο ολόκληρου του τρίτου Κεφαλαίου.)

### 2.1 Η Διεργασία

Χημική Απόθεση από Ατμό (Chemical Vapor Deposition-CVD) ονομάζεται η διεργασία κατά την οποία μια στερεά ουσία αποτίθεται σε μια θερμαινόμενη επιφάνεια (στερεό δισκίο - wafer) με τον εξής τρόπο: Η στερεά ουσία σχηματίζεται από την αντίδραση μιας άλλης ουσίας, του προδρόμου υλικού (precursor), στην θερμαινόμενη επιφάνεια. Το πρόδρομο υλικό αρχικά είναι διαλυμένο σε ένα φέρον αέριο. Τελικά πάνω στη θερμαινόμενη επιφάνεια μένει ένα στερεό υμένιο (film) από τη στερεά ουσία[6].

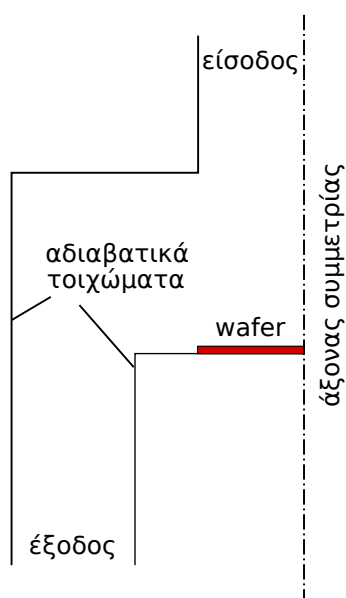
Η σημασία της ΧΑΑ είναι μεγάλη καθώς έχει σημαντικές εφαρμογές. Η πιο διαδεδομένη εφαρμογή της ΧΑΑ είναι η παραγωγή εξαρτημάτων ηλεκτρονικών συσκευών, τα οποία είναι αναγκαίο να έχουν διαστάσεις της τάξης μεγέθους των μικρομέτρων η ακόμη και των νανομέτρων. Έτσι, σημαντική είναι η ποιότητα του προϊόντος της διεργασίας, το οποίο πρέπει να έχει συγκεκριμένα χαρακτηριστικά. Τέτοια χαρακτηριστικά είναι το πάχος και η απαιτούμενη ομοιομορφία της επιφάνειας που δημιουργείται.

Λόγω της μεγάλης χρησιμότητας της διεργασίας αλλά και του γεγονότος ότι η ποιότητα του προϊόντος πρέπει να είναι σύμφωνη με επιθυμητές προδιαγραφές, η προσομοίωση

της διεργασίας έχει αποτελέσει αντικείμενο εκτενούς έρευνας. Η έρευνα επικεντρώνεται στην κατανόηση των μηχανισμών που επιδρούν στη μορφή του φιλμ της στερεάς ουσίας που δημιουργείται επάνω στην θερμαινόμενη επιφάνεια. Πιο συγκεκριμένα, το μεγαλύτερο ενδιαφέρον της έρευνας που γίνεται για την εξέλιξη της ΧΑΑ επικεντρώνεται στο να δημιουργείται ένα φιλμ το οποίο να είναι ομοιόμορφο και ταυτόχρονα, τα προϊόντα της αντίδρασης να οδηγούνται στην έξοδο του αντιδραστήρα λόγω της φυσικής ροής[7]. Παράλληλα γίνεται προσπάθεια το προϊόν να παράγεται στον ελάχιστο χρόνο, γεγονός που αυξάνει την αποδοτικότητα της διεργασίας. Η θέρμανση της επιφάνειας είναι αναγκαία καθώς παρέχει την ενέργεια που απαιτείται για την αντίδραση. Εναλλακτικά, η ενέργεια παρέχεται με ακτινοβολία μέσω τεχνολογίας λέιζερ. Στη θερμοκρασία του περιβάλλοντος είναι αδύνατη η δημιουργία του υμενίου στο οποίο στοχεύει η διεργασία.

### 2.1.1 Αντιδραστήρας ΧΑΑ

Η ΧΑΑ γίνεται σε αντιδραστήρες ΧΑΑ (CVD Reactors). Στο σχήμα 2.1 φαίνεται το σκαρίφημα μιας απλής γεωμετρίας κατακόρυφου, αξονοσυμμετρικού αντιδραστήρα ΧΑΑ. Υπάρχουν και άλλα είδη αντιδραστήρα ΧΑΑ των οποίων η περιγραφή παραλείπεται καθώς ξεφεύγει από τα πλαίσια της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας.



**Σχήμα 2.1:** Σκαρίφημα μιας απλής γεωμετρίας κατακόρυφου, αξονοσυμμετρικού αντιδραστήρα Χημικής Απόθεσης από Ατμό.

Ο κατακόρυφος αντιδραστήρας ΧΑΑ χρησιμοποιείται στις περισσότερες έρευνες των διεργασιών ΧΑΑ και κατά κύριο λόγο στη μελέτη της παραγωγής σύνθετων ημιαγωγών και μικρο – ηλεκτρονικών που η βάση τους είναι το πυρίτιο (Si).



Η περιστροφή της βάσης του στερεού δισκίου είναι μια μέθοδος που χρησιμοποιείται σε ορισμένες περιπτώσεις ώστε να αυξηθεί η ομοιομορφία του πάχους του υμενίου.

Οι παράμετροι που χαρακτηρίζουν τις συνθήκες λειτουργίας της διεργασίας είναι η πίεση που επικρατεί στο εσωτερικό του αντιδραστήρα, οι σταθερές θερμοκρασίες των τοιχωμάτων και της θερμαινόμενης επιφάνειας και η παροχή μάζας του μείγματος στην είσοδο[7]. Η πίεση που επικρατεί στο εσωτερικό του αντιδραστήρα, ή αλλιώς η πίεση λειτουργίας του αντιδραστήρα, σε κάποιες εφαρμογές μπορεί να είναι αρκετά μικρή, της τάξης των  $100Pa$  ως και τα  $10^4Pa$  και ονομάζεται χαμηλής πίεσης ΧΑΑ ενώ εάν πραγματοποιείται σε ατμοσφαιρική πίεση ονομάζεται ατμοσφαιρικής πίεσης ΧΑΑ [5]. Οι χαμηλής πίεσης αντιδραστήρες ΧΑΑ έχουν το πλεονέκτημα μεγάλων συντελεστών διάχυσης και απλών πεδίων ροής. Σε κάθε είδος αντιδραστήρα, τα εξωτερικά τοιχώματα ψύχονται ή θερμαίνονται. Η ψύξη, όταν γίνεται, αποτρέπει την απόθεση στα τοιχώματα του αντιδραστήρα. Η θέρμανση γίνεται για τη δημιουργία των θερμοκρασιακών βαθμίδων που παράγουν δευτερεύουσες ροές λόγω ανωστικών δυνάμεων[2].

Τα τοιχώματα του αντιδραστήρα, στις περισσότερες περιπτώσεις ψύχονται στη θερμοκρασία του περιβάλλοντος. Τυπικές τιμές για την παροχή μάζας έχει νόημα να δοθούν για γεωμετρικές συγκεκριμένων διαστάσεων. Γενικά, ο αριθμός Reynolds (Re) στο εσωτερικό του αντιδραστήρα παίρνει μικρές τιμές (μεταξύ 1 και 100).

Τα δισκία συνήθως είναι κρυσταλλικές επιφάνειες όπως χαλαζίας. Συνήθη φέροντα αέρια είναι το άζωτο ( $N_2$ ), το υδρογόνο ( $H_2$ ) και το ήλιο ( $He$ ).

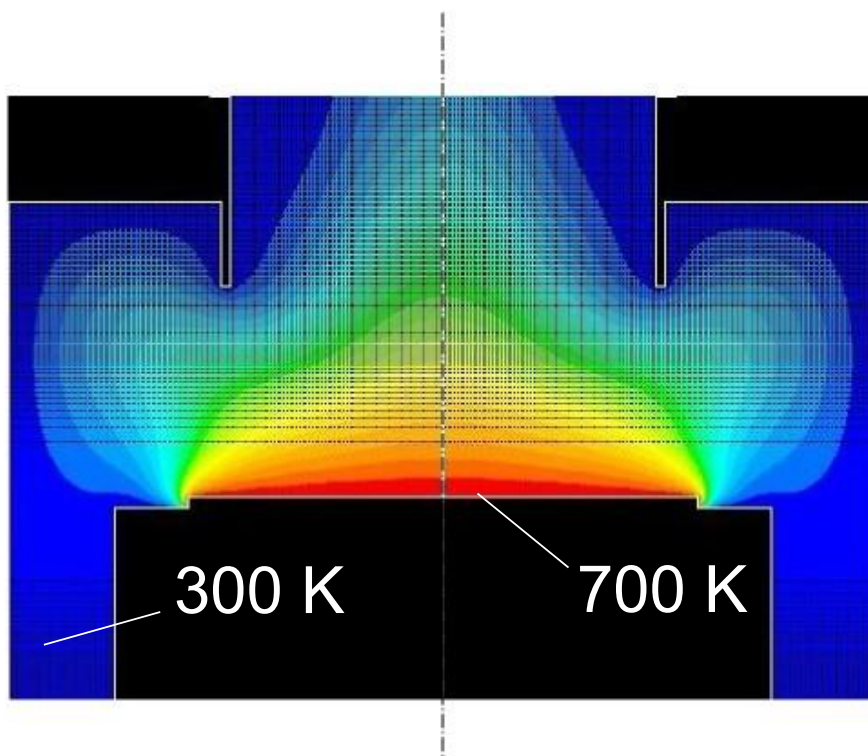
## 2.1.2 Περιγραφή των Φαινομένων που Επικρατούν στον Αντιδραστήρα ΧΑΑ [1],[7]

Εντός του αντιδραστήρα ΧΑΑ λαμβάνουν χώρα πολύπλοκα φαινόμενα ροής όπως επίσης και μεγάλο πλήθος χημικών αντιδράσεων.

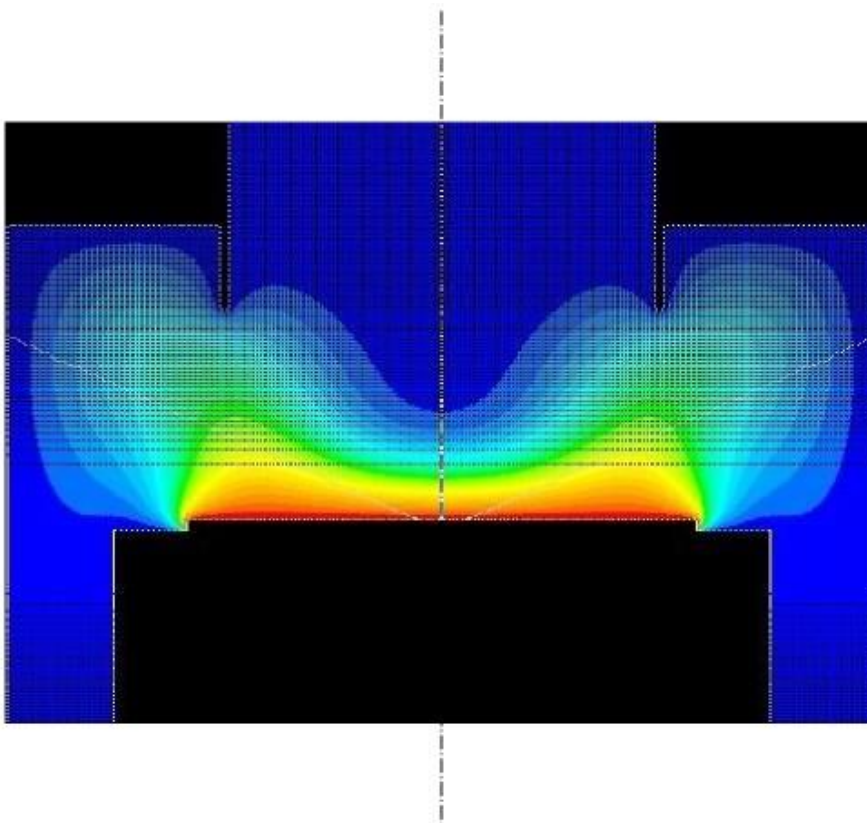
Σε κάποιες γεωμετρίες, όπως συμβαίνει σε αυτή που μελετάται στην παρούσα εργασία, καθώς το μείγμα του φέροντος αερίου με το πρόδρομο υλικό εισάγονται στον αντιδραστήρα, δημιουργούνται αδρανειακές δυνάμεις που οδηγούν το μείγμα προς τη θερμαινόμενη επιφάνεια. Η μεταφορά μάζας αυτή ονομάζεται εξαναγκασμένη συναγωγή (forced convection). Το μείγμα που βρίσκεται κοντά στη θερμαινόμενη επιφάνεια απόθεσης έχει την τάση να απομακρυνθεί προς πιο ψυχρές περιοχές. Ο φυσικός μηχανισμός που διέπει τη μετάφορά μάζας στην περιοχή αυτή ονομάζεται ελεύθερη συναγωγή (free convection). Η συνύπαρξη της ελεύθερης και της εξαναγκασμένης συναγωγής ονομάζεται μικτή συναγωγή (mixed convection). Τα δύο παραπάνω αναφερόμενα φαινόμενα ανταγωνίζονται και όποιο επικρατήσει διαμορφώνει τη λύση αναλόγως.

Στο σχήμα 2.2 φαίνεται η κατανομή της θερμοκρασίας στο εσωτερικό αντιδραστήρα σε μια περίπτωση όπου έχει επικρατήσει η ελεύθερη συναγωγή. Στο σχήμα αυτό φαίνεται πως έχει επικρατήσει η τάση του ρευστού που βρίσκεται στην πιο θερμή περιοχή να

μεταφερθεί προς πιο ψυχρές περιοχές (επικρατήσει η ελεύθερη συναγωγή). Αντίθετα με την περίπτωση που φαίνεται στο σχήμα 2.2, στο σχήμα 2.3 φαίνεται η κατανομή της θερμοκρασίας στο εσωτερικό αντιδραστήρα σε μια περίπτωση όπου έχει επικρατήσει η εξαναγκασμένη συναγωγή. Και οι δύο λύσεις που προκύπτουν αντιστοιχούν η καθεμιά σε ένα ευσταθές σημείο ισορροπίας μεταξύ των δύο μορφών συναγωγής.



**Σχήμα 2.2:** Η κατανομή της θερμοκρασίας στο εσωτερικό αντιδραστήρα, όταν έχει επικρατήσει η ελεύθερη συναγωγή στο τμήμα του εσωτερικού του αντιδραστήρα που είναι πιο έντονα τα φαινόμενα. Φαίνεται ένα επίπεδο που περιέχει τον άξονα συμμετρίας της γεωμετρίας (στη συνέχεια, η πρόταση αυτή και η αντιστοίχιση χρώματος-θερμοκρασίας θα εννοούνται).



**Σχήμα 2.3:** Η κατανομή της θερμοκρασίας στο εσωτερικό αντιδραστήρα, όταν έχει επικρατήσει η εξαναγκασμένη συναγωγή στο τμήμα του εσωτερικού του αντιδραστήρα που είναι πιο έντονα τα φαινόμενα.

Λεπτομερέστερα, κατά τη διεργασία δρουν περίπλοκοι μηχανισμοί χημικής κινητικής σε συνδυασμό με περίπλοκα φαινόμενα μεταφοράς της ορμής, της μάζας και της θερμότητας[5]. Μία κατηγοριοποίηση των φαινομένων είναι[13]:

- Μεταφορά μάζας των αερίων αντιδρώντων
- Αντιδράσεις που γίνονται στην αέρια φάση
- Διάχυση των αντιδρώντων αερίων στην επιφάνεια απόθεσης
- Ρόφηση στην επιφάνεια
- Επιφανειακή διάχυση και επιφανειακές αντιδράσεις
- Σχηματισμός του υμενίου στην επιφάνεια απόθεσης
- Εκρόφηση από την επιφάνεια απόθεσης
- Διάχυση στην αέρια φάση

Τα φαινόμενα που εξελίσσονται κατά τη ΧΑΑ, τα οποία αποτελούνται από τα φαινόμενα μεταφοράς και τους μηχανισμούς που ελέγχουν τις χημικές αντιδράσεις που γίνονται στην αέρια φάση και στην επιφάνεια του δισκίου, περιγράφονται από το μαθηματικό μοντέλο που παρατίθεται στη συνέχεια. Οι εξισώσεις που περιγράφουν σε μόνιμη κατάσταση, στη μακρο-κλίμακα τα φαινόμενα που συμβαίνουν είναι οι εξισώσεις διατήρησης της μάζας, της ορμής, της ενέργειας και των χημικών συστατικών[1]:

- Εξίσωση διατήρησης της μάζας

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.1)$$

όπου  $\rho$  είναι η πυκνότητα του μίγματος και  $\vec{u}$  η ταχύτητα.

- Εξίσωση διατήρησης της ορμής

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T) - \mu \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{u})I] + \rho \vec{g} \quad (2.2)$$

όπου  $p$  είναι η πίεση,  $\mu$  το δυναμικό ιξώδες,  $I$  ο μοναδιαίος ταυιστής και  $\vec{g}$  η επιτάχυνση της βαρύτητας.

- Εξίσωση διατήρησης της ενέργειας

$$C_p \nabla \cdot (\rho \vec{u} T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_{i=1}^N \vec{j}_i \cdot \frac{\nabla H_i}{M_i} - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^{N_r} H_i \gamma_{ik} r_k^g \quad (2.3)$$

όπου  $C_p$  είναι η ειδική θερμοχωρητικότητα υπό σταθερή πίεση του μίγματος,  $T$  η θερμοκρασία,  $\lambda$  η θερμική αγωγιμότητα,  $\vec{j}_i$  ο ρυθμός διάχυσης του χημι-

κού συστατικού  $i$ ,  $H_i$  η ενθαλπία σχηματισμού του χημικού συστατικού  $i$ ,  $M_i$  το μοριακό βάρος του χημικού συστατικού  $i$ ,  $N_r$  το πλήθος των ομογενών (ογκομετρικών) αντιδράσεων,  $r_k^g$  ο καθαρός ρυθμός της ογκομετρικής αντίδρασης  $k$ .

- Εξίσωση διατήρησης για το κάθε συστατικό  $i$  από τα  $N$  συστατικά

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} y_i) = -\nabla \cdot \vec{j}_i + M_i \sum_{k=1}^{N_r} \gamma_{ik} r_k^g \quad \forall i = 1, \dots, N - 1 \quad (2.4)$$

όπου  $y_i$  είναι το κλάσμα μάζας του χημικού συστατικού  $i$ . Καθώς το άθροισμα των κλασμάτων μάζας είναι ίσο με μονάδα, η εξίσωση επιλύεται για όλα τα συστατικά εκτός του φέροντος αερίου.

Οι παραπάνω μερικές διαφορικές εξισώσεις περιέχουν μη-γραμμικούς όρους, γεγονός που καθιστά δυνατή την πολλαπλότητα λύσεων, δηλαδή της ύπαρξη περισσότερων από μίας λύσεων για ένα σετ τιμών για τις παραμέτρους που υπεισέρχονται στις εξισώσεις[7]. Οι διάφορες λύσεις ανήκουν σε διαφορετικούς κλάδους λύσεων.

Στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία, οι εξισώσεις που επιλύονται στην αέρια φάση περιλαμβάνουν τις εξισώσεις διατήρησης της μάζας, της ορμής και της ενέργειας. Οι εξισώσεις χημικών συστατικών παραλείπονται για απλοποίηση των υπολογισμών καθώς έχουν αμελητέα επίδραση στη διαμόρφωση της ροής μέσα στον αντιδραστήρα[7]. Το απλοποιημένο μαθηματικό μοντέλο που περιγράφει τα φυσικά φαινόμενα μεταφοράς είναι το εξής:

- Απλοποιημένη εξίσωση διατήρησης της μάζας

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (2.5)$$

- Απλοποιημένη εξίσωση διατήρησης της ορμής

$$\nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T) - \mu \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{u})I] + \rho \vec{g} \quad (2.6)$$

- Απλοποιημένη εξίσωση διατήρησης της ενέργειας

$$C_p \nabla \cdot (\rho \vec{u} T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \quad (2.7)$$

Οι μη-γραμμικοί όροι είναι υπεύθυνοι για την πολλαπλότητα λύσεων. Κατά την επίλυση του απλοποιημένου συστήματος εξισώσεων, οι άγνωστες μεταβλητές είναι οι ίδιες με τη γενική περίπτωση, με τη διαφορά ότι απουσιάζουν τα κλάσματα μάζας των συστατικών.

Αυτή η μη-γραμμικότητα, σε συνδυασμό με τις δύο πιθανές μορφές της λύσης που περιγράφονται παραπάνω, προϋποθέτει για πιθανή συνύπαρξη των λύσεων αυτών αλλά και λύσεων άλλης μορφής, για ίδιο στήσιμο του αντιδραστήρα (ίδιες τιμές των παραμέτρων).

### 2.1.3 Κινητική της ΧΑΑ και Απόθεση [6]

Η απόθεση καθορίζεται είτε από την κινητική της αντίδρασης, είτε από τα φαινόμενα μεταφοράς, είτε από συνδυασμό τους. Όταν καθορίζεται από την κινητική της αντίδρασης, ο ρυθμός ανάπτυξης (growth rate) του πάχους του υμενίου εξαρτάται έντονα από τις θερμοκρασιακές συνθήκες κοντά στην θερμαινόμενη επιφάνεια και από τη διαθεσιμότητα του προδρόμου υλικού. Όταν η διεργασία γίνεται σε χαμηλή θερμοκρασία και πίεση, η αντίδραση πραγματοποιείται αργά και συσσωρεύεται περίσσεια αντιδραστήριου στην επιφάνεια απόθεσης. Η χαμηλή πίεση ευνοεί τη διάχυση και επομένως τη μεταφορά των αντιδρώντων προς την επιφάνεια απόθεσης. Σε περίπτωση που η θερμοκρασία είναι υψηλή, η αντίδραση αποσύνθεσης προχωράει γρηγορότερα καθώς όταν ένα μόριο φτάσει στην επιφάνεια απόθεσης αντιδρά αμέσως. Έτσι, λαμβάνεται το συμπέρασμα ότι στις χαμηλές θερμοκρασίες, η απόθεση του υμενίου ελέγχεται από την κινητική, ενώ στις υψηλότερες ελέγχεται από τη διάχυση της πρόδρομης ένωσης στο υπόστρωμα απόθεσης.

## 2.2 Πολλαπλότητα και Μη-Αξονοσυμμετρικές Λύσεις σε Συμμετρικές Γεωμετρίες.

Ένα αποτέλεσμα της συνύπαρξης διαφορετικών λύσεων, στον σχεδιασμό νέων αντιδραστήρων ΧΑΑ, είναι η ανάγκη για διερεύνηση σχετικά με την ύπαρξη μη-συμμετρικών λύσεων.

Η διερεύνηση αυτή είναι χρονοβόρα, ακριβή υπολογιστικά και μπορεί να μην αποκαλύψει όλες τις υπάρχουσες λύσεις, ιδίως όταν χρησιμοποιούνται εμπορικά λογισμικά.

Στην ενότητα αυτή περιγράφεται το κομμάτι της σχετικής με τη ΧΑΑ έρευνας που πραγματοποιήθηκε στο παρελθόν.

Η πρώτη παρατήρηση μη-αξονοσυμμετρίας (symmetry-breaking) της ροής στο εσωτερικό αξονοσυμμετρικών γεωμετριών που μοιάζουν με αυτή των συνήθων αντιδραστήρων ΧΑΑ όταν επιβλήθηκαν αξονοσυμμετρικές συνοριακές και λειτουργικές συνθήκες έγινε με οπτική μέθοδο παρατήρησης το 1987 από την ομάδα του De Keijser[10], χωρίς όμως να είναι βέβαιο πως η αξονοσυμμετρία στις συνοριακές συνθήκες που επιβλήθηκε στο πείραμα ήταν επαρκής, όπως αναφέρεται στη δημοσίευση [8].

Αργότερα, η ομάδα του Fotiades παρατήρησε για πρώτη φορά υπολογιστικά μη-αξονοσυμμετρικές λύσεις όταν ρέει ρευστό εντός αξονοσυμμετρικών γεωμετριών[2]. Οι μη-αξονοσυμμετρικές λύσεις που παρατηρήθηκαν συνυπήρχαν, δηλαδή εμφανιζόταν για τις ίδιες συνθήκες λειτουργίας, με αξονοσυμμετρικές λύσεις.

### 2.2.1 Επίδραση Μη-Αξονοσυμμετρικών Λύσεων

Στην ενότητα αυτή, αφού προηγήθηκαν οι παραπάνω αναφορές σχετικά με την ύπαρξη μη-αξονοσυμμετρικών πεδίων ροής στο εσωτερικό αξονοσυμμετρικού αντιδραστήρα ΧΑΑ, γίνεται λόγος για την επίδραση των πεδίων αυτών στο προϊόν της διεργασίας. Στη δημοσίευση [4] αποδεικνύεται υπολογιστικά, με προσομοίωση της απόθεσης πυριτίου ( $Si$ ) όταν το πρόδρομο υλικό είναι το σιλάνιο ( $SiH_4$ ), πως μη-αξονοσυμμετρικές λύσεις έχουν αρνητική επίδραση στην ποιότητα του προϊόντος της διεργασίας. Το γεγονός αυτό κάνει πιο σημαντική την κατανόηση του μηχανισμού δημιουργίας των μη-αξονοσυμμετρικών πεδίων ροής.

Σημειώνεται ότι στη συνέχεια της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας γίνονται υπολογισμοί για τη γεωμετρία που μελετήθηκε στη δημοσίευση [4] για θερμοκρασία θερμοιζόμενης πλάκας  $700K$  και για ίδιες τιμές για τις άλλες οριακές συνθήκες (μόνη διαφορά το αέριο που ρέει εντός του αντιδραστήρα θεωρήθηκε πως είναι άζωτο).





## Κεφάλαιο 3

# Προσομοίωση Χημικής Απόθεσης από Ατμό

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται οι βασικές αρχές της προσομοίωσης αντιδραστήρα ΧΑΑ με ΥΡΔ.

### 3.1 Υπολογιστική Ρευστοδυναμική στη ΧΑΑ

Οι επικρατέστερες μέθοδοι για τη δημιουργία του προς επίλυση αλγεβρικού συστήματος που προκύπτει από τις εξισώσεις διατήρησης (μάζας, ορμής, ενέργειας και συστατικών) που διέπουν το πρόβλημα είναι η μέθοδος των πεπερασμένων όγκων (finite-volume method)[9] και η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (finite-element method)[11]. Οι υπολογισμοί γίνονται με τη χρήση λογισμικών υπολογιστικής μηχανικής (computational mechanics software). Υπάρχουν οικεία λογισμικά των εργαστηρίων που ασχολούνται με την ΥΡΔ, ελεύθερα όπως το OpenFOAM αλλά και εμπορικά λογισμικά όπως τα ANSYS/FLUENT, COMSOL Multiphysics, PHEONICS κ.α που υλοποιούν κάποια από τις δύο παραπάνω μεθόδους.

Ένα από τα επικρατέστερα λογισμικά υπολογιστικής ρευστοδυναμικής, το οποίο χρησιμοποιήθηκε και στην παρούσα εργασία, είναι το ANSYS/FLUENT το οποίο υλοποιεί τη μέθοδο μέθοδο των πεπερασμένων όγκων για την οποία τα αναγκαία περιγράφονται στην ενότητα 3.1.1.

Εξαιτίας της πολυπλοκότητάς της, το υπολογιστικό κόστος της προσομοίωσης της ΧΑΑ σε κάθε περίπτωση είναι μεγάλο. Καθώς οι αντιδραστήρες ΧΑΑ είναι συνήθως αξονοσυμμετρικοί (όπως ο αντιδραστήρας του σχήματος 2.1, του οποίου η γεωμετρία

είναι αρκετά απλή ώστε να φαίνονται τα βασικά τμήματα του αντιδραστήρα), υπολογιστικά συμφέρει η επίλυση του προβλήματος με χρήση του 2D μοντέλου. Η πληροφορία πως δεν υπάρχει ροή κάθετα στον άξονα συμμετρίας της γεωμετρίας δίνει τη δυνατότητα οι υπολογισμοί να γίνουν σε μια διδιάστατη γεωμετρία η οποία αποτελείται από πολύ λιγότερους όγκους ελέγχου. Με την παραδοχή αυτή προκύπτει μικρότερο σύστημα προς επίλυση και επομένως απαιτείται μικρότερη υπολογιστική ισχύς σε σύγκριση με την επίλυση με το 3D μοντέλο.

Όπως αναφέρεται στην ενότητα 2.1.2, η παραδοχή αυτή κάποιες φορές αδυνατεί να οδηγήσει σε όλες τις λύσεις του προβλήματος (ειδικά οι μη-αξονοσυμμετρικές λύσεις είναι αδύνατο να προκύψουν με την επίλυση με το 2D μοντέλο).

Άλλη παραδοχή που μπορεί να γίνει είναι η παραδοχή απουσίας αντιδράσεων. Στην περίπτωση αυτή, στην προσομοίωση της ΧΑΑ, το αέριο που θεωρείται πως ρέει στο εσωτερικό του αντιδραστήρα είναι το φέρον αέριο.

### 3.1.1 Η Μέθοδος των Πεπερασμένων Όγκων[9]

Η μέθοδος πεπερασμένων όγκων παίρνει το όνομά της από τους πεπερασμένους όγκους στους οποίους διακριτοποιείται το χωρίο στο οποίο θα γίνει η επίλυση των εξισώσεων μεταφοράς που αναφέρθηκαν στην ενότητα 2.1.2. Οι πεπερασμένοι όγκοι είναι κυβικά στοιχεία ρευστού και χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό όλων των προς υπολογισμό μεγεθών στο κέντρο τους. Στο σχήμα 3.1 φαίνεται ένας πεπερασμένος όγκος γύρω από ένα σημείο P. Στο σχήμα διακρίνονται οι έξι πλευρές του πεπερασμένου όγκου οι οποίες είναι:

- Στη x διεύθυνση οι w(west -δυτική πλευρά) και e(east- ανατολική πλευρά)
- Στη y διεύθυνση οι s(south - νότια πλευρά) και n(north - βόρεια πλευρά)
- Στη z διεύθυνση οι b(bottom - κάτω πλευρά) και t(top - πάνω πλευρά)

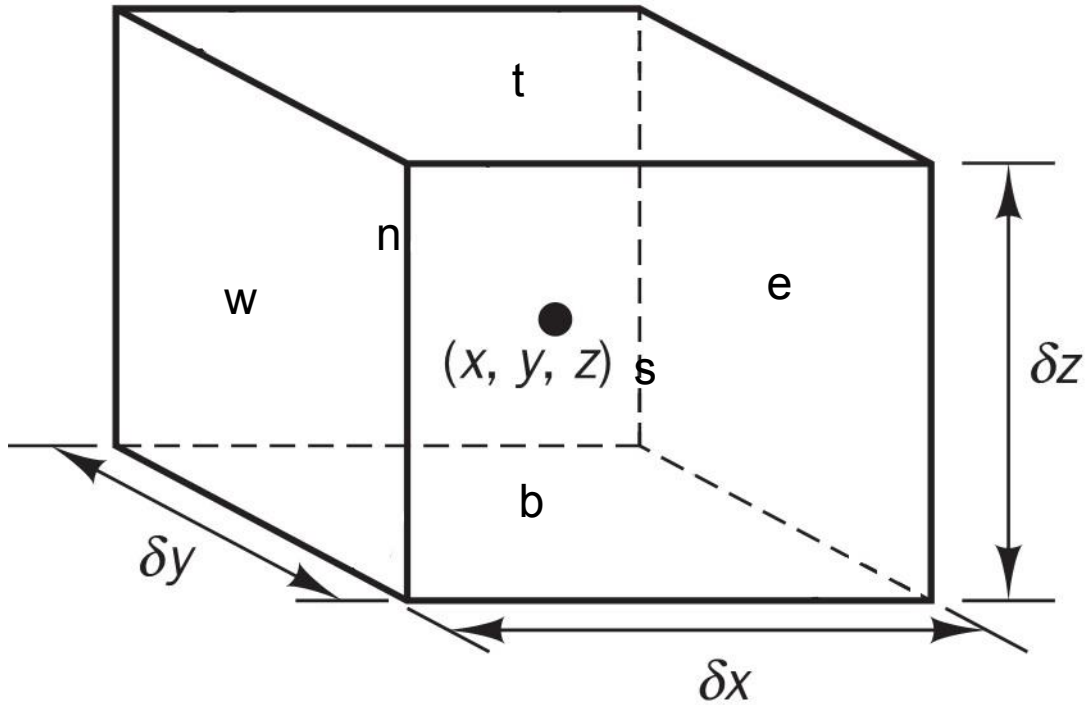
Με τα αντίστοιχα κεφαλαία γράμματα συμβολίζονται οι διπλανοί κόμβοι. Για παράδειγμα, ο διπλανός κόμβος του P που ανάμεσά τους βρίσκεται η πλευρά w συμβολίζεται με W κ.ο.κ.

Ορίζεται η εξίσωση μεταφοράς (3.1) για το μέγεθος  $\phi$ .

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho\phi\vec{u}) = \text{div}(\Gamma\text{grad}\phi) + S_\phi \quad (3.1)$$

όπου  $\Gamma$  ο συντελεστής διάχυσης και  $S_\phi$  ο όρος πηγής.

Οι όροι της σχέσης 3.1 είναι από τα αριστερά προς τα δεξιά: ο μεταβατικός όρος, ο όρος συναγωγής, ο όρος διάχυσης και ο όρος πηγής όπως προαναφέρθηκε.



**Σχήμα 3.1:** Ένας πεπερασμένος όγκος γύρω από ένα σημείο στον χώρο που ρέει το ρευστό.

Η εξίσωση 3.1 μπορεί να εκφράζει οποιαδήποτε από τις εξισώσεις που παρουσιάζονται στο κεφάλαιο 2 αν στη θέση του  $\phi$  μπει το κατάλληλο μέγεθος κάθε φορά. Συγκεκριμένα για την κάθε εξίσωση μεταφοράς το  $\phi$  ισούται με:

- 1 για την εξίσωση της συνέχειας
- $\vec{u}$  για την εξίσωση διατήρησης της ορμής
- $T$  για την εξίσωση διατήρησης της ενέργειας
- το κλάσμα μάζας  $y_i$  για την εξίσωση διατήρησης του συστατικού  $i$

Η ολοκλήρωση της εξίσωσης 3.1 για μόνιμη κατάσταση (μηδενική χρονική παράγωγος) δίνει για το σημείο P την 3.2.

$$\begin{aligned}
 & (\rho\phi\vec{u} - \Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x})_e A_e - (\rho\phi\vec{u} - \Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x})_w A_w + (\rho\phi\vec{u} - \Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x})_n A_n - (\rho\phi\vec{u} - \Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x})_s A_s + \\
 & + (\rho\phi\vec{u} - \Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x})_t A_t - (\rho\phi\vec{u} - \Gamma\frac{\partial\phi}{\partial x})_b A_b = \bar{S}_\phi \Delta V
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

όπου  $A_i$  είναι το εμβαδό της επιφάνειας  $i$ ,  $\bar{S}_\phi$  η μέση τιμή του όρου πηγής και  $\Delta V$  ο πεπερασμένος όγκος. Για τα  $w, e, s, n, b$  και  $t$  βλ. σχήμα 3.1

Το υπολογιστικό χωρίο έχει διακριτοποιηθεί σε  $N$  πεπερασμένους όγκους στο κέντρο των οποίων βρίσκονται  $N$  υπολογιστικοί κόμβοι. Γίνεται γραμμικοποίηση για τους συντελεστές και η 3.2 γίνεται για κάθε κόμβο  $P$

$$\alpha_P \phi_P = \sum_i \alpha_i \phi_i + b_P \quad (3.3)$$

όπου το  $i$  είναι καθένα από τα  $w, e, s, n, b$  και  $t$ .

Για να αντιμετωπιστούν διάφορα προβλήματα που αναδύονται κατά της επίλυση του συστήματος εξισώσεων έχουν αναπτυχθεί αλγόριθμοι που επιλύουν το σύστημα μέσω διόρθωσης. Ο αλγόριθμος SIMPLE και οι παραλλαγές του είναι οι επικρατέστερες επιλογές.

Πολλές φορές χρειάζεται υποχαλάρωση για ευσταθείς υπολογισμούς και σπανιότερα υπερχαλάρωση για επιτάχυνση της επίλυσης. Οι προτεινόμενες επιλογές για τους συντελεστές χαλάρωσης στη XAA είναι

- Για τη διόρθωση της πίεσης, 0.3.
- Για τη διόρθωση της πυκνότητας, 1.
- Για τη διόρθωση των δυνάμεων (body forces), 1.
- Για τη διόρθωση στην εξίσωση διατήρησης της ορμής, 0.8.
- Για τη διόρθωση στην εξίσωση διατήρησης της ενέργειας, 0.7.

## 3.2 Τεχνική Βηματισμού σε Παράμετρο [3],[7]

Κατά την υπολογιστική προσομοίωση μιας περίπτωσης ενός προβλήματος, είναι απαραίτητο να καθοριστούν οι τιμές των παραμέτρων που αφορούν τη συγκεκριμένη περίπτωση. Στη XAA, όπως αναφέρεται και στην ενότητα 2.1.1, οι παράμετροι αυτές είναι η πίεση που επιβάλλεται στην έξοδο του αντιδραστήρα, οι σταθερές θερμοκρασίες των τοιχωμάτων και της θερμαινόμενης επιφάνειας και η παροχή μάζας του μείγματος στην είσοδο.

Η αριθμητική επίλυση της ροής εντός του αντιδραστήρα XAA, όπως η επίλυση κάθε ροής μέσω εμπορικού κώδικα ΥΡΔ, γίνεται μέσω μιας επαναληπτικής διαδικασίας. Σε κάθε επανάληψη υπολογίζεται η διόρθωση που πρέπει να προστεθεί στο κάθε μέγεθος ώστε η νέα του τιμή να αποτελεί καλύτερη εκτίμηση της τιμής του μεγέθους για την ακριβή λύση του προβλήματος. Γενικά, όσο πιο κοντά στην πραγματική λύση είναι η αρχική εκτίμηση, τόσο πιο αποτελεσματική θα είναι η επίλυση του προβλήματος. Σε κάποιες περιοχές τιμών για τις παραμέτρους, η αρχική τιμή που παίρνουν από το λογισμικό επίλυσης τα μεγέθη που υπεισέρχονται στο προς επίλυση σύστημα εξισώσεων

οδηγεί με δυσκολία ή αδυνατεί να οδηγήσει στη λύση. Στο σημείο αυτό έρχεται η τεχνική του βηματισμού σε παράμετρο (continuation). Η τεχνική αυτή έχει την εξής εφαρμογή: Για την επίλυση του προβλήματος για κάποιο σετ τιμών για τις παραμέτρους που καθορίζουν το πρόβλημα, ως αρχική υπόθεση για τα μεγέθη που χαρακτηρίζουν τη ροή χρησιμοποιείται η τιμή που αυτά έχουν για το κοντινότερο σετ τιμών των παραμέτρων όπου το πρόβλημα έχει ήδη επιλυθεί επιτυχώς. Η πρώτη επίλυση γίνεται για ένα σετ τιμών των παραμέτρων του προβλήματος που οδηγεί εύκολα στη λύση με αρχική εκτίμηση την προεπιλεγμένη του λογισμικού επίλυσης.

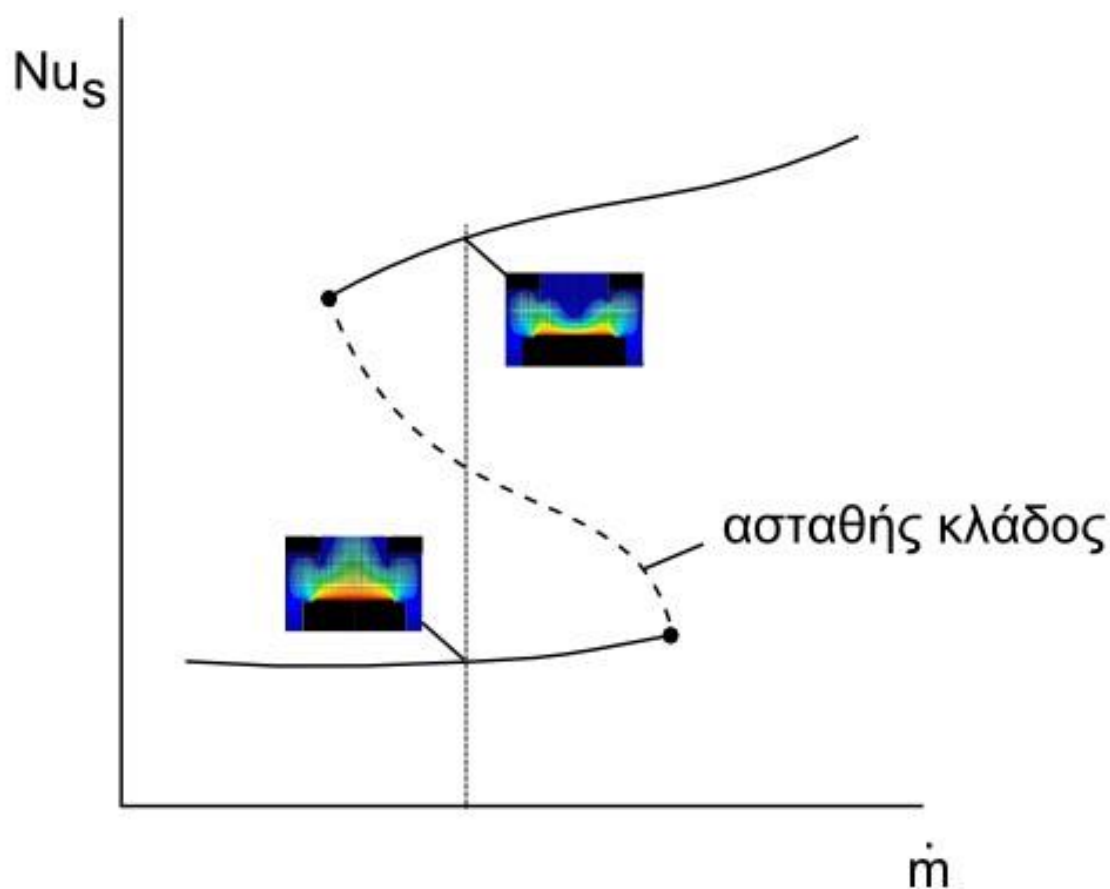
Για την επαναληπτική διαδικασία που πραγματοποιείται, ουσιαστικά προσεγγίζεται ο αντίστροφος ενός πίνακα σε κάθε επανάληψη. Η επαναληπτική διαδικασία γίνεται ασταθής, δηλαδή δεν προκύπτει σύγκλιση, λόγω του ότι σε κάποια σημεία (τιμές παραμέτρων), ο πίνακας γίνεται μη-αντιστρέψιμος. Τα σημεία αυτά λέγονται κρίσιμα και οδηγούν σε «στροφή» (turning points) ή/και διακλάδωση (bifurcation points) των κλάδων λύσεων. Στα σημεία στροφής αλλάζει η μονοτονία της μεταβολής της λύσης ως προς παράμετρο. Για την εφαρμογή της τεχνικής του βηματισμού πέρα από τα σημεία αυτά υπάρχουν μέθοδοι τύπου μήκους τόξου (arc-length continuation). Η βασική ιδέα των μεθόδων τύπου μήκους τόξου είναι ότι χρησιμοποιείται μια ανεξάρτητη παράμετρος  $s$  που απαιτεί μια επιπλέον εξίσωση. Η παράμετρος αυτή δεν εμφανίζει αλλαγή πρόσημου στις περιοχές των κρίσιμων σημείων και έτσι μέσω αυτής δεν αντιμετωπίζεται πρόβλημα στην σύγκλιση. Ο συστηματικός βηματισμός με μέθοδο τύπου μήκους τόξου θα είναι κομμάτι της μελλοντικής αντιμετώπισης του προβλήματος που αντιμετωπίζεται στην παρούσα εργασία.

### 3.3 Απεικόνιση Κλάδων Λύσεων.

Πολύ μεγάλη σημασία για την κατανόηση της εξάρτησης των λύσεων από τις τιμές των παραμέτρων έχει η απεικόνιση των αποτελεσμάτων. Ειδικά όταν σε ένα πρόβλημα εμφανίζεται πολλαπλότητα λύσεων, είναι αναγκαίος ένας τρόπος απεικόνισης των αποτελεσμάτων που παρέχει εποπτεία ώστε οι διαφορετικοί κλάδοι λύσεων να είναι ευδιάκριτοι. Επομένως, η απεικόνιση είναι σχόπιμο να γίνεται για μεγέθη των οποίων οι τιμές διαφέρουν αισθητά από κλάδο σε κλάδο.

Στη ΧΑΑ υπάρχει ένας αρκετά αποτελεσματικός τρόπος απεικόνισης των κλάδων των λύσεων που υπολογίζονται, ειδικά όταν (όπως στην παρούσα εργασία) έχουν γίνει υπολογισμοί για όλες τις τιμές των παραμέτρων που χαρακτηρίζουν το πρόβλημα σταθερές εκτός από μία. Ο τρόπος απεικόνισης αυτός περιγράφεται ως εξής: Για τις διάφορες τιμές της παραμέτρου που έχουν γίνει υπολογισμοί υπολογίζεται ο αδιάστατος αριθμός Nusselt. Ο επιφανειακός Nusselt ( $Nu_s$ ) εκφράζει τον λόγο της μεταφοράς θερμότητας μέσω συναγωγής προς τη μεταφορά θερμότητας μέσω διάχυσης. Η χρησιμότητα της εν λόγω απεικόνισης έγκειται στο γεγονός ότι οι κλάδοι λύσεων που παρατηρούνται διαφέρουν αρκετά ως προς τον  $Nu_s$ . Ένα διάγραμμα που προκύπτει με τον τρόπο αυ-

τό, σε μια επίλυση με 2D μοντέλο στο εσωτερικό αντιδραστήρα ΧΑΑ φαίνεται στο σχήμα 3.2. Ο αριθμός  $Nu_s$  λαμβάνεται από το σημείο του άξονα συμμετρίας της γεωμετρίας που βρίσκεται πάνω στη θερμαινόμενη επιφάνεια. Όταν η επίλυση ξεκινάει από μεγάλες παροχές μάζας και με την τεχνική του βηματισμού σε παράμετρο υπολογίζονται οι λύσεις για τις μικρότερες παροχές μάζας προκύπτει ο πάνω κλάδος στον οποίο φαίνεται η επικράτηση της εξαναγκασμένης συναγωγής. Σε αυτή την περίπτωση, η τιμή του αριθμού  $Nu_s$  είναι μεγαλύτερη από αυτή που έχει ο αριθμός  $Nu_s$  όταν η αρχική επίλυση γίνεται για πολύ μικρή παροχή μάζας και ο βηματισμός γίνεται προς μεγαλύτερες παροχές. Στην περίπτωση αυτή επικρατεί η ελεύθερη συναγωγή.



Σχήμα 3.2: Ο αριθμός  $Nu_s$  συναρτῆσει της παροχῆς μάζας.

# Κεφάλαιο 4

## Παρουσίαση Αποτελεσμάτων

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται η παρουσίαση των αποτελεσμάτων των υπολογισμών που πραγματοποιήθηκαν στα πλαίσια της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας.

### 4.1 Το Πρόβλημα που Επιλύεται

Στο εσωτερικό του αντιδραστήρα που φαίνεται στο σχήμα 4.1, όταν οι αντιδράσεις δεν ληφθούν υπόψη, με την παραδοχή πως το αέριο που ρέει στο εσωτερικό του αντιδραστήρα είναι άζωτο ( $N_2$ ), γίνεται επίλυση με το λογισμικό ΥΠΔ ANSYS/FLUENT για διάφορες τιμές της παροχής μάζας στην είσοδο. Οι υπόλοιπες παράμετροι που καθορίζουν το πρόβλημα παραμένουν σταθερές έχοντας τις εξής τιμές

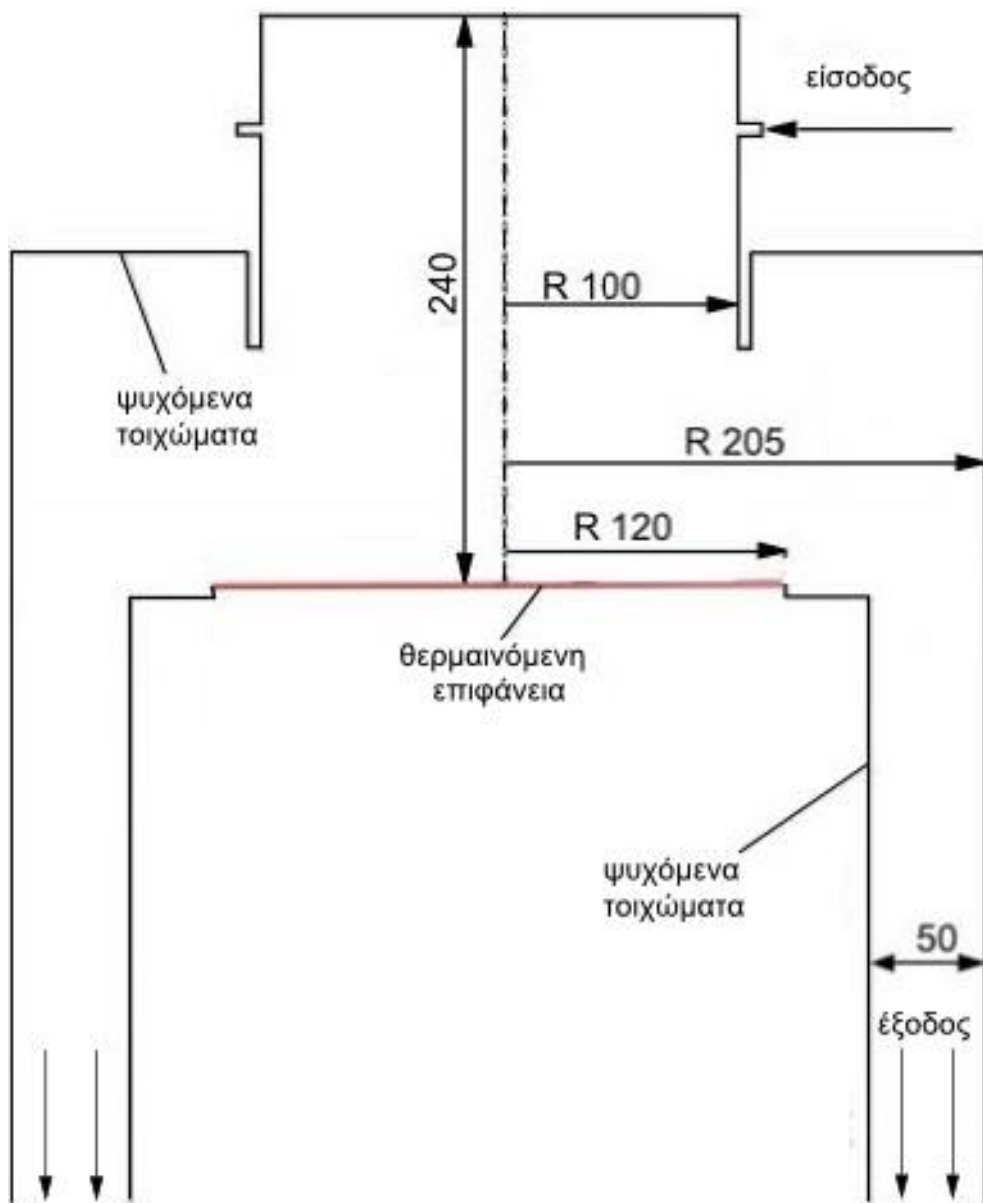
- Πίεση στην έξοδο  $1300Pa$
- Θερμοκρασία θερμαινόμενης επιφάνειας  $700K$
- Θερμοκρασία τοιχωμάτων  $300K$

Η παροχή μάζας στην είσοδο έχει τάξη μεγέθους  $10^{-5} \frac{kg}{s}$ . Γίνεται επίλυση σε δύο διαφορετικά πλέγματα με δύο διαφορετικά υπολογιστικά μοντέλα.

Το ένα μοντέλο είναι 2D και το πλέγμα στο οποίο γίνεται η επίλυση φαίνεται στο σχήμα 4.2.

Το δεύτερο μοντέλο είναι 3D και το πλέγμα στο οποίο γίνεται η επίλυση φαίνεται στο σχήμα 4.3.

Ο αλγόριθμος SIMPLE[9] είναι αυτός που επιλέχθηκε για την παρούσα εργασία.

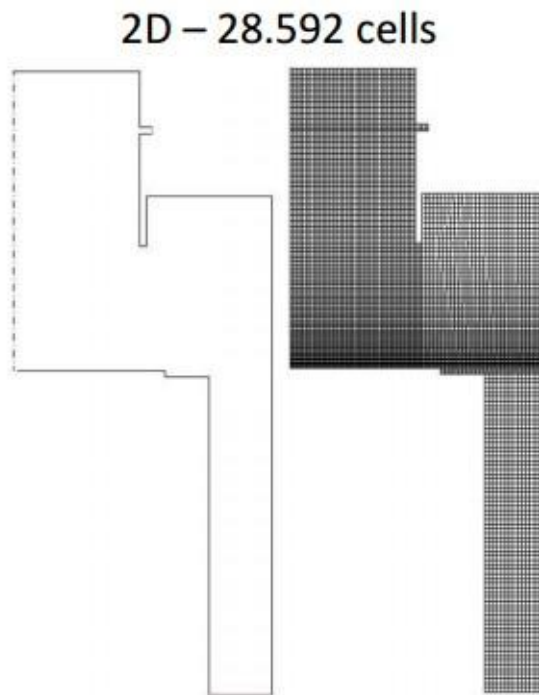


**Σχήμα 4.1:** Σκαρίφημα με τις βασικές διαστάσεις και σχόλια για τον αντιδραστήρα που μελετάται στα πλαίσια της μεταπτυχιακής εργασίας.

Ως σχήμα διακριτοποίησης[12] επιλέχθηκε το δεύτερης τάξης ακρίβειας σχήμα των εμπρός διαφορών (upwind) για την ενέργεια και την ορμή και κεντρικές διαφορές για τη διόρθωση της πίεσης (εξίσωση συνέχειας).

Οι συντελεστές χαλάρωσης επιλέχθηκαν σε κάθε επίλυση ξεχωριστά. Για τις παροχές μάζας που η επίλυση ήταν σχετικά εύκολη χρησιμοποιήθηκαν οι τιμές που αναφέρονται στην ενότητα 3.1.1. Στις "δύσκολες" περιοχές τιμών της παροχής μάζας χρησιμοποιήθηκε ως και συντελεστής χαλάρωσης 0.005 για όλα τα μεγέθη και οι υπολογισμοί χρειάστηκαν πολλαπλάσιο χρόνο σε σχέση με τις περιοχές που η επίλυση γινόταν απο-





**Σχήμα 4.2:** Το πλέγμα στο οποίο γίνεται η επίλυση με το 2D μοντέλο με χρήση του λογισμικού ANSYS/FLUENT.

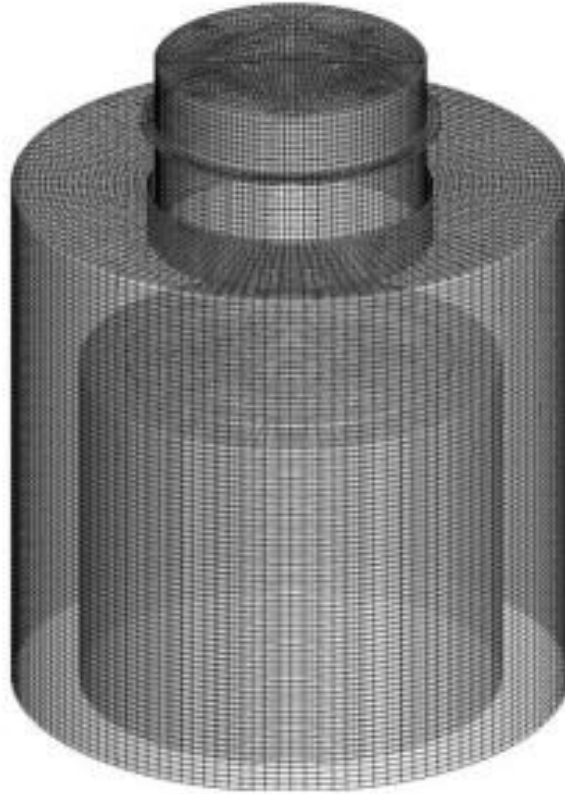
τελεσματικά χωρίς μεγάλη υποχαλάρωση.

Η επίλυση γίνεται σε συνδυασμό με την τεχνική του βηματισμού σε παράμετρο (ενότητα 3.2).

## 4.2 Επίλυση με 2D Μοντέλο

Στο σχήμα 4.4 φαίνεται η τιμή του αδιάστατου αριθμού  $Nu_s$  στη θέση  $(0.24m, 0, 0)$  συναρτήσει της παροχής μάζας σε  $10^{-5} \frac{kg}{s}$  όταν χρησιμοποιείται το 2D μοντέλο για την επίλυση. Όταν ο βηματισμός σε παράμετρο γίνεται από μικρές παροχές προς μεγάλες προκύπτει ένας κλάδος στον οποίο έχει επικρατήσει η ελεύθερη συναγωγή, ενώ όταν ο βηματισμός σε παράμετρο γίνεται από μεγάλες παροχές προς μικρές προκύπτει ένας άλλος κλάδος στον οποίο έχει επικρατήσει η εξαναγκασμένη συναγωγή. Ο τελευταίος κλάδος παύει να υπάρχει για παροχή μάζας στην είσοδο μικρότερη από  $2.3 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  και στο σημείο αυτό η επίλυση οδηγεί στον άλλο κλάδο. Το αντίθετο δεν παρατηρείται.

## 3D - 236135 volumes

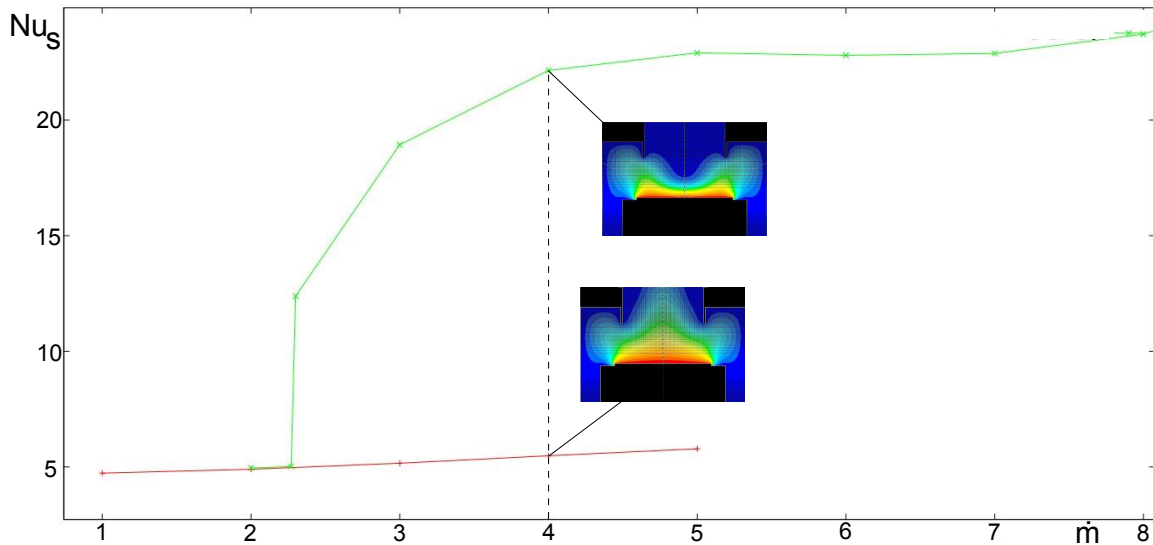


**Σχήμα 4.3:** Το πλέγμα στο οποίο γίνεται η επίλυση με το 3D μοντέλο με χρήση του λογισμικού ANSYS/FLUENT.

### 4.3 Σύγκριση 2D και 3D Αποτελεσμάτων

Όταν τα αποτελέσματα από την επίλυση με το 3D μοντέλο συγκρίνονται με αυτά που προέκυψαν από την επίλυση με το 2D μοντέλο, για μία περιοχή τιμών της παροχής μάζας παρατηρείται ταύτιση των λύσεων. Η περιοχή τιμών της παροχής μάζας στην είσοδο στην οποία παρατηρείται η ίδια συμμετρική λύση στα αποτελέσματα και των δύο επιλύσεων είναι η περιοχή τιμών που ξεκινά από πολύ μικρές σχετικά παροχές μάζας (περίπτωση με τη μικρότερη παροχή μάζας όπου έγιναν υπολογισμοί είναι  $0.1 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ ) και φθάνει ως  $5.65 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ .

Ο βηματισμός σε παράμετρο στην περίπτωση αυτή έγινε από μικρές παροχές μάζας προς μεγάλες με βήμα  $0.1 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  το οποίο πλησιάζοντας στο σημείο καμψής όπου



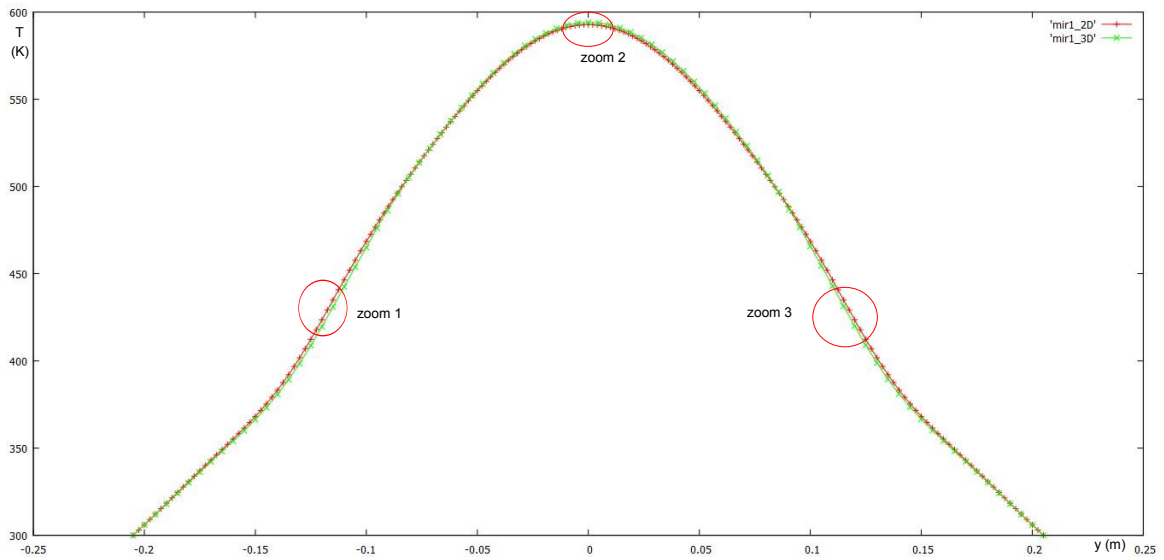
**Σχήμα 4.4:** Η τιμή του αδιάστατου αριθμού  $Nu_s$  στη θέση  $(0.24m, 0, 0)$  συναρτήσει της παροχής μάζας σε  $10^{-5} \frac{kg}{s}$  και οι κατανομές της θερμοκρασίας για κάποιες λύσεις όταν η επίλυση γίνεται με το 2D μοντέλο. Η κόκκινη γραμμή αντιστοιχεί στον κλάδο των λύσεων που επικρατεί η ελεύθερη συναγωγή ενώ η πράσινη γραμμή αντιστοιχεί στον κλάδο των λύσεων που επικρατεί η εξαναγκασμένη συναγωγή.

η σύγκλιση ήταν πιο δύσκολη έγινε  $0.05 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ . Επίσης στην περιοχή δύσκολης σύγκλισης χρησιμοποιήθηκαν συντελεστές υποχαλάρωσης πολύ μικρότεροι από αυτούς που χρησιμοποιήθηκαν σε μικρές παροχές μάζας. Η περιοχή δύσκολης σύγκλισης εντοπίζεται για παροχές μάζας στην είσοδο μεγαλύτερες από περίπου  $3 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  και η δυσκολία αυξάνεται συνεχώς. Η διαφορά στην υπολογιστική ισχύ που απαιτείται φθάνει να είναι δεκάδες φορές μεγαλύτερη. Υπενθυμίζεται ότι για μικρές παροχές μάζας επικρατεί η ελεύθερη συναγωγή ενώ όσο αυξάνεται η παροχή μάζας αυξάνεται και η επίδραση της εξαναγκασμένης συναγωγής.

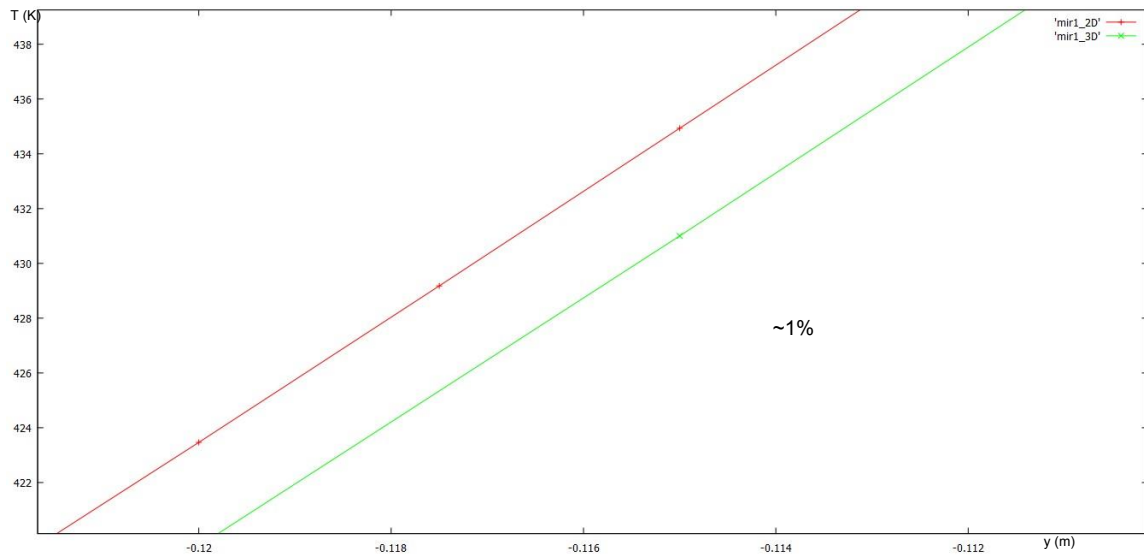
Οι (εξ όψεως) συμμετρικές λύσεις παρακάτω συγκρίνονται με τις αντίστοιχες που προέκυψαν από την επίλυση με το 2D μοντέλο. Αν μπορεί να θεωρηθεί πως οι λύσεις ταυτίζονται, τότε αυτόματα προκύπτει το συμπέρασμα ότι βρέθηκαν συμμετρικές λύσεις από την επίλυση με το 3D μοντέλο.

#### 4.3.1 Παροχή Μάζας $10^{-5} \frac{kg}{s}$

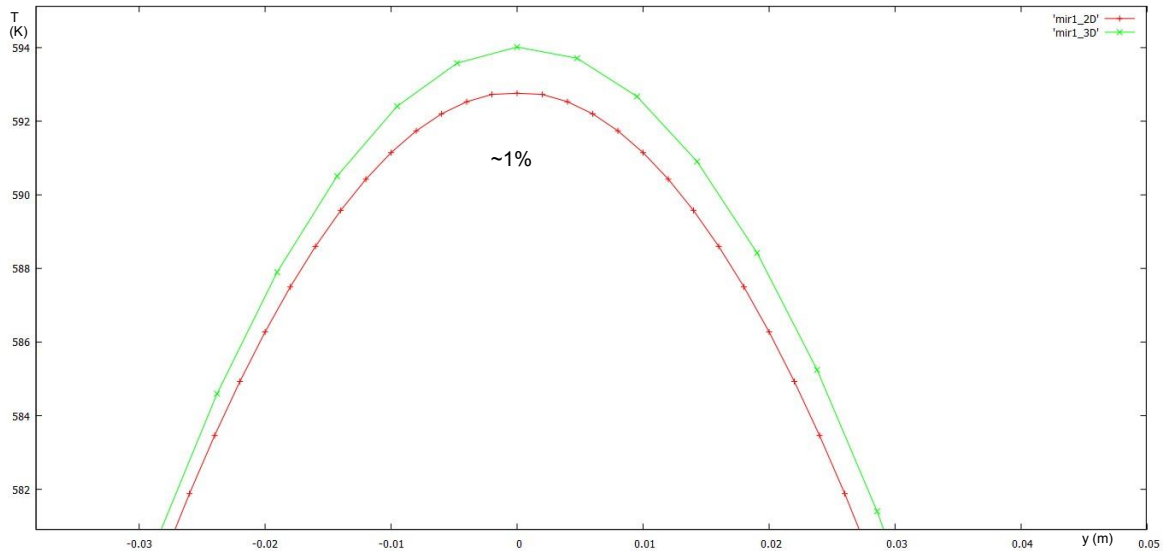
Στην ενότητα αυτή συγκρίνονται οι λύσεις για την κατανομή θερμοκρασίας καταμήκος της γραμμής  $x = 0.18m$ , για παροχή μάζας  $10^{-5} \frac{kg}{s}$ . Γίνεται μεγέθυνση στην κάθε περιοχή που θα μπορούσε να περιέχει τη μέγιστη απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων από τις επιλύσεις με το 2D και το 3D μοντέλο ώστε να γίνει ακριβέστερη σύγκριση. Μεταξύ των θέσεων που υπάρχει υπολογισμένη λύση γίνεται παρεμβολή με ευθύγραμμα τμήματα ώστε να μπορεί να γίνει η σύγκριση.



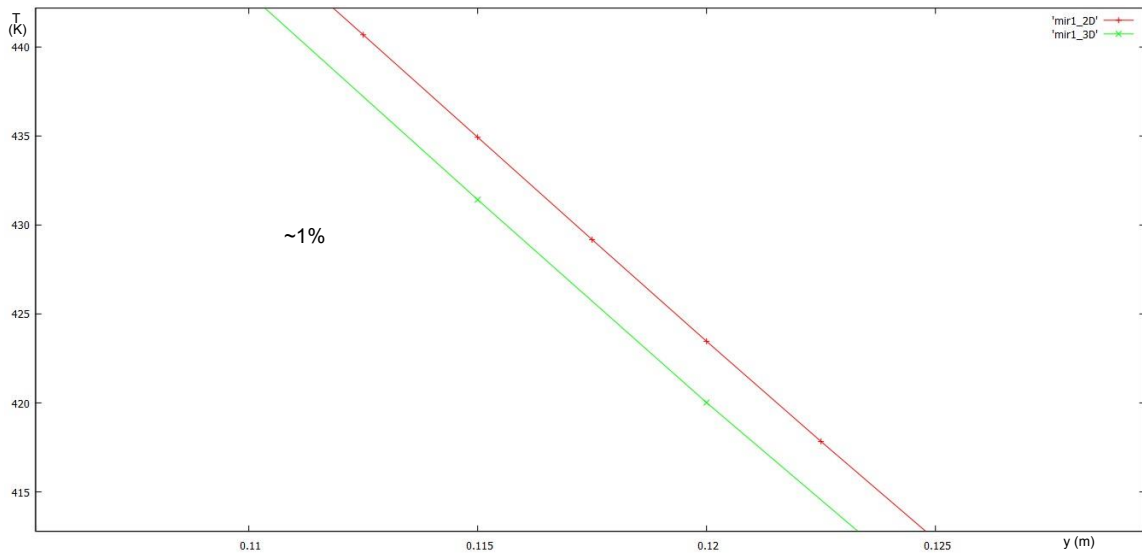
**Σχήμα 4.5:** Η θερμοκρασία καταμήκος της γραμμής  $x = 18$  και  $z = 0$  από την επίλυση με το 2D μοντέλο και την επίλυση με το 3D μοντέλο για παροχή μάζας  $10^{-5} \frac{kg}{s}$ . Επιλέγονται οι περιοχές με την μεγαλύτερη διαφορά.



**Σχήμα 4.6:** Σύγκριση στην περιοχή zoom1.



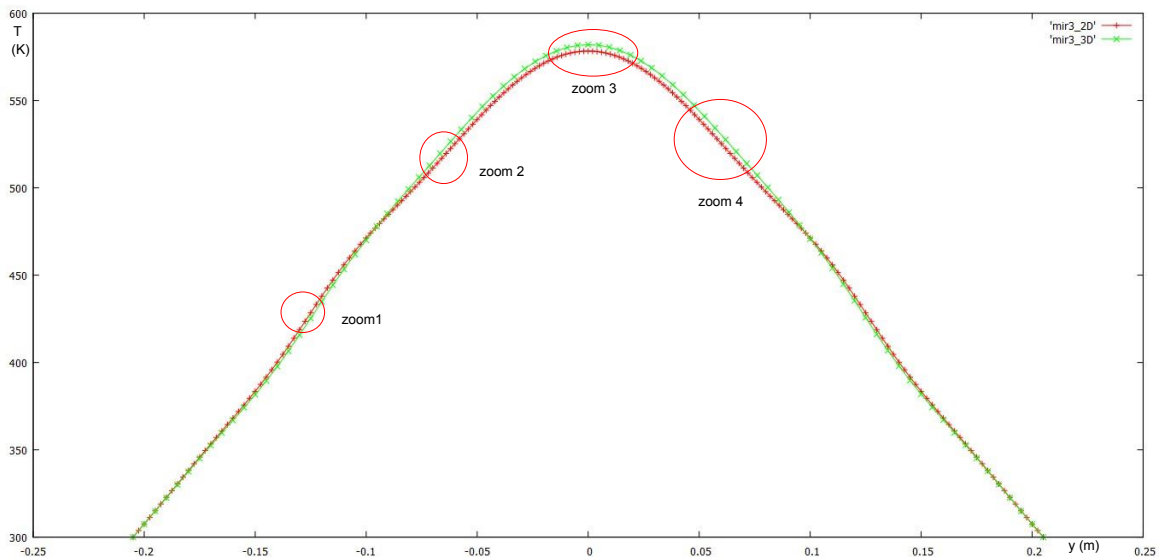
Σχήμα 4.7: Σύγκριση στην περιοχή zoom2.



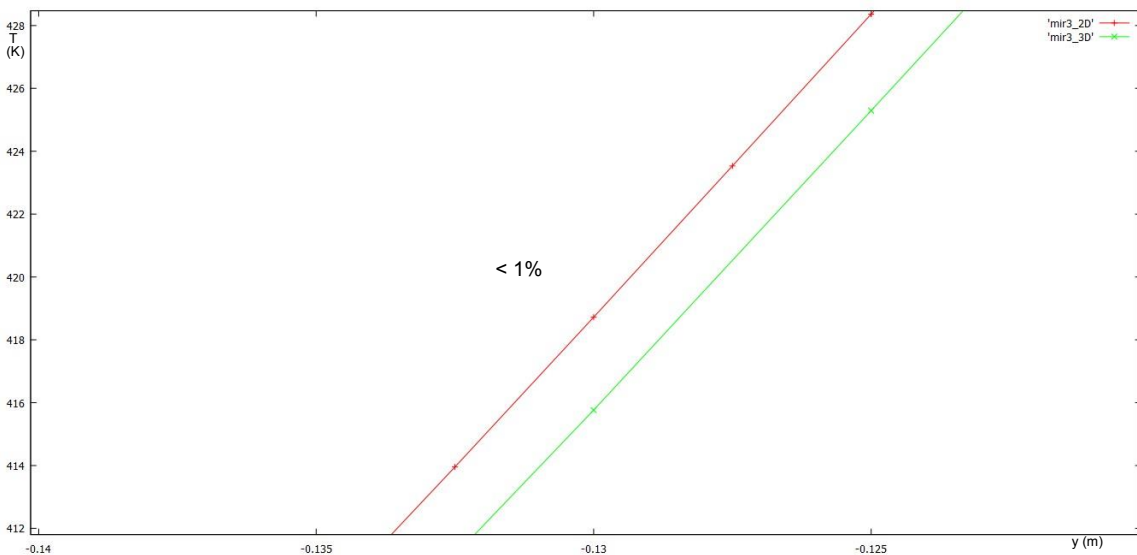
Σχήμα 4.8: Σύγκριση στην περιοχή zoom3.

### 4.3.2 Παροχή Μάζας $3 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$

Στην ενότητα αυτή συγκρίνονται οι λύσεις για την κατανομή της θερμοκρασίας κατα μήκος της επιλεγμένης γραμμής για παροχή μάζας  $3 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ . Και εδώ ισχύουν όσα ισχύουν και στην προηγούμενη ενότητα.

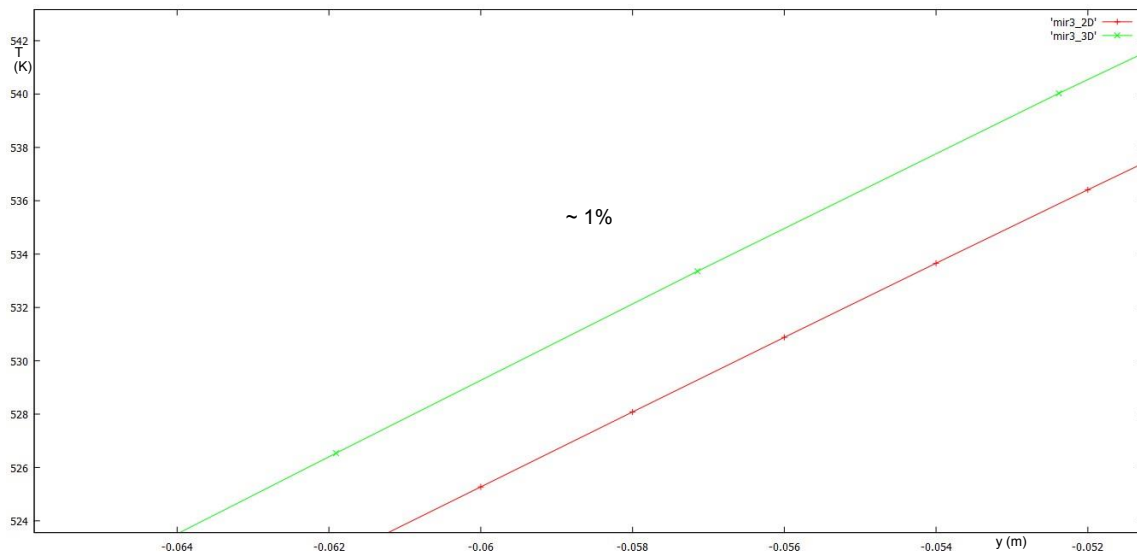


**Σχήμα 4.9:** Η θερμοκρασία καταμήκος της γραμμής  $x = 18$  και  $z = 0$  από την επίλυση με το 2D μοντέλο και την επίλυση με το 3D μοντέλο για παροχή μάζας  $10^{-5} \frac{kg}{s}$ . Επιλέγονται οι περιοχές με την μεγαλύτερη διαφορά.

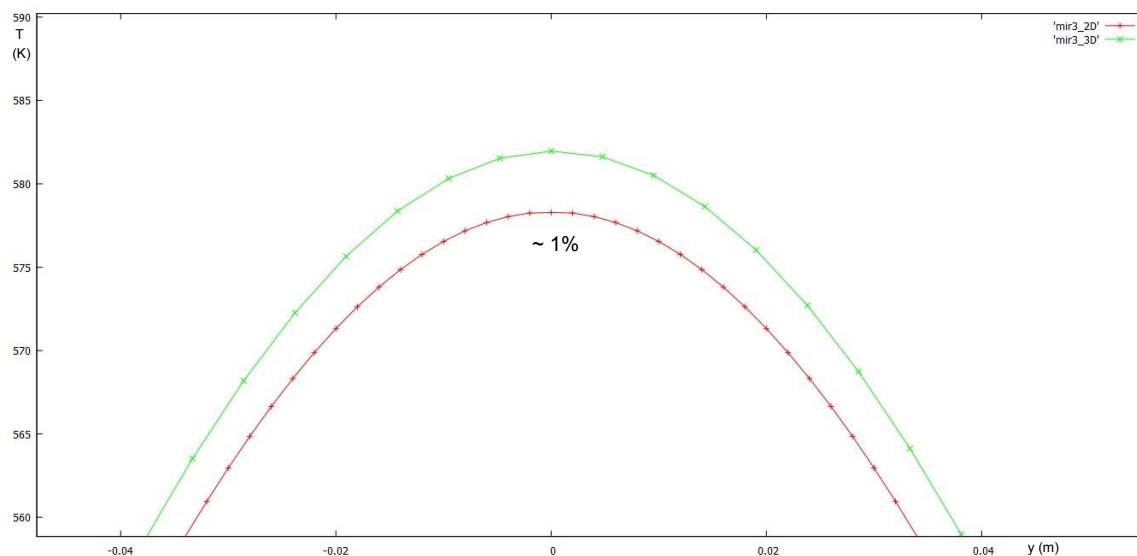


**Σχήμα 4.10:** Σύγκριση στην περιοχή zoom1.

Για παροχή μάζας στην είσοδο μεγαλύτερη από  $3 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  και ως την οριακή τιμή εμφάνισης λύσεων που φαίνονται να είναι αξονοσυμμετρικές (δηλαδή για παροχή μάζας



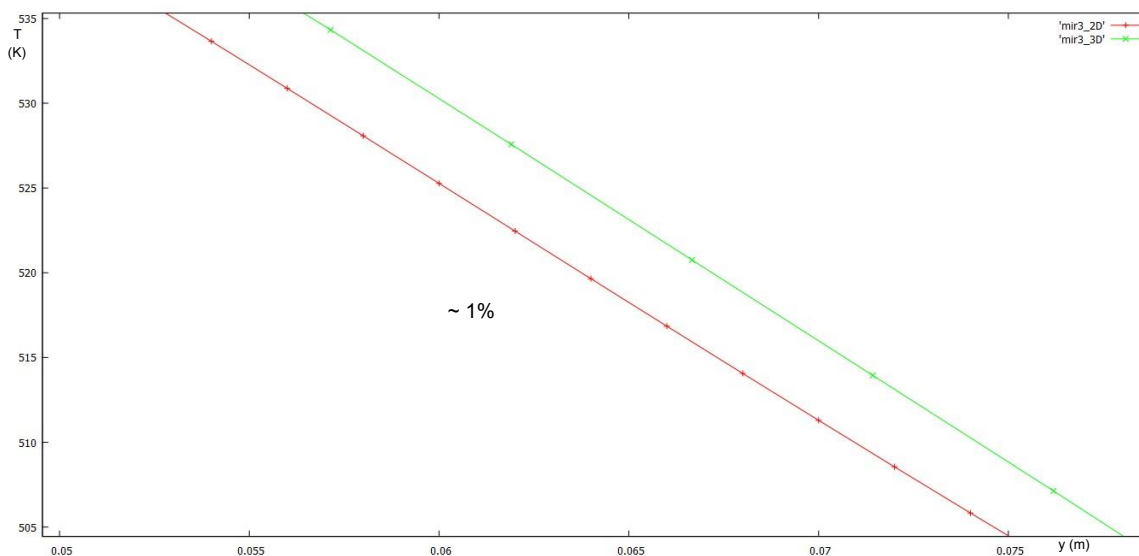
Σχήμα 4.11: Σύγκριση στην περιοχή zoom2.



Σχήμα 4.12: Σύγκριση στην περιοχή zoom3.

$5.65 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ ) οι λύσεις που προέκυψαν από 2D και επίλυση με το 3D μοντέλο συνεχίζουν να έχουν μικρή διαφορά, όμως η διαφορά μεταξύ τους γίνεται μεγαλύτερη.

Η σύγκριση των θερμοκρασιών που έγινε παραπάνω αλλά και συγκρίσεις που έγιναν για άλλα μεγέθη παρέχουν την πληροφορία πως οι μέγιστες διαφορές παρατηρούνται στον άξονα συμμετρίας. Μεγάλη εποπτεία παρέχει η σύγκριση για την τιμή του αδιάστατου αριθμού  $Nu_s$  μεταξύ των λύσεων από την 2D και την επίλυση με το 3D μοντέλο για διάφορες τιμές της παροχής μάζας για το σημείο  $(x, y, z) = (0.24m, 0, 0)$  που αντιστοιχεί σε ένα σημείο πάνω από το κέντρο της θερμαινόμενης πλάκας. Στον παρακάτω πίνακα φαίνονται οι τιμές του  $Nu_s$  για διάφορες παροχές μάζας στην είσοδο



Σχήμα 4.13: Σύγκριση στην περιοχή zoom4.

του αντιδραστήρα, για τους δύο τρόπους επίλυσης. Επίσης, στον πίνακα φαίνεται η σχετική διαφορά μεταξύ των δύο περιπτώσεων.

Παροχή μάζας ( $\times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ )	2D	3D	Διαφορά (%)
1	4.73176	4.74194	0.2
2	4.89791	4.86779	0.6
3	5.15759	5.07074	1.7
4	5.48074	5.32278	3
5	5.78328	5.56114	3

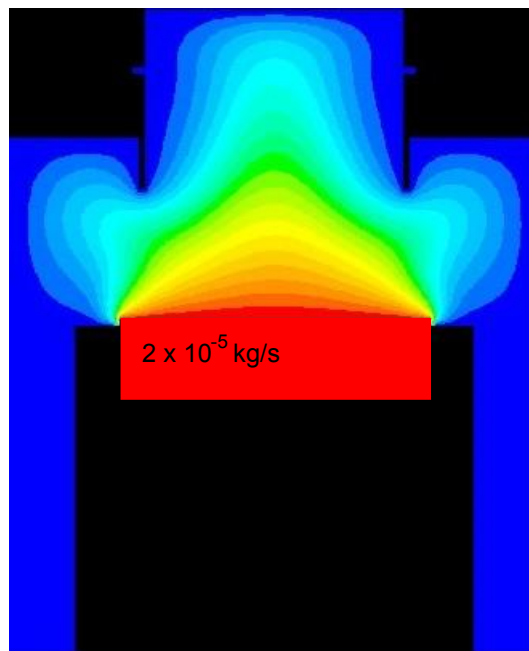
Μεταξύ των αποτελεσμάτων από 2D και 3D υπάρχει κάποια διαφορά. Πρέπει να βρεθεί ποια είναι η μέγιστη σχετική διαφορά μεταξύ δύο λύσεων ώστε να μπορεί να θεωρηθεί πως αυτές ταυτίζονται για την ακρίβεια που χρησιμοποιήθηκε στους υπολογισμούς. Δεδομένου ότι οι μη-αξονοσυμμετρικές λύσεις σχετίζονται με τη μικτή συναγωγή, η οποία χωρίς ανωστικές δυνάμεις δεν μπορεί να υπάρξει, αν θεωρηθεί αμελητέα η βαρύτητα (η οποία ευθύνεται για τις ανωστικές δυνάμεις), η διαφορά που θα έχουν δύο λύσεις, μία από επίλυση με το 2D μοντέλο και μία από επίλυση με το 3D μοντέλο, για ίδιες όλες τις τιμές των παραμέτρων του προβλήματος, θα είναι μια διαφορά που οφείλεται σε αριθμητικό σφάλμα. Το μέγεθος αυτού του σφάλματος μετά από υπολογισμούς βρέθηκε ίσο με 3.7%. Το ποσοστό της διαφοράς που υπολογίστηκε είναι μεγαλύτερο από τη μέγιστη διαφορά για τον  $Nu_s$  που βρέθηκε και παρουσιάζεται στον παραπάνω πίνακα. Έτσι, με την ακρίβεια που έγιναν οι υπολογισμοί στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία, οι λύσεις είναι ίδιες. (Περισσότερα για την παραδοχή αυτή στο κεφάλαιο 5.)



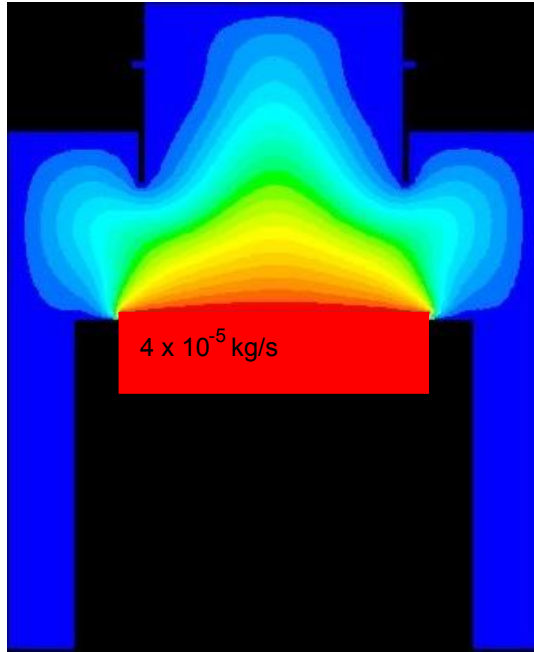
## 4.4 Συμμετρικά Αποτελέσματα από Επίλυση με το 3D Μοντέλο

Κατά τους υπολογισμούς, όταν χρησιμοποιήθηκε το 3D υπολογιστικό μοντέλο προέκυψαν συμμετρικές λύσεις και στην ενότητα 4.3 λαμβάνεται ότι ταυτίζονται με τις λύσεις που βρίσκονται με την επίλυση με το 2D μοντέλο. Οι συμμετρικές λύσεις αυτές βρέθηκαν για παροχές μάζας μικρότερες των  $5.7 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ .

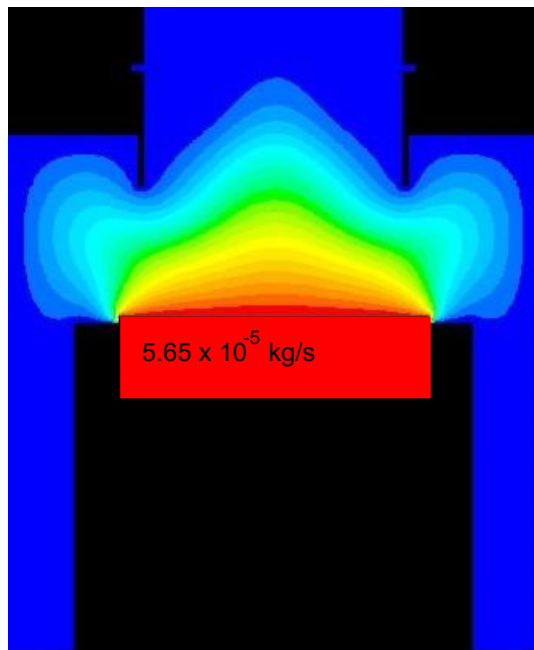
Στη συνέχεια φαίνεται η κατανομή της θερμοκρασίας για ένα επίπεδο που περιέχει τον άξονα συμμετρίας της γεωμετρίας για διάφορες τιμές της παροχής μάζας εντός της παραπάνω περιοχής τιμών.



**Σχήμα 4.14:** Η κατανομή της θερμοκρασίας για ένα επίπεδο που περιέχει τον άξονα συμμετρίας της γεωμετρίας για παροχή μάζας  $2 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ .



Σχήμα 4.15: Η κατανομή της θερμοκρασίας για ένα επίπεδο που περιέχει τον άξονα συμμετρίας της γεωμετρίας για παροχή μάζας  $4 \times 10^{-5} \frac{\text{kg}}{\text{s}}$ .

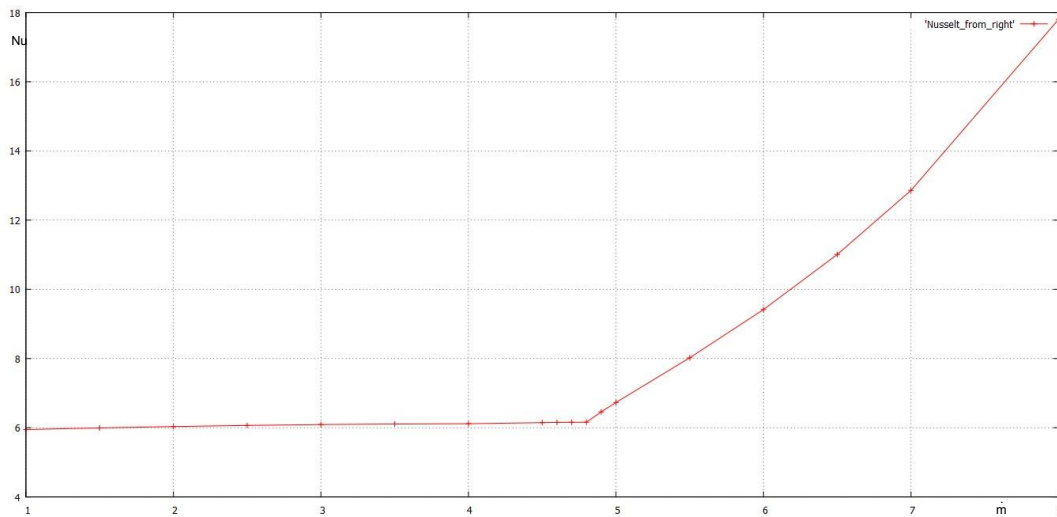


Σχήμα 4.16: Η κατανομή της θερμοκρασίας για ένα επίπεδο που περιέχει τον άξονα συμμετρίας της γεωμετρίας για παροχή μάζας  $5.65 \times 10^{-5} \frac{\text{kg}}{\text{s}}$ .

## 4.5 Κλάδοι Λύσεων του 3D Μοντέλου

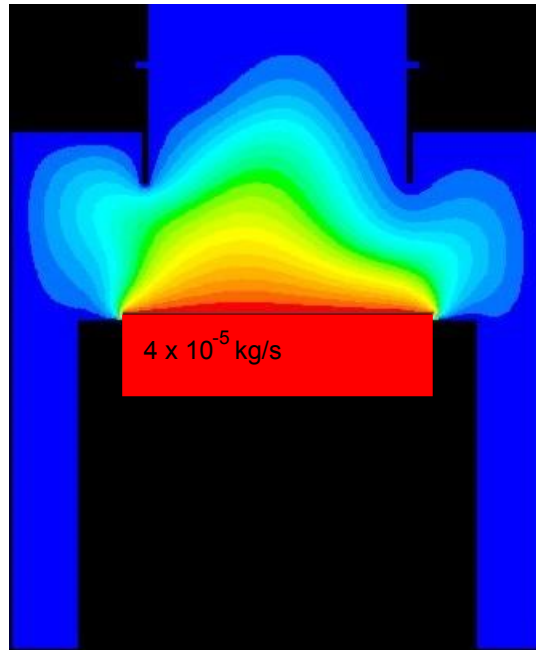
- Συμμετρικός κλάδος για παροχές μάζας μικρότερες  $5.65 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ . Έγινε υπολογισμός αρχικά για παροχή μάζας  $0.1 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  και στη συνέχεια χρησιμοποιήθηκε βηματισμός σε παράμετρο. Ο κλάδος αυτός αναφέρεται και εδώ για πληρότητα. Έχει ήδη αναλυθεί εκτενώς παραπάνω.
- Μη-συμμετρικός κλάδος όταν έγινε υπολογισμός αρχικά για παροχή μάζας  $17 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  και στη συνέχεια έγινε βηματισμός σε παράμετρο για τις μικρότερες παροχές μάζας.

Στην περιοχή αυτή, η τιμή του αριθμού  $Nu_s$  στο κέντρο της θερμαινόμενης πλάκας φαίνεται στο σχήμα 4.17.

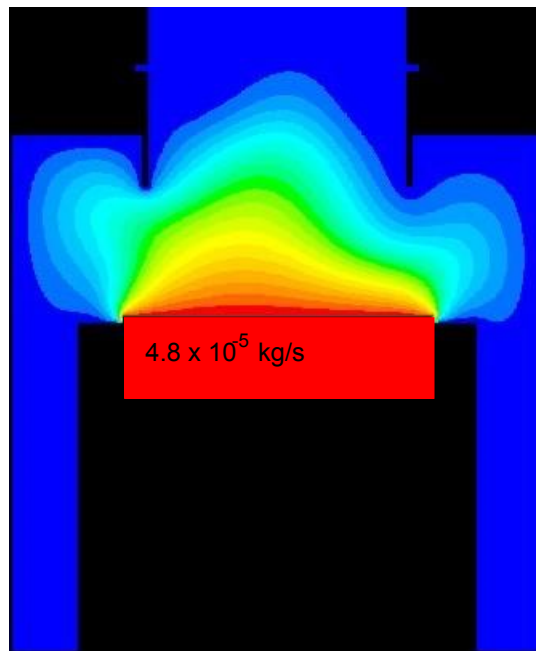


**Σχήμα 4.17:** Ο αριθμός  $Nu_s$  συναρτησει της παροχής μάζας για την περίπτωση όπου ο βηματισμός έγινε από μεγάλες προς μικρές παροχές μάζας ( $\times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ ).

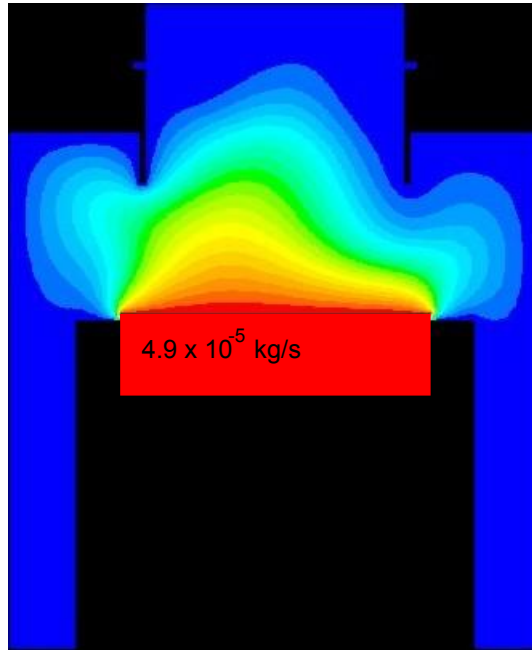
Στο σχήμα 4.17 διακρίνονται δύο τμήματα. Ένα όπου ο αριθμός  $Nu_s$  μεταβάλλεται έντονα και ένα όπου παραμένει σχετικά σταθερός με τη μεταβολή της παροχής μάζας στην είσοδο. Στα σχήματα 4.18 και 4.19 φαίνονται δύο λύσεις που αντιστοιχούν στον ένα κλάδο ενώ στα σχήματα 4.19 και 4.21 φαίνονται δύο λύσεις που αντιστοιχούν στον άλλο κλάδο.



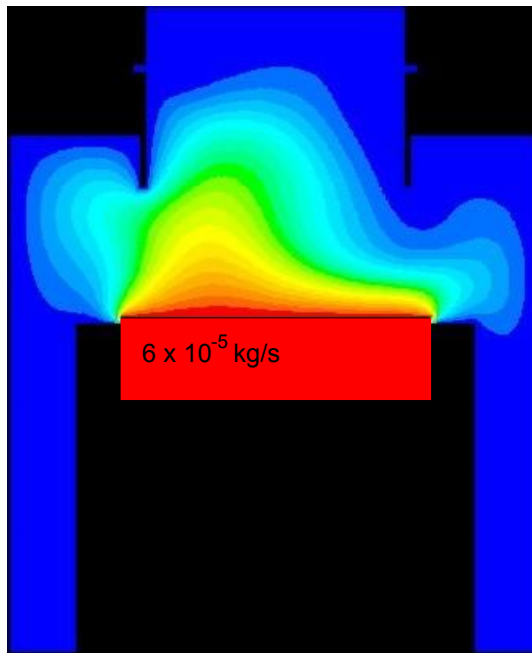
Σχήμα 4.18: Το πεδίο της θερμοκρασίας για ένα επίπεδο που περιέχει τον άξονα συμμετρίας της γεωμετρίας για παροχή μάζας  $4 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ .



Σχήμα 4.19: Το πεδίο της θερμοκρασίας για ένα επίπεδο που περιέχει τον άξονα συμμετρίας της γεωμετρίας για παροχή μάζας  $4.8 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ .

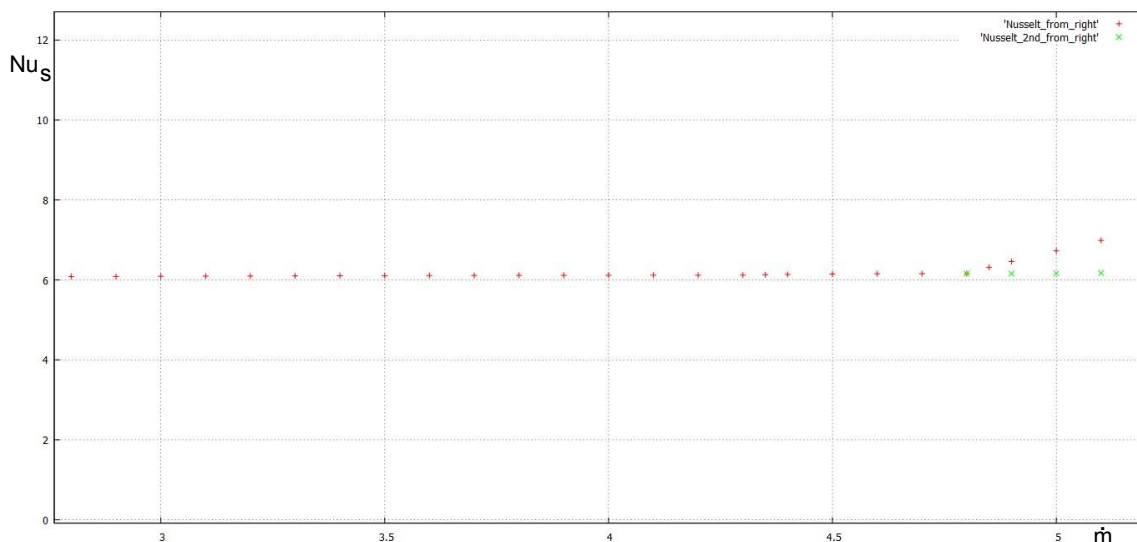


Σχήμα 4.20: Το πεδίο της θερμοκρασίας για ένα επίπεδο που περιέχει τον άξονα συμμετρίας της γεωμετρίας για παροχή μάζας  $4.9 \times 10^{-5} \frac{\text{kg}}{\text{s}}$ .



Σχήμα 4.21: Το πεδίο της θερμοκρασίας για ένα επίπεδο που περιέχει τον άξονα συμμετρίας της γεωμετρίας για παροχή μάζας  $6 \times 10^{-5} \frac{\text{kg}}{\text{s}}$ .

- Στο σημείο του σχήματος 4.17 που αλλάζει απότομα η κλίση της καμπύλης έγινε μια εκτίμηση που μάλλον επιβεβαιώνεται. Η εκτίμηση είναι πως με βηματισμό για την παροχή μάζας στην είσοδο από  $4.8 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  προς μεγαλύτερες παροχές, το τμήμα με τη μικρότερη κλίση θα συνεχιζόταν.



**Σχήμα 4.22:** Ο αριθμός  $Nu_s$  συναρτήσει της παροχής μάζας ( $\times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ ). Τα πράσινα σημεία αντιστοιχούν στην περίπτωση που έγινε βηματισμός σε παράμετρο από τα  $4.8 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  προς μεγαλύτερες παροχές.

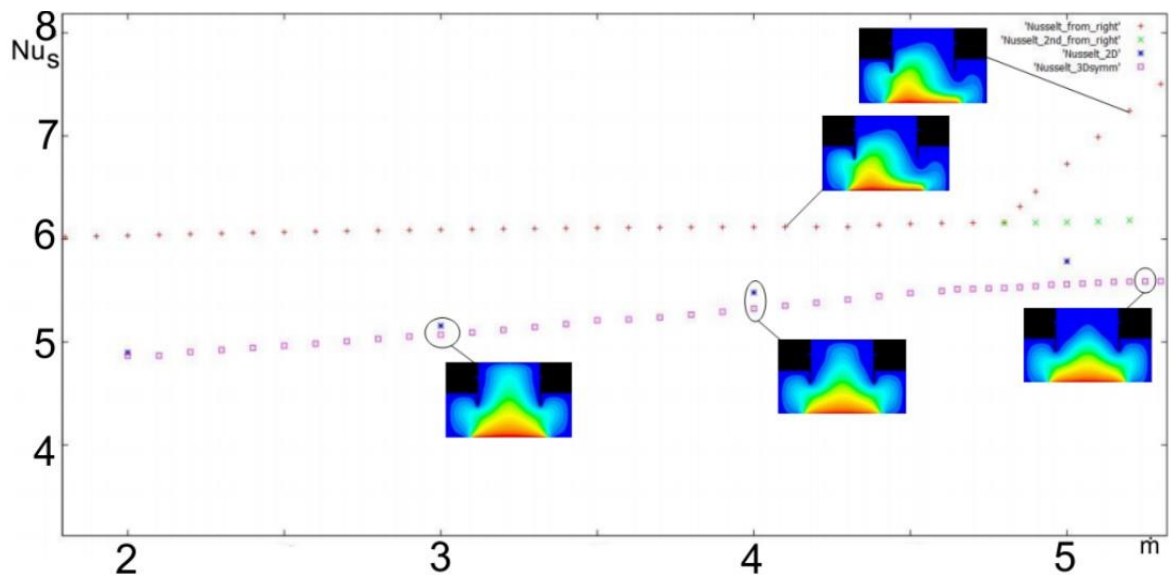
Καθώς το ενδιαφέρον περιστρέφεται γύρω από τις συμμετρικές λύσεις, εδώ αξίζει να παρατηρηθεί πως η διακλάδωση παρατηρείται για παροχή μάζας κοντινή στα  $5 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ . Για παροχή  $5 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  η επίλυση με το 2D μοντέλο σταματά να δίνει λύσεις όπου επικρατεί η ελεύθερη συναγωγή. Το γεγονός ότι η διαφορά των συμμετρικών λύσεων από τα δύο μοντέλα αυξάνεται στην περιοχή αυτή οδηγεί στην υπόθεση ότι μεταξύ  $5 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  και  $5.7 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  στην επίλυση με το 3D υπάρχει ένας άλλος κλάδος. Η διαφορά μεταξύ των κλάδων (αν υπάρχει διαφορετικός κλάδος) είναι μικρότερη από την ακρίβεια που έγιναν οι επιλύσεις στην παρούσα εργασία και έτσι η υπόθεση δεν μπορεί να διερευνηθεί στα πλαίσιά της.

## 4.6 Σύγκριση Λύσεων

Στην παρούσα ενότητα παρουσιάζονται μαζί οι λύσεις που βρέθηκαν και σχολιάστηκαν παραπάνω. Γίνεται σύγκριση μεταξύ των λύσεων. Λόγω της διαφορετικής τάξης μεγέθους δεν παρουσιάζονται οι λύσεις που προέκυψαν από την επίλυση με το 2D μοντέλο στις οποίες επικρατεί η εξαναγκασμένη συναγωγή.

Στο σχήμα 4.23 μπορούν να παρατηρηθούν οι κλάδοι των λύσεων μέσω των διαφορετικών τιμών που παίρνει ο  $Nu_s$  στον κάθε κλάδο. Επίσης, στο σχήμα φαίνονται τα προφίλ της θερμοκρασίας που αντιστοιχούν σε διάφορες λύσεις. Είναι εμφανής η μη-αξονοσυμμετρία των λύσεων του μη-αξονοσυμμετρικού κλάδου.

- Η ονομασία **2D** δηλώνει πως πρόκειται για τα αποτελέσματα που προέκυψαν για επίλυση με το 2D μοντέλο .
- Η ονομασία **3Dsymm** δηλώνει πως πρόκειται για τα αποτελέσματα που προέκυψαν για επίλυση με το 3D μοντέλο του προβλήματος στην περίπτωση που προκύπτουν συμμετρικές λύσεις.
- Η ονομασία **from right** δηλώνει το σύνολο των λύσεων που προέκυψαν όταν έγινε βηματισμός από μεγάλες παροχές μάζας προς μικρές.
- Η ονομασία **2nd from right** δηλώνει το σύνολο των λύσεων που προκύπτουν όταν από παροχή μάζας  $4.8 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ , όπου παρατηρείται μια έντονη μεταβολή της λύσης με μικρή μεταβολή στην παροχή μάζας, προς μεγάλες παροχές μάζας. Η καμπύλη που προκύπτει μοιάζει να είναι συνέχεια του αριστερού τμήματος και η μεγάλη μεταβολή δεν παρατηρείται πλέον.



Σχήμα 4.23: Η τιμή του αδιάστατου αριθμού  $Nu_s$  στη θέση  $(0.24m, 0, 0)$  συναρτήσει της παροχής μάζας σε  $10^{-5} \frac{kg}{s}$  και οι κατανομές της θερμοκρασίας για κάποιες λύσεις.



## Κεφάλαιο 5

# Συμπεράσματα - Προτάσεις για Συνέχεια της Διερεύνησης

Στο κεφάλαιο αυτό, παρατίθενται τα συμπεράσματα στα οποία οδήγησε η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία. Επιπροσθέτως, αναφέρονται προτάσεις για συνέχεια της διερεύνησης προς την κατεύθυνση που κινήθηκε η εργασία.

### 5.1 Συμπεράσματα

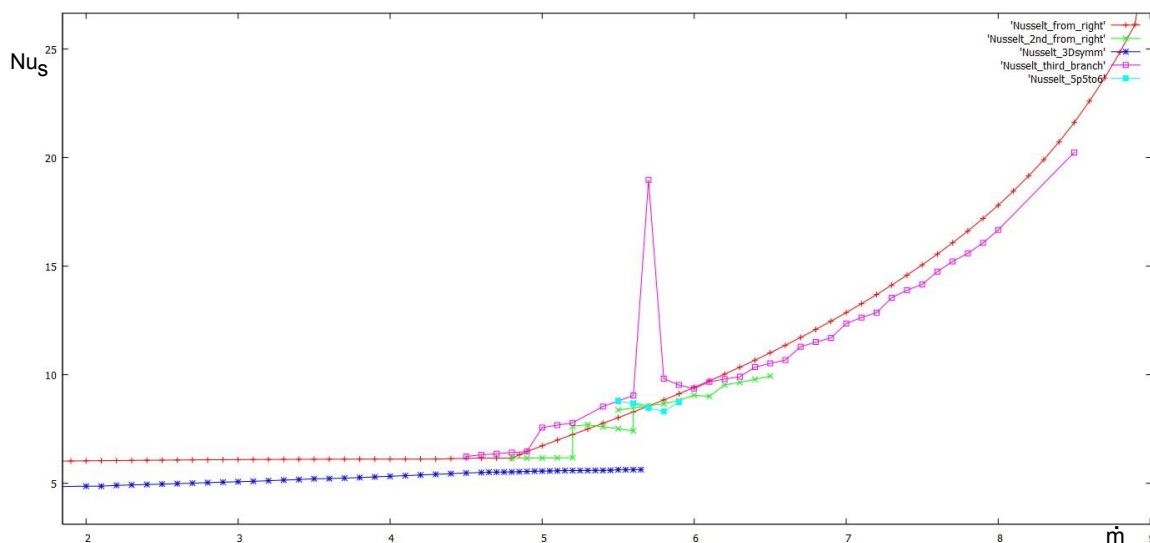
- Με χρήση του 2D μοντέλου, βρέθηκαν λύσεις που επικρατεί η ελεύθερη συναγωγή για παροχές μάζας στην είσοδο μικρότερες από  $5.7 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  και λύσεις που επικρατεί η εξαναγκασμένη συναγωγή για παροχές μάζας μεγαλύτερες από  $2.2 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ .
- Για μικρές παροχές μάζας, στην περιοχή τιμών που η ελεύθερη και η εξαναγκασμένη συναγωγή έχουν σχεδόν την ίδια επίδραση, με χρήση του 3D μοντέλου, βρέθηκαν λύσεις που με ακρίβεια της τάξης του 4% ταυτίζονται με τις λύσεις που προέκυψαν από την επίλυση από το 2D μοντέλο. Στις λύσεις που βρέθηκαν επικρατεί η ελεύθερη συναγωγή.

Όταν επιζητείται η εύρεση συμμετρικών λύσεων, για τον κλάδο λύσεων που επικρατεί η ελεύθερη συναγωγή, ο βηματισμός σε παράμετρο βρέθηκε πως πρέπει να γίνει από παροχή μάζας αρκετά μικρή, της τάξης μεγέθους των  $0.1 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ , στην οποία θα γίνει η ακριβής επίλυση.

- Για παροχές μάζας στην είσοδο του αντιδραστήρα από  $0.1 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  ως και μεγα-

λύστες από  $20 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ , με το 3D μοντέλο, βρέθηκαν λύσεις με μη-συμμετρικά πεδία ροής. Και για τις λύσεις αυτές παρατηρείται κοντά στα  $5 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  (για την ακρίβεια για  $4.8 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ ) διακλάδωση που φαίνεται περισσότερο στον αριθμό  $Nu_s$ . Η συμπεριφορά αυτού του κλάδου επιβεβαιώνει πως αυτή η περιοχή τιμών χρειάζεται ιδιαίτερη μελέτη.

Πέρα από τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία, η διερεύνηση του χώρου των λύσεων έχει προχωρήσει και οι κλάδοι που έχουν βρεθεί φαίνονται στο σχήμα 5.1. Η μελέτη αυτών των νέων κλάδων και η σχέση τους με τους άλλους, όπως επίσης και επίλυση σε διαφορετικές περιοχές για τις παραμέτρους συνεχίζεται.



**Σχήμα 5.1:** Ο αριθμός  $Nu_s$  συναρτήσει της παροχής μάζας για τους διάφορους κλάδους λύσεων που έχουν παρατηρηθεί με επίλυση με το 3D μοντέλο.

## 5.2 Προτάσεις για Συνέχεια της Διερεύνησης

- Όπως φαίνεται στο κεφάλαιο 4, η επίλυση σε πυκνότερα πλέγματα είναι αναγκαία. Η δουλειά της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας θα αποτελέσει τον οδηγό για την αντιμετώπιση του προβλήματος καθώς στις πολύ πιο χρονοβόρες επιλύσεις στο πυκνότερο πλέγμα η κάθε λάθος απόφαση κοστίζει πολύ περισσότερο απ' όσο κόστισε στα πλαίσια της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας.
- Εκκρεμεί η εύρεση, με το 3D μοντέλο, των αξονοσυμμετρικών λύσεων στις οποίες έχει επικρατήσει η εξαναγκασμένη συναγωγή. Παρά την εξονυχιστική διερεύνηση με τη διακριτοποίηση του χωρίου στην παρούσα εργασία, δεν προέκυψαν συμμετρικές λύσεις όπου επικρατεί η εξαναγκασμένη συναγωγή. Και αυτές οι

λύσεις όταν βρεθούν θα πρέπει να συγκριθούν με τις λύσεις που προέκυψαν από το 2D μοντέλο.

- Επίσης, όταν με το 3D μοντέλο, με βηματισμό σε παράμετρο ξεπεραστεί η παροχή μάζας στην είσοδο  $5.65 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$ , η οποία είναι η μέγιστη που εμφανίζεται συμμετρική λύση και η δυνατότητα επίλυσης σταματά, πρέπει να γίνει επιπλέον προσπάθεια για επίλυση καθώς αυτός μπορεί να είναι "ο δρόμος" για τον άλλο συμμετρικό κλάδο ο οποίος αναζητείται.
- Τέλος, οι μη συμμετρικές λύσεις που προέκυψαν για παροχές μάζας κοντά στα  $5 \times 10^{-5} \frac{kg}{s}$  εμφανίζουν μια διακλάδωση που χρειάζεται περαιτέρω διερεύνηση.

# Βιβλιογραφία

- [1] Cheimarios N., Koronaki E.D., Boudouvis A.G.: *Illuminating nonlinear dependence of film deposition rate in a cvd reactor on operating conditions*. Chemical Engineering Journal, 181-182:516–523, 2012.
- [2] Fotiadis D.I., Kieda S., Jensen K.F.: *Transport phenomena in vertical reactors for metalorganic vapor phase epitaxy*. Journal of Crystal Growth, 102:441–470, 1990.
- [3] Jensen K.F., Fotiadis D., McKenna D.R. Moffat H.K: *Transport phenomena in the growth of compound semiconductors and superlattices by MOCVD*. 353:353–375, 1987.
- [4] Koronaki E.D., Cheimarios N., Laux H. Boudouvis A.G.: *Non-axisymmetric flow fields in axisymmetric cvd reactor setups revisited: Influence on the film's non-uniformity*. ECS Solid State Letters, 3(4):37 –40, 2014.
- [5] Ohring, M.: *Materials Science of Thin Films - Deposition and Structure*. Elsevier, 2nd edition, 2002.
- [6] Pierson, H.O.: *Handbook Of Chemical Vapor Deposition*. Materials Science and Process Technology. William Andrew, 2nd edition, 2000.
- [7] Santen H., Kleijn C.R., van Den Akker H.E.A. van: *Multiple stability of mixed-convection flows in a chemical vapor deposition reactor*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 44:659–672, 2001.
- [8] Santen H., Kleijn C.R., van Den Akker H.E.A. van: *Symmetry breaking in a stagnation-flow cvd reactor*. Journal of Crystal Growth, 212:311–323, 2000.
- [9] H. Versteeg, W. Malalasekera: *An introduction to computational fluid dynamics*. Pearson Education, 2nd edition, 2007.
- [10] Wang C.A., Groves S.H., Palmateer S.C.: *Flow visualization studies for optimization of OMVPE reactor design*. Journal of Crystal Growth, 77:136—143, 1986.
- [11] Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., Nithiarasu P.: *The Finite Element Method for Fluid Dynamics*. Butterworth-Heinemann, 7th edition, 2013.

- [12] Μπεργελές, Γ.: *Υπολογιστική Ρευστομηχανική*. Συμεών, 2012.
- [13] Χειμαριός, Ν.: *Προσομοίωση πολλαπλών χωρικών κλιμάκων και συστημική ανάλυση διεργασιών χημικής απόθεσης από ατμό*. Διδακτορική διατριβή, Σχολή Χημικών Μηχανικών, Ε.Μ.Π., Αθήνα, 2012.