

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Δ.Π.Μ.Σ Υπολογιστική Μηχανική

Μαθηματική προσομοίωση Χημικών Διεργασιών Απόθεσης από Ατμό: Απόθεση Βολφραμίου σε Κατακόρυφο Αντιδραστήρα

Μεταπτυχιακή εργασία Κυπριανού Κατσούδα

Υπεύθυνος καθηγητής: Ανδρέας Μπουντουβής, Καθηγητής ΕΜΠ Υπόψη Νίκου Μαρκάτου, Ομοτ. Καθηγητή ΕΜΠ

Αθήνα, Νοέμβριος 2015

Περιεχόμενα

Περιεχόμενα	3
Πρόλογος	5
Περίληψη	6
Abstract	7
Κατάλογος συμβόλων	8
Κατάλογος εικόνων	10
Κατάλογος πινάκων	12
1 Εισαγωγή	13
1.1 Διεργασία Χημικής Απόθεση από Ατμό	13
1.2 Εφαρμογές μεθόδου Χημικής Απόθεσης από Ατμό	15
1.3 Τύποι αντιδραστήρων ΧΑΑ	16
2 Μαθηματικό μοντέλο	21
2.1 Μοντέλο χημικής κινητικής	21
2.2 Μοντέλο μεταφοράς	21
2.2.1 Παραδοχές	22
2.2.2 Εξισώσεις διατήρησης	22
2.2.3 Συνοριακές συνθήκες	24
2.2.4 Θερμοφυσικές ιδιότητες των συστατικών και του μίγματος	25
2.2.5 Ιδιότητες μεταφοράς των συστατικών και του μίγματος	26
2.2.6 Τελικοί υπολογισμοί του μοντέλου	27
3 Αριθμητική επίλυση	29
3.1 Διακριτοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς	29
3.2 Αλγόριθμος SIMPLE	31
3.3 Επαναληπτικές μέθοδοι επίλυσης	32
3.4 Τεχνικές υποχαλάρωσης	33
4 Προσομοίωση διεργασίας	35
4.1 Περιγραφή φυσικού προβλήματος	35
4.2 Δημιουργία πλέγματος και συνοριακές συνθήκες	38
4.3 Μελέτη ανεξαρτησίας επίλυσης από πύκνωση του πλέγματος	44
4.4 Μείωση ύψους αντιδραστήρα κατά τις προσομοιώσεις	53
4.5 Μελέτη χημικής απόθεσης βολφραμίου	57
4.5.1 Αποτελέσματα για δύο κατανομές οπών του δίσκου καταιονισμού	58
4.5.2 Αποτελέσματα για κατανομή 7 οπών του δίσκου καταιονισμού και ψυχρά	
τοιχώματα καταιονιστήρα	65
5 Συμπεράσματα	70

6	Βιβλιογραφία	71
Πα	ράρτημα	73
А к	α. Αρχείο εισόδου (q1) του λογισμικού PHOENICS για διατομή 7 οπών στον δίσκο αταιονισμού	73
В к	8. Αρχείο εισόδου (q1) του λογισμικού PHOENICS για διατομή 4 οπών στον δίσκο αταιονισμού	91

Πρόλογος

Η μεταπτυχιακή εργασία που περιέχεται στο παρόν τεύχος εκπονήθηκε στη Μονάδα Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής της Σχολής Χημικών Μηχανικών του Ε.Μ.Π. στα πλαίσια του Διατμηματικού Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών του Ε.Μ.Π. «Υπολογιστική Μηχανική».

Θα ήθελα καταρχάς να ευχαριστήσω θερμά τον Κοσμήτορα της Σχολής Χημικών Μηχανικών Ε.Μ.Π. και διευθυντή του Δ.Π.Μ.Σ. κ. Ανδρέα Μπουντουβή, ο οποίος ως επιβλέπων της εργασίας συνέβαλε τα μέγιστα στην ολοκλήρωση της μέσω των παρατηρήσεών του και της καίριας επέμβασής του σε θέματα μείζονος σημασίας.

Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω τον Ομότιμο Καθηγητή Ε.Μ.Π. κ. Νικόλαο Μαρκάτο για τη συνεχή επιτήρησή του και την υποστήριξη που μου προσέφερε. Τέλος, ευχαριστώ θερμά την δρ. Θεοδώρα Ξενίδου χωρίς τη συμβολή της οποίας δεν θα ήταν δυνατή η πραγματοποίηση της εργασίας αυτής.

Ο φοιτητής Κυπριανός Κατσούδας

Περίληψη

Στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία μελετάται η λειτουργία κατακόρυφου αντιδραστήρα χημικής απόθεσης από ατμό με ψυχρά τοιχώματα σε συνθήκες χαμηλής πίεσης για την παρασκευή στερεού υμενίου βολφραμίου. Στην πρώτη ενότητα γίνεται αναφορά στους μηχανισμούς της χημικής απόθεσης από ατμό και στα συστήματα αντιδραστήρων που χρησιμοποιούνται σήμερα.

Στην δεύτερη ενότητα παρουσιάζονται τα μαθηματικά μοντέλα μεταφοράς και χημικής κινητικής για τη διεργασία.

Στην τρίτη ενότητα γίνεται περιγραφή της αριθμητικής επίλυσης του μαθηματικού μοντέλου. Γίνεται αναφορά στη διακριτοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς, στις επαναληπτικές μεθόδους επίλυσης του συστήματος των διακριτοποιημένων εξισώσεων και στις τεχνικές υποχαλάρωσης για την επίτευξη σύγκλισης κατά την επαναληπτική διαδικασία.

Στην τέταρτη ενότητα γίνεται αναφορά στο φυσικό πρόβλημα και στον τρόπο προσομοίωσής του. Περιγράφεται η γεωμετρία του αντιδραστήρα που εξετάζεται και οι παράμετροι λειτουργίας. Για την προσομοίωση χρησιμοποιείται διδιάστατο τοπολογικά καρτεσιανό οριόδετο πλέγμα αξιοποιώντας τη συμμετρία ως προς τον κατακόρυφο άξονα. Πραγματοποιείται μελέτη ανεξαρτησίας της επίλυσης από πύκνωση του πλέγματος, επιλύοντας το υδροδυναμικό πρόβλημα, από την οποία προκύπτει ότι το πλέγμα 217×1973 θεωρείται κατάλληλο για την εξαγωγή συμπερασμάτων. Στη συνέχεια πραγματοποιούνται προσομοιώσεις για χημική απόθεση βολφραμίου (W) από αντίδραση ατμών WF₆ και H₂ επάνω σε θερμαινόμενο υπόστρωμα. Για τη διασπορά των αντιδρώντων χρησιμοποιείται καταιονιστήρας. Εξετάζονται τρεις περιπτώσεις. Στην πρώτη γίνεται χρήση διατομής επτά οπών για τον δίσκο καταιονισμού, στη δεύτερη χρήση διατομής τεσσάρων οπών, και, στην τρίτη χρήση διατομής επτά οπών με ψυχρά τοιχώματα καταιονιστήρα αντί για αδιαβατικά. Τα αποτελέσματα για τις τρεις περιπτώσεις είναι παρόμοια, με τον ρυθμό απόθεσης βολφραμίου στο υπόστρωμα να κυμαίνεται στο εύρος 3507-3523 Å/min.

Abstract

In this thesis the operation of a vertical low pressure cold wall chemical vapor deposition reactor is studied for the production of solid tungsten films. The first chapter describes the mechanisms of chemical vapor deposition and the different types of reactors that are used today.

In the second chapter the mathematical transport model and chemical kinetics model of the process are presented.

The third chapter describes the method for numerically solving the mathematical model. Reference is made to the discretization of the transfer equation, the iterative methods of solving the system of discretized equations and the under-relaxation techniques used in order to procure convergence of the iterative solution process.

The fourth chapter is devoted to the physical process and the way it is simulated. The geometry of the reactor and the operational parameters are described. For the domain a two dimensional cartesian body fitted coordinate grid is used while taking advantage of the symmetry around the vertical axis. Grid independence study is carried out, by solving the hydrodynamic problem, which shows that a grid of 217×1973 cells is considered appropriate for the following simulations. Subsequently, simulations of chemical deposition of tungsten (W) produced by reaction between gas reactants WF₆ and H₂ onto a heated substrate are performed. Inside the reactor a showerhead is used for the dispersion of the reactants. Three cases are examined. In the first case seven holes are used for the description of the shower plate. In the second case four holes are used. In the third case seven holes are used and the shower head walls are considered cold instead of adiabatic. The simulation results for all three cases are quite similar. The tungsten deposition rate is in the range of 3507-3523 Å/min.

Κατάλογος συμβόλων

Αγγλικά σὑμβολα

А	επιφάνεια όγκου ελέγχου [m²]	
Α	πίνακας συντελεστών του συστήματος επίλυσης αλγεβρικών εξισώσεων	
As	επιφάνεια απόθεσης [m²]	
C _p	ειδική θερμότητα αερίου [J/(kg·K)]	
D_i	ενεργός συντελεστής διάχυσης συστατικού ί, στην επιφάνεια απόθεσης [m2/s]	
g	διάνυσμα επιτάχυνσης της βαρύτητας [m/s²]	
G	ρυθμός ανάπτυξης στερεού υμενίου πάνω στο δισκίο απόθεσης [Å/min]	
Gi	αέρια αντιδρώντα και αέρια προϊόντα	
Н	ενθαλπία σχηματισμού συστατικού i [J/mol]	
j_i^T	διάνυσμα θερμικής διάχυσης του συστατικού i [kg/(m²·s)]	
j _i C	διάνυσμα ροής μάζας του συστατικού i [kg/(m²·s)]	
Κ	πλήθος αντιδράσεων αέριας φάσης	
Kn	αδιάστατος αριθμός Knudsen	
KS	πλήθος επιφανειακών αντιδράσεων	
L	χαρακτηριστικό μήκος του αντιδραστήρα [m]	
Ma	αδιάστατος αριθμός Mach	
M_{i}	μοριακό βάρος συστατικού i [kg/mol]	
$M_{\rm s}$	μοριακό βάρος στερεού υμενίου [kg/mol]	
MF _i	καθαρός ρυθμός παραγωγής ή κατανάλωσης μάζας του συστατικού i στην επιφά- νεια απόθεσης [kg/(m²·s)]	
MF	συνολική καθαρή ροή αέριας μάζας στην επιφάνεια απόθεσης [kg/(m²·s)]	
n	μοναδιαίο κάθετο διάνυσμα	
Ν	πλήθος συστατικών του αερίου μίγματος	
Р	πίεση [Pa, Torr]	
R	παγκόσμια σταθερά των αερίων [8.31441 J / (mol·K)]	
R_{Di}	μέγιστη ροή διάχυσης συστατικού ί, στην επιφάνεια απόθεσης [mol/(m²·s)]	
Re	αδιάστατος αριθμός Reynolds	
R_k^d	ρυθμός απόθεσης πάνω στο θερμαινόμενο υπόστρωμα που αντιστοιχεί στην επι- φανειακή αντίδραση k [mol/(m²·s)]	
R_k^g	ρυθμός αντίδρασης k στην αέρια φάση [mol/(m³·s)]	
R ^s k	ρυθμός επιφανειακής αντίδρασης k [mol/(m²·s)]	

$S_{\phi,P}$	όρος πηγής (παραγωγής ή κατανάλωσης) της μεταβλητής φ στον κόμβο Ρ του ό-
	γκου ελέγχου [[φ] kg/s]
Т	θερμοκρασία [°C, K]

- u συνιστώσα της ταχύτητας στη διεύθυνση x [m/s]
- ν συνιστώσα της ταχύτητας στη διεύθυνση y [m/s]
- w συνιστώσα της ταχύτητας στη διεύθυνση z $\left[m/s\right]$
- xi κλάσμα mole του συστατικού i

Ελληνικά σύμβολα

a	θερμική διαχυτότητα [m²/s]	
α_{ki}	πολυωνυμικοί συντελεστές για τον υπολογισμό των θερμοφυσικών	
	ιδιοτήτων του συστατικού ί,	
α_{s}	ταχύτητα του ήχου [m/s]	
Yik	στοιχειομετρικός συντελεστής αερίου αντιδρώντος (ή προϊόντος) i στην αντί- δραση αέριας φάσης k	
Γ_{ϕ}	ενεργός συντελεστής διάχυσης ή εναλλαγής της μεταβλητής φ	
δ	πάχος οριακού στρώματος [m]	
λ	θερμική αγωγιμότητα αερίου [W/(m·K)]	
λ_i	θερμική αγωγιμότητα του συστατικού i [W/(m·K)]	
λ_{m}	μέση ελεύθερη διαδρομή μορίων [m]	
μ	δυναμικό ιξώδες αερίου [Pa·s = kg/(m·s)]	
ρ	πυκνότητα	
$ ho_{s}$	πυκνότητα στερεού υμενίου [kg/m³]	
σ_{jk}	στοιχειομετρικός συντελεστής στερεού προϊόντος) στην	
	επιφανειακή αντίδραση k	
υ	διάνυσμα ταχύτητας [m/s]	
$\upsilon_{\rm s}$	συνιστώσα ταχύτητας κάθετη στην επιφάνεια απόθεσης [m/s]	
φ	εξαρτημένη μεταβλητή επίλυσης (π.χ. συνιστώσα ταχύτητας, θερμοκρασία, κλά- σμα μάζας συστατικού κ.λπ.)	
Φ_{ij}	παράγοντας συσχέτισης για το ζεύγος των συστατικών i-j	
ωi	κλάσμα μάζας του συστατικού i	
$\Omega_{D,ij}$	αδιάστατη παράμετρος (collision integral) για το συντελεστή διάχυσης για το ζεύ- γος των συστατικών i-j	
$\Omega_{\mu,I}$	αδιάστατη παράμετρος (collision integral) για το δυναμικό ιξώδες συστατικού i	

Κατάλογος εικόνων

Εικόνα 1. Βασική ορολογία για τη διεργασία χημικής απόθεσης από ατμό	13
Εικόνα 2. Διαδοχικά στάδια στη διεργασία χημικής απόθεσης από ατμό	14
Εικόνα 3. Αδαμάντινη επικάλυψη εργαλείων και εξαρτημάτων	16
Εικόνα 4. Οριζόντιος αντιδραστήρας ΧΑΑ ατμοσφαιρικής πίεσης με ταινία μεταφοράς.	.17
Εικόνα 5. Περιπτώσεις (α) καλής βηματικής επικάλυψης, (β) κακής βηματικής επικάλυψης.	18
Εικόνα 6. Οριζόντιος αντιδραστήρας ΧΑΑ χαμηλής πίεσης σωληνωτής διάταξης με πολ δισκία	λά 18
Εικόνα 7. Διάταξη αντιδραστήρα ΧΑΑ με χρήση πλάσματος	20
Εικόνα 8. Πεπερασμένος όγκος ελέγχου με ενδείξεις για τους γειτονικούς κόμβους	30
Εικόνα 9. Πειραματική διάταξη λειτουργίας αντιδραστήρα	35
Εικόνα 10. Γεωμετρία αντιδραστήρα χημικής απόθεσης από ατμό	36
Εικόνα 11. Όψεις του καταιονιστήρα που χρησιμοποιείται στην πειραματική διάταξη	37
Εικόνα 12. Διαστάσεις υπολογιστικού χωρίου.	38
Εικόνα 13. Δίσκος καταιονισμού. Το κόκκινο ευθύγραμμα τμήμα δείχνει την κατανομή οπών.	7 39
Εικόνα 14. Χωρισμός του υπολογιστικού χωρίου σε υποπεριοχές	40
Εικόνα 15. Πλήθος κελιών στις υποπεριοχές του χωρίου	42
Εικόνα 16. Λεπτομέρειες πλέγματος NY×NZ = 61×515: α) Στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης, β) Κοντά στο δίσκο καταιονισμού	43
Εικόνα 17. Θέσεις του χωρίου στις οποίες ελέγχονται οι μεταβλητές για τη μελέτη ανεξαρτησίας.	44
Εικόνα 18 Κατανομή συνιστώσας ν της ταχύτητας για y = 0.0095m.	45
Εικόνα 19 Κατανομή συνιστώσας ν της ταχύτητας για y = 0.0195m.	45
Εικόνα 20 Κατανομή συνιστώσας ν της ταχύτητας για z = 0.119m	45
Εικόνα 21 Κατανομή συνιστώσας ν της ταχύτητας για z = 0.134m	46
Εικόνα 22 Κατανομή συνιστώσας w της ταχύτητας για y = 0.0095m	46
Εικόνα 23 Κατανομή συνιστώσας w της ταχύτητας για y = 0.0195m	46
Εικόνα 24 Κατανομή συνιστώσας w της ταχύτητας για z = 0.119m.	47
Εικόνα 25 Κατανομή συνιστώσας w της ταχύτητας για z = 0.134m.	47
Εικόνα 26 Κατανομή θερμοκρασίας για y = 0.0095m.	47
Εικόνα 27 Κατανομή θερμοκρασίας για y = 0.0195m.	48
Εικόνα 28 Κατανομή θερμοκρασίας για z = 0.119m	48
Εικόνα 29 Κατανομή θερμοκρασίας για z = 0.134m του χωρίου	48
Εικόνα 30. Λεπτομέρειες πλέγματος NY×NZ = 217×1973: (a) Στην περιοχή του καταιονιστήρα, (β) Στον δίσκο καταιονισμού	50

Εικόνα 31. Διανύσματα ταχύτητας για την περιοχή εσωτερικά του καταιονιστήρα και πάνω από την περιοχή απόθεσης επιλύοντας στο πλέγμα NY×NZ = 217×197350
Εικόνα 32. Διανύσματα ταχύτητας (α) στον δίσκο καταιονισμού, (β) στην περιοχή απόθεσης, επιλύοντας στο πλέγμα NY×NZ = 217×1973
Εικόνα 33. Κατανομές συνιστωσών (α) ν, και, (β) w της ταχύτητας στο εσωτερικό του αντιδραστήρα επιλύοντας στο πλέγμα NY×NZ = 217×197351
Εικόνα 34. Ροϊκές γραμμές εντός του αντιδραστήρα κοντά στον δίσκο καταιονισμού και πάνω από την επιφάνεια απόθεσης52
Εικόνα 35. Σύγκριση τιμών ταχύτητας ν για τα τρία ύψη αντιδραστήρα για y=0.0095 m53
Εικόνα 36. Σύγκριση τιμών ταχύτητας ν για τα τρία ύψη αντιδραστήρα για z=0.119m54
Εικόνα 37. Σύγκριση τιμών ταχύτητας w για τα τρία ύψη αντιδραστήρα για y=0.0095m. 54
Εικόνα 38. Σύγκριση τιμών ταχύτητας w για τα τρία ύψη αντιδραστήρα για z=0.119m54
Εικόνα 39. Κατανομή της συνιστώσας ν της ταχύτητας για τα διαφορετικά ύψη αντιδραστήρα: α. 0.315m, β. 0.234m, γ. 0.1935m
Εικόνα 40. Κατανομή της συνιστώσας w της ταχύτητας για τα διαφορετικά ύψη αντιδραστήρα: α. 0.315m, β. 0.234m, γ. 0.1935m
Εικόνα 41. Επιλογή δύο κατανομών (Α: 7 οπές, Β: 4 οπές) για τον δίσκο καταιονισμού58
Εικόνα 42. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας εντός του αντιδραστήρα για διατομές (a) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού
Εικόνα 43. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού60
Εικόνα 44. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας στον δίσκο καταιονισμού διατομή 7 οπών του δίσκου καταιονισμού για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών60
Εικόνα 45. Κατανομές τιμών θερμοκρασίας [Κ] στο εσωτερικό του αντιδραστήρα για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού61
Εικόνα 46. Κατανομές τιμών θερμοκρασίας [K] στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού61
Εικόνα 47. Κατανομές τιμών πυκνότητας μίγματος [kg/m ³] στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού
Εικόνα 48. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο αντιδρών WF ₆ για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού63
Εικόνα 49. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο αντιδρών H ₂ για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού63
Εικόνα 50. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο προϊόν ΗF για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού64
Εικόνα 51. Κατανομή ρυθμού απόθεσης επάνω στο υπόστρωμα για διατομές 7 και 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού64
Εικόνα 52. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας εντός του αντιδραστήρα για διατομή 7 οπών στον δίσκο καταιονισμού και (α) αδιαβατικά, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα.

Εικόνα 53. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας θερμοκρασίας στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης για διατομή 7 οπών στον δίσκο καταιονισμού και (α) αδιαβατικά, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα
Εικόνα 54. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας στην διατομή 7 οπών του δίσκου καταιονισμού και (α) αδιαβατικά, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα
Εικόνα 55. Κατανομές τιμών θερμοκρασίας στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης για διατομή 7 οπών στον δίσκο καταιονισμού και (α) αδιαβατικά, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα67
Εικόνα 56. Κατανομές τιμών πυκνότητας μίγματος [kg/m³] για (α) αδιαβατικά, και, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα67
Εικόνα 57. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο αντιδρών WF6 για (α) αδιαβατικά, και, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα68
Εικόνα 58. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο αντιδρών Η2 για (α) αδιαβατικά, και, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα68
Εικόνα 59. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο προϊόν ΗF για (α) αδιαβατικά, και, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα69
Εικόνα 60. Κατανομή ρυθμού απόθεσης επάνω στο υπόστρωμα για αδιαβατικά και ψυχρά τοιχώματα καταιονιστήρα69

Κατάλογος πινάκων

Πίνακας 1. Παράμετροι λειτουργίας αντιδραστήρα
Πίνακας 2. Λεπτομέρειες γεωμετρίας καταιονιστήρα
Πίνακας 3. Υπολογισμός μέγιστων ποσοστιαίων μεταβολών των μεταβλητών μεταξύ των δύο πυκνότερων πλεγμάτων
Πίνακας 4. Συντελεστές υποχαλάρωσης για τις μεταβλητές κατά την επίλυση του υδροδυναμικού προβλήματος χρησιμοποιώντας πλέγμα NY×NZ = 217×197349
Πίνακας 5. Σύγκριση χρόνου και ακρίβειας εκτέλεσης υπολογισμών μετά από μείωση του ύψους του αντιδραστήρα53
Πίνακας 6. Υπολογισμός μέγιστων ποσοστιαίων μεταβολών για τις τιμές των συνιστωσών της ταχύτητας μεταξύ των υψών του αντιδραστήρα 0.315m και 0.193m
Πίνακας 7. Παράμετροι λειτουργίας αντιδραστήρα κατά τη μελέτη χημικής απόθεσης βολφραμίου
Πίνακας 8. Δεδομένα για τα χημικά είδη στην είσοδο του αντιδραστήρα
Πίνακας 9. Συντελεστές υποχαλάρωσης για τις μεταβλητές που επιλύονται κατά την προσομοίωση της διεργασίας με χημική αντίδραση για την περίπτωση δύο διατομών του δίσκου καταιονισμού
Πίνακας 10. Λεπτομέρειες γεωμετρίας καταιονιστήρα για διατομές 7 και 4 οπών του δίσκου καταιονισμού

1 Εισαγωγή

Η Χημική Απόθεση από Ατμό, ΧΑΑ (Chemical Vapor Deposition, CVD) είναι μία διεργασία η οποία χρησιμοποιείται εκτεταμένα εδώ και αρκετές δεκαετίες ενώ έχει συνολικό χρόνο ζωής περίπου δύο αιώνων. Η πρώτη καταγεγραμμένη εφαρμογή της μεθόδου αναπτύχθηκε τη δεκαετία του 1880 στην κατασκευή λυχνιών πυράκτωσης για την ενίσχυση του νήματος των λυχνιών μέσω απόθεσης άνθρακα ή κάποιου μετάλλου. Για τα επόμενα πενήντα χρόνια η ανάπτυξη της μεθόδου ήταν αργή και περιορίστηκε κυρίως στην πυρομεταλλουργία για την παραγωγή δύστηκτων μετάλλων υψηλής καθαρότητας, όπως το ταντάλιο και το τιτάνιο. Μετά τον β' παγκόσμιο πόλεμο παρατηρείται αυξημένο επιστημονικό και τεχνολογικό ενδιαφέρον για τη μέθοδο η οποία πλέον αναπτύσσεται με γοργούς ρυθμούς.

Στην συνέχεια περιγράφονται συνοπτικά οι μηχανισμοί της διεργασίας και γίνεται αναφορά στις ποικίλες εφαρμογές αυτής καθώς και στον τρόπο λειτουργίας διαφόρων τύπων αντιδραστήρα.

1.1 Διεργασία Χημικής Απόθεση από Ατμό

Η μέθοδος της χημικής απόθεσης από ατμό χρησιμοποιείται για την ανάπτυξη στερεών επιστρώσεων ή υμενίων (films) μικρού πάχους πάνω σε θερμαινόμενα υποστρώματα μέσω χημικής αντίδρασης από πρόδρομες ενώσεις σε αέρια φάση ^[3]. Χρησιμοποιώντας πληθώρα ενώσεων σε αέρια μορφή, μπορούν να παραχθούν επιστρώσεις με πλήρως καθορισμένες και αναπαραγωγίσιμες ηλεκτρικές, οπτικές, χημικές και μηχανικές ιδιότητες ^[8].



Εικόνα 1. Βασική ορολογία για τη διεργασία χημικής απόθεσης από ατμό.

Οι μηχανισμοί μέσω των οποίων λαμβάνει χώρα η χημική απόθεση ατμών είναι παρόμοιοι με τους αντίστοιχους μηχανισμούς που περιγράφουν τις ετερογενείς καταλυτικές διεργασίες. Τα αντιδρώντα προσροφώνται στην επιφάνεια και στη συνέχεια αντιδρούν σχηματίζοντας μία νέα επιφάνεια ^[1]. Βασική αρχή της μεθόδου αποτελεί η χρήση χημικής αντίδρασης μεταξύ μίας πτητικής ένωσης του υλικού από το οποίο θα αποτελείται το υμένιο με άλλες κατάλληλες ενώσεις σε αέρια φάση με σκοπό την εναπόθεση ενός μη πτητικού στερεού υμενίου πάνω στο υπόστρωμα ^[2]. Όπως φαίνεται στο επόμενο σχήμα, η ανάπτυξη του λεπτού υμενίου πάνω στο θερμαινόμενο υπόστρωμα περιλαμβάνει επιμέρους διεργασίες οι οποίες συνοψίζονται στα ακόλουθα στάδια ^[18]:



Εικόνα 2. Διαδοχικά στάδια στη διεργασία χημικής απόθεσης από ατμό.

- 1) Μεταφορά μάζας του αντιδρώντος μίγματος από την είσοδο του αντιδραστήρα προς τη ζώνη απόθεσης.
- 2) Αντιδράσεις αέριας φάσης που οδηγούν στο σχηματισμό των προδρόμων συστατικών του υμενίου και των παραπροϊόντων.
- Διάχυση των πρόδρομων συστατικών μέσω του οριακού στρώματος προς την επιφάνεια απόθεσης.
- 4) Προσρόφηση των πρόδρομων συστατικών στην επιφάνεια απόθεσης.
- 5) Επιφανειακή διάχυση των πρόδρομων συστατικών στα σημεία ανάπτυξης.
- Επιφανειακή αντίδραση που οδηγεί στο σχηματισμό των συστατικών του στερεού υμεviou.
- 7) Ενσωμάτωση των συστατικών στο στρώμα απόθεσης.
- 8) Εκρόφηση των παραπροϊόντων της επιφανειακής αντίδρασης.
- 9) Διάχυση των παραπροϊόντων μέσω του οριακού στρώματος.
- 10) Μεταφορά μάζας του μίγματος των παραπροϊόντων και της περίσσειας των αντιδρώντων μακριά από τη ζώνη απόθεσης προς την έξοδο του αντιδραστήρα.

Από τη στιγμή που το μίγμα των αντιδρώντων συστατικών εισάγεται στον αντιδραστήρα, αντιδράσεις μπορούν να λάβουν χώρα τόσο στην αέρια φάση όσο και πάνω στην επιφάνεια του υποστρώματος. Ένας από τους σημαντικούς παράγοντες που συντελούν σε μια επιτυχημένη διεργασία χημικής απόθεσης από ατμό είναι η προώθηση των ετερογενών αντιδράσεων στην επιφάνεια του υποστρώματος έναντι των ομογενών αντιδράσεων στην αέρια φάση. Οι ετερογενείς αντιδράσεις που συμβαίνουν επιλεκτικά πάνω στις θερμαινόμενες επιφάνειες οδηγούν στην παραγωγή υμενίων υψηλής ποιότητας, ενώ αντίθετα οι ομογενείς αντιδράσεις σχηματίζουν συστοιχίες μορίων στην αέρια φάση με αποτέλεσμα τη δημιουργία λεπτών στρωμάτων με χαμηλή πυκνότητα και μειωμένη πρόσφυση.

Η διεργασία της χημικής απόθεσης από ατμό είναι αποτελεσματική όταν οδηγεί στην παραγωγή λεπτών υμενίων με ελεγχόμενες και αναπαραγωγίσιμες ιδιότητες, όπως, πάχος, σύσταση, καθαρότητα, κρυσταλλική δομή, επιφανειακή μορφολογία και πρόσφυση με το στερεό υπόστρωμα. Επιπλέον, πρέπει να οδηγεί σε λογικούς ρυθμούς απόθεσης, ενώ η δομή των στρωμάτων που έχουν ήδη αναπτυχθεί πάνω στο στερεό υπόστρωμα δεν πρέπει να μεταβάλλεται σημαντικά κατά την εξέλιξη της διεργασίας. Αυτό σημαίνει πως ο χρόνος απόθεσης πρέπει να είναι αρκετά μικρός και η θερμοκρασία σχετικά χαμηλή ώστε η διάχυση στη στερεή φάση να μην αλλοιώνει το αποτέλεσμα των σταδίων της διεργασίας που έχουν προηγηθεί.

1.2 Εφαρμογές μεθόδου Χημικής Απόθεσης από Ατμό

Οι εφαρμογές της διεργασίας ΧΑΑ είναι πολλές. Καταρχάς, η ΧΑΑ χρησιμοποιείται ευρέως στη βιομηχανία μικροηλεκτρονικής για την παραγωγή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων και ημιαγωγών, την ανάπτυξη κρυσταλλικών στρωμάτων τα οποία χρησιμοποιούνται ως μονωτές (SiO₂, Si₃N₄ κ.α.), αγωγοί (δύστηκτα μέταλλα, πυριτίδια κ.α.) και υπεραγωγοί. Στις εφαρμογές αυτές η ομοιομορφία του πάχους της απόθεσης αποτελεί πολύ σημαντικό παράγοντα ο οποίος επηρεάζει την απόδοση λειτουργίας των μικροηλεκτρονικών συσκευών.

Άλλος τομέας αξιοποίησης είναι οι *οπτοηλεκτρονικές εφαρμογές* στις οποίες η ΧΑΑ χρησιμοποιείται για την παρασκευή οπτικών ινών. Οι ίνες αυτές αναπτύσσονται με απόθεση οξειδίου του πυριτίου, γερμανίου κ.λπ. στο εσωτερικό ηλεκτρονικών λυχνιών.

Η ΧΑΑ μπορεί να χρησιμοποιηθεί επίσης για τη δημιουργία προστατευτικών επικαλύψεων. Οι επικαλύψεις από TiC, TiN και Al₂O₃ χρησιμοποιούνται για την αύξηση της αντοχής διαφόρων κοπτικών εργαλείων. Επίσης, επικαλύψεις από Ta, Nb, Cr και TiC, Cr₂C₃, B₄C χρησιμοποιούνται για προστασία από τη διάβρωση. Για την αύξηση της θερμικής αντοχής, η μέθοδος της χημικής απόθεσης από ατμό εφαρμόζεται στην ανάπτυξη επικαλύψεων από Al₂O₃, SiC, Si₃N₄.



Εικόνα 3. Αδαμάντινη επικάλυψη εργαλείων και εξαρτημάτων.

Στις εφαρμογές ηλιακής ενέργειας πραγματοποιείται μετατροπή της ηλιακής ενέργειας σε ηλεκτρική χρησιμοποιούνται διατάξεις εκλεκτικής απορρόφησης και ηλιακά κύτταρα που κατασκευάζονται με απόθεση αρσενιδίου του πυριτίου και του γαλλίου.

Άλλες εφαρμογές περιλαμβάνουν την παραγωγή επικαλύψεων που συμβάλλουν στη μείωση της τριβής (λείανση) σε διάφορες επαφές ή για την κατασκευή διακοσμητικών επικαλύψεων (π.χ. απόθεση ΤiN στα ρολόγια). Τέλος, με τη μέθοδο της χημικής απόθεσης από ατμό παράγονται σύνθετα κεραμικά υλικά, πούδρες και καταλύτες ^[18].

1.3 Τύποι αντιδραστήρων ΧΑΑ

Οι αντιδραστήρες χημικής απόθεσης από ατμό είναι διαφόρων ειδών. Είναι διαθέσιμοι σε ένα πλήθος διαφορετικών γεωμετρικών διαμορφώσεων ανάλογα με τον προσανατολισμό της ροής του αερίου μίγματος ως προς την επιφάνεια απόθεσης (κατακόρυφοι ή οριζόντιοι) και ανάλογα με το πλήθος των δισκίων που χρησιμοποιούνται ταυτόχρονα. Οι διαφορετικές αυτές διαμορφώσεις λειτουργούν σε συνθήκες ελαττωμένης ή ατμοσφαιρικής πiεσης, σε συνδυασμό με συστήματα θερμών ή ψυχρών τοιχωμάτων, ανάλογα με τις απαιτήσεις της εκάστοτε εφαρμογής στην οποία χρησιμοποιούνται. Για παράδειγμα, οι κατακόρυφοι αντιδραστήρες μπορεί να είναι θερμών ή ψυχρών τοιχωμάτων, ενώ οι οριζόντιοι συνδυάζονται συνήθως με συστήματα ψυχρών τοιχωμάτων.

Ο πιο γενικός τύπος είναι ο Αντιδραστήρας ΧΑΑ Ατμοσφαιρικής Πίεσης (Atmospheric Pressure CVD, APCVD). Ο συγκεκριμένος τύπος χρησιμοποιείται για την απόθεση στρώματος υλικών σε στερεές επιφάνειες, η οποία μπορεί να είναι πάχους αρκετών μικρών (10-6 m). Η θερμοκρασία λειτουργίας του είναι συνήθως υψηλή (υψηλότερη από 850°C για το πυρίτιο και 400-800°C για τους ημιαγωγούς). Οι αντιδραστήρες αυτοί χρησιμοποιούνται κατά κόρον στη βιομηχανία μικροηλεκτρονικών συσκευών για την παραγωγή λεπτών επιστρώσεων ημιαγώγιμων υλικών, όπως τα Si και GaAs. Επίσης χρησιμοποιούνται για την επικάλυψη

επιφανειών σε εφαρμογές όπως δομική ενίσχυση, λείανση, θερμομόνωση, αντιδιαβρωτική προστασία, ηλεκτρική θωράκιση και οπτική ανάκλαση. Βασικό πλεονέκτημα του τύπου αυτού αποτελεί το χαμηλό κόστος λειτουργίας καθώς δεν απαιτείται η χρήση αντλιών για δημιουργία κενού. Στα μειονεκτήματα συγκαταλέγονται τα εξής: η ομοιομορφία του πάχους της απόθεσης μειώνεται για υψηλές τιμές θερμοκρασίας και πίεσης (ανομοιομορφία που ξεπερνά το 10%), και, η δυναμική της ροής του αερίου είναι δύσκολο να ελεγχθεί σε υψηλές πιέσεις ^[16].



Εικόνα 4. Οριζόντιος αντιδραστήρας ΧΑΑ ατμοσφαιρικής πίεσης με ταινία μεταφοράς.

Επόμενος τύπος είναι ο Αντιδραστήρας ΧΑΑ Χαμηλής Πίεσης (Low Pressure CVD, LPCVD), ο οποίος λειτουργεί υπό κενό. Η χρήση χαμηλότερης πίεσης οδηγεί σε επικαλύψεις επιφανειών με υψηλή ομοιομορφία πάχους. Αυτό συμβαίνει επειδή η ομοιομορφία αυτή εξαρτάται από την αλληλεπίδραση του ρυθμού διάχυσης των αερίων προς την επιφάνεια του δισκίου απόθεσης με το ρυθμό κατανάλωσης αυτών στις επιφανειακές αντιδράσεις. Σε χαμηλές πιέσεις ο συντελεστής διάχυσης είναι μεγάλος, συνεπώς ο ρυθμός διάχυσης των αερίων προς την επιφάνεια είναι μεγαλύτερος από τον ρυθμό των επιφανειακών αντιδράσεων. Επομένως σε συνθήκες χαμηλής πίεσης οι επιφανειακές αντιδράσεις καθορίζουν το συνολικό ρυθμό απόθεσης γεγονός που εξασφαλίζει καλή ομοιομορφία του πάχους του παραγόμενου υμενίου. Μέσω του τύπου αυτού παράγονται επίσης υμένια με καλύτερη βηματική επικάλυψη. Στις περιπτώσεις καλής βηματικής επικάλυψης παρατηρείται διατήρηση του επιθυμητού πάχους επίστρωσης κατά τη μεταβολή ύψους στην επικαλυπτόμενη επιφάνεια. Αντίθετα, στην περίπτωση κακής βηματικής επικάλυψης το πάχος επίστρωσης είναι μικρότερο στα σημεία που μεταβάλλεται το ύψος της επιφάνειας. Στην περίπτωση κακής επικάλυψης σε εργαλεία και εξαρτήματα μικροηλεκτρονικών συσκευών τα μεν πρώτα αποκτούν πτωχή προστασία, τα δε δεύτερα ατέλειες και ελαττώματα.



Εικόνα 5. Περιπτώσεις (α) καλής βηματικής επικάλυψης, (β) κακής βηματικής επικάλυψης.

Οι αντιδραστήρες χαμηλής πίεσης χρησιμοποιούνται στις ίδιες βιομηχανίες όπως και οι αντίστοιχοι ατμοσφαιρικής πίεσης. Τα πλεονεκτήματα αυτών έναντι των τελευταίων περιλαμβάνουν τα εξής: χαμηλότερες θερμοκρασίες αντίδρασης, καλή βηματική επικάλυψη και ομοιομορφία απόθεσης, καλύτερη διαχείριση δυναμικής της ροής του αερίου. Μειονέκτημα αυτών είναι το υψηλότερο κόστος λειτουργίας ^[16].



Εικόνα 6. Οριζόντιος αντιδραστήρας ΧΑΑ χαμηλής πίεσης σωληνωτής διάταξης με πολλά δισκία.

Στους Αντιδραστήρες ΧΑΑ Θερμών Τοιχωμάτων (Hot-Wall CVD Reactors), ο θάλαμος απόθεσης περιβάλλεται από έναν αυλωτό φούρνο, που εξασφαλίζει ισοθερμοκρασιακές συνθήκες, αφού τόσο το δισκίο όσο και τα τοιχώματα του αντιδραστήρα έχουν την ίδια υψηλή θερμοκρασία. Τα συστήματα αυτά έχουν χρησιμοποιηθεί ευρέως σε εργαστηριακές μελέτες για τη χημική απόθεση από ατμό διαφόρων μετάλλων. Τα πλεονεκτήματα των συστημάτων αυτών περιλαμβάνουν απλή λειτουργία σε μεγάλο εύρος πιέσεων και θερμοκρασιών, ταυτόχρονη απόθεση πολλών δισκίων καθώς και τοποθέτηση του δισκίου σε διάφορους προσανατολισμούς ως προς τη διεύθυνση της ροής. Το κύριο μειονέκτημα που εμφανίζεται σε αυτά τα συστήματα είναι ότι η απόθεση πραγματοποιείται τόσο πάνω στην επιφάνεια του δισκίου όσο και πάνω στα τοιχώματα του αντιδραστήρα. Αυτό δημιουργεί την ανάγκη συχνού καθαρισμού του αντιδραστήρα προκειμένου να αποφευχθεί η εισαγωγή προσμίξεων στα παραγόμενα υμένια. Επίσης, η μεγάλη κατανάλωση του πρόδρομου υλικού, εξαιτίας της απόθεσης πάνω στα τοιχώματα, μπορεί να προκαλέσει τη λειτουργία του συστήματος σε συνθήκες όπου ο ρυθμός απόθεσης περιορίζεται από το ρυθμό τροφοδοσίας (feed rate limited). Σε κάποιες περιπτώσεις, εξαιτίας της υψηλής θερμοκρασίας του αερίου μίγματος, ομογενείς αντιδράσεις στην αέρια φάση, οδηγούν σε μείωση του ρυθμού απόθεσης. Επιπλέον, η επιφάνεια των τοιχωμάτων που καλύπτεται από τις αποθέσεις μεταβάλλεται με το χρόνο και από πείραμα σε πείραμα, γεγονός που δεν εξασφαλίζει αναπαραγωγίσιμες πειραματικές συνθήκες. Για τους λόγους αυτούς, οι αντιδραστήρες θερμών τοιχωμάτων χρησιμοποιούνται περιορισμένα στη βιομηχανία, με εξαίρεση βέβαια την παραγωγή ημιαγωγών και οξειδίων όπου πρόδρομα υλικά με μεγάλη τάση ατμών είναι διαθέσιμα ^[18].

Από την άλλη πλευρά, οι Αντιδραστήρες ΧΑΑ Ψυχρών Τοιχωμάτων (Cold-Wall CVD Reactors) χρησιμοποιούνται εκτεταμένα τόσο σε εργαστηριακή όσο και σε βιομηχανική κλίμακα. Στα συστήματα αυτά, τα τοιχώματα του αντιδραστήρα βρίσκονται σε πολύ χαμηλότερη θερμοκρασία από το δισκίο απόθεσης, ενώ σε ορισμένες περιπτώσεις περαιτέρω ψύξη των τοιχωμάτων του αντιδραστήρα επιτυγχάνεται με χρήση ανεμιστήρων. Εξαιτίας των ψυχρών τοιχωμάτων, η απόθεση λαμβάνει χώρα μόνο πάνω στο θερμαινόμενο δισκίο και οι ομογενείς αντιδράσεις περιορίζονται στην περιοχή ακριβώς πάνω από τη θερμαινόμενη επιφάνεια του υποστρώματος. Επιπλέον, οι επιφανειακές αντιδράσεις ευνοούνται περισσότερο, επομένως επιτυγχάνονται πολύ μεγαλύτεροι ρυθμοί απόθεσης σε σχέση με τους αντιδραστήρες θερμών τοιχωμάτων. Για τους λόγους αυτούς, τα συστήματα ψυχρών τοιχωμάτων συ στημάτων σε συνθήκες όπου οι επιφανειακές αντιδράσεις καθορίζουν το ρυθμό απόθεσης μπορεί να επιτευχθεί πολύ εύκολα ^[18].

Άλλος τύπος είναι ο Αντιδραστήρας ΧΑΑ με χρήση Πλάσματος (Plasma-Enhanced CVD, PECVD). Στην περίπτωση αυτή γίνεται χρήση ραδιοσυχνότητας (RF), ή ηλεκτρικής εκκένωσης συνεχούς ρεύματος (DC) μεταξύ ηλεκτροδίων, για τη δημιουργία πεδίου πλάσματος στο αέριο απόθεσης. Ο θάλαμος στον οποίο πραγματοποιείται η αντίδραση βρίσκεται υπό κενό και σε θερμοκρασίες έως και 200 °C χαμηλότερων από άλλους τύπους αντιδραστήρων ΧΑΑ. Ο τύπος αυτός χρησιμοποιείται στη βιομηχανία μικροηλεκτρονικής σε εφαρμογές που απαιτούν επιστρώσεις με ιδιότητες καθορισμένες με μεγάλη ακρίβεια. Ο συνδυασμός λειτουργίας υπό κενό και χαμηλών θερμοκρασιών οδηγούν σε καλύτερη ομοιομορφία των εναποτιθέμενων στρωμάτων. Μειονέκτημα του τύπου αυτού είναι ότι απαιτείται ταυτόχρονη ρύθμιση αρκετά περισσότερων μεταβλητών λειτουργίας έναντι άλλων τύπων αντιδραστήρα, και, το κόστος λειτουργίας είναι υψηλό.



Εικόνα 7. Διάταξη αντιδραστήρα ΧΑΑ με χρήση πλάσματος.

Τελευταίος τύπος είναι ο Αντιδραστήρας Απόθεσης Ατομικού Στρώματος (Atomic Layer Deposition, ALD) ο οποίος χρησιμοποιείται για την παραγωγή λεπτών υμενίων με υψηλή ομοιομορφία απόθεσης. Η διεργασία μπορεί να είναι είτε θερμική είτε να γίνεται χρήση πλάσματος. Ιδανικά, το πρόδρομο αέριο μίγμα προσροφάται στην επιφάνεια απόθεσης εναποθέτοντας ένα ατομικό στρώμα τη φορά. Στην πράξη όμως, λόγω της στερεοχημικής παρεμπόδισης των πρόδρομων μορίων, μόνο ένα ποσοστό του ατομικού στρώματος δημιουργείται ανά κύκλο αντίδρασης. Ο αριθμός των κύκλων απόθεσης καθορίζει το πάχος του υμενίου, το οποίο μπορεί εύκολα να ελεγχθεί, ελέγχοντας τον αριθμό αυτόν. Ο αντιδραστήρας αυτός μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την παραγωγή λεπτών υμενίων από αρκετά υλικά όπως οξείδια (Al₃O₄, SiO₂, ZnO κ.λπ.), νιτρίδια (WN, Zr₃N₄, TiN κ.λπ.) και μέταλλα (Pt, W, Fe κ.λπ.). Τα πλεονεκτήματα του τύπου αυτού περιλαμβάνουν την ευκολία ακριβούς ρύθμισης του πάχους του υμενίου και την επίτευξη ικανοποιητικά ομοιόμορφης απόθεσης, τη λειτουργία σε χαμηλές θερμοκρασίες και το γεγονός ότι δεν πραγματοποιούνται αντιδράσεις στην αέρια φάση. Τα μειονεκτήματα αυτού είναι οι χαμηλοί ρυθμοί απόθεσης, ο δύσκολος καθορισμός χημείας πρόδρομων ενώσεων ανάλογα με την περίπτωση και το γεγονός ότι είναι δυνατόν να επιτευχθεί χαμηλή κρυσταλλικότητα λόγω χαμηλών θερμοκρασιών ^[16].

2 Μαθηματικό μοντέλο

Στην ενότητα αυτή αναπτύσσεται το μαθηματικό μοντέλο για το φυσικό πρόβλημα που περιγράφεται στην ενότητα 4.1. Το πρόβλημα αυτό περιλαμβάνει χημική απόθεση στερεού υμενίου βολφραμίου (W) από διάσπαση ατμών εξαφθοριούχου βολφραμίου (WF₆) επάνω σε θερμαινόμενο υπόστρωμα εντός κατακόρυφου αντιδραστήρα XAA με ψυχρά τοιχώματα σε συνθήκες χαμηλής πίεσης.

2.1 Μοντέλο χημικής κινητικής

Ο χημικός τύπος της επιφανειακής αντίδρασης είναι:

$$WF_6(g) + 3H_2(g) \xrightarrow{T} 6HF(g) + W(s)$$
(2.1)

Ως αναγωγικό μέσο χρησιμοποιείται αέριο H₂. Σε αρκετά υψηλές συγκεντρώσεις WF₆, ο ρυθμός της κινητικής , R^s_k, βρέθηκε να είναι ανεξάρτητος από τη συγκέντρωση του WF₆ και να εξαρτάται μόνο από τη μερική πίεση του υδρογόνου και τη θερμοκρασία, σύμφωνα με τη σχέση:

$$R_{k}^{s} = c_{H} \left[P_{WF_{6}} \right]^{0} \left[P_{H_{2}} \right]^{0.5} e^{-\frac{E_{a}}{RT}}$$
(2.2)

όπου, οι συγκεντρώσεις των αντιδρώντων εκφράζονται μέσω των μερικών πιέσεων. Για τις σταθερές ισχύει: $c_H = 1.7$ mol $Pa^{-0.5}m^{-2}s^{-1}$ και $E_a = 69$ kJ mol⁻¹. Σε χαμηλότερες συγκεντρώσεις του WF₆, ο ρυθμός απόθεσης περιορίζεται από τη διάχυση του WF₆ προς την επιφάνεια απόθεσης, οπότε και είναι πρώτης τάξης ως προς το WF₆. Στους υπολογισμούς λαμβάνεται υπόψιν η ενέργεια που καταναλώνεται στην αντίδραση απόθεσης.

2.2 Μοντέλο μεταφοράς

Στην ενότητα αυτή περιγράφεται λεπτομερώς το μοντέλο μεταφοράς της μελετούμενης διεργασίας ^[18]. Αντικείμενο της ολοκληρωμένης προσομοίωσης της χημικής απόθεσης από ατμό είναι η περιγραφή και μοντελοποίηση των μηχανισμών και φαινομένων που ελέγχουν τη διεργασία της απόθεσης, όπως η ροή του αερίου, η μεταφορά της ενέργειας και των συστατικών του μίγματος, καθώς και η χημεία της αέριας και της στερεάς φάσης. Στόχος του γενικού μοντέλου που αναπτύσσεται είναι η συσχέτιση της ποιότητας του παραγόμενου υμενίου, όπως, για παράδειγμα, ο ρυθμός απόθεσης και η κατανομή αυτού πάνω στο υπόστρωμα, με τις λειτουργικές παραμέτρους της διεργασίας, όπως πίεση, θερμοκρασία, παροχή και συγκεντρώσεις του μίγματος τροφοδοσίας, αλλά και με τη γεωμετρία του αντιδραστήρα απόθεσης.

2.2.1 Παραδοχές

Η ανάλυση της ροής εντός του αντιδραστήρα γίνεται σε μακροσκοπικό επίπεδο επομένως το ρευστό πρέπει να αντιμετωπίζεται ως συνεχές μέσο. Για να ισχύει η παραδοχή αυτή πρέπει οι διαστάσεις του εξεταζόμενου συστήματος σε όρους ενός χαρακτηριστικού μήκους L, να είναι μεγαλύτερες τουλάχιστον, από τη μέση ελεύθερη διαδρομή, λm, των μορίων του ρευστού. Ελέγχεται λοιπόν ο αριθμός Knudsen:

$$Kn = \frac{\lambda_m}{L}$$
(2.3)

για τον οποίο πρέπει να ισχύει Kn < 1. Στην παρούσα εργασία, το χαρακτηριστικό μήκος του αντιδραστήρα που μοντελοποιείται σε συνδυασμό με την πίεση λειτουργίας εξασφαλίζουν Kn < 1, γεγονός που επιτρέπει τη χρήση της υπόθεσης του συνεχούς μέσου.

Για το χαρακτηρισμό της ροής ως στρωτή ή τυρβώδης χρησιμοποιείται ο αριθμός Reynolds, Re, ο οποίος ορίζεται από τη σχέση ^[19]:

$$Re = \frac{\rho \upsilon L}{\mu}$$
(2.4)

Στους περισσότερους αντιδραστήρες χημικής απόθεσης από ατμό λόγω των χαμηλών ταχυτήτων του ρευστού, ο αριθμός Re κυμαίνεται από 0.1 έως 100, οπότε θεωρούμε στρωτή ροή (Re < 2000).

Για τον χαρακτηρισμό μιας ροής ως ασυμπίεστης ή ως συμπιεστής χρησιμοποιείται ο αριθμός Mach:

$$Ma = \frac{v}{\alpha_s}$$
(2.5)

(2.6)

Για τις ασυμπίεστες ροές ισχύει Ma < 0.3. Στους αντιδραστήρες ΧΑΑ λόγω των χαμηλών ταχυτήτων του ρευστού ο αριθμός Mach προκύπτει πολύ μικρότερος από τη μονάδα, επομένως η ροή θεωρείται ασυμπίεστη.

2.2.2 Εξισώσεις διατήρησης

Τα κύρια στοιχεία του μοντέλου μεταφοράς είναι οι εξισώσεις διατήρησης της μάζας, ορμής και ενέργειας σε συνθήκες μόνιμης κατάστασης και στρωτής ροής:

Εξίσωση διατήρησης μάζας: $\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$

Εξίσωση διατήρησης ορμής:

$$\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{\upsilon} \boldsymbol{\upsilon}) = -\nabla P + \rho \boldsymbol{g} + \nabla \cdot \left[\mu (\nabla \boldsymbol{\upsilon} + (\nabla \boldsymbol{\upsilon})^{\mathrm{T}}) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \boldsymbol{\upsilon}) \boldsymbol{I} \right]$$
(2.7)

Εξίσωση διατήρησης ενέργειας:

$$C_{p}\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{\upsilon}T) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{j}_{i}^{C} + \boldsymbol{j}_{i}^{T}) \cdot \frac{\nabla H_{i}}{M_{i}} - \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} H_{i}\gamma_{ik}R_{k}^{g}$$
(2.8)

Εξίσωση διατήρησης του συστατικού i:

$$\nabla \cdot (\rho \boldsymbol{\upsilon} \omega_{i}) = -\nabla \cdot \left(\boldsymbol{j}_{i}^{C} + \boldsymbol{j}_{i}^{T} \right) + M_{i} \sum_{k=1}^{K} \gamma_{ik} R_{k}^{g}$$

$$(2.9)$$

Σε ένα μίγμα Ν συστατικών, υπάρχουν Ν-1 ανεξάρτητες εξισώσεις διατήρησης των συστατικών αφού το άθροισμα των κλασμάτων μάζας, ω_i, όλων των συστατικών πρέπει να ισούται με τη μονάδα:

$$\sum_{i=1}^{N} \omega_i = 1 \tag{2.10}$$

Αυτό πρακτικά σημαίνει πως η επίλυση της εξίσωσης (2.9) γίνεται για N-1 συστατικά, ενώ το μοριακό κλάσμα του φέροντος αερίου υπολογίζεται από την εξίσωση (2.10).

Ο δεύτερος όρος στο δεξί μέλος της εξίσωσης (2.8) αντιστοιχεί στην ενέργεια που μεταφέρεται λόγω ενδοδιάχυσης του μίγματος, ενώ ο τελευταίος όρος συνδέεται με την παραγωγή και την κατανάλωση των συστατικών στις αντιδράσεις αέριας φάσης. Ο δεύτερος όρος στο δεξί μέλος της εξίσωσης (2.9) αντιστοιχεί στην παραγωγή ή την κατανάλωση του συστατικού i στις αντιδράσεις αέριας φάσης.

Εξαιτίας των μεγάλων βαθμίδων θερμοκρασίας που παρατηρούνται στο εσωτερικό των αντιδραστήρων χημικής απόθεσης από ατμό (ιδιαίτερα στην περιοχή πάνω από το θερμαινόμενο υπόστρωμα), για την περιγραφή των δυνάμεων άνωσης, ρ**g**, δεν χρησιμοποιείται η προσέγγιση Boussinesq. Αντίθετα, η πυκνότητα στον όρο άνωσης των εξισώσεων (2.7) περιγράφεται από τη σχέση:

$$\rho = \rho_0 + (\rho - \rho_0)$$
(2.11)

Η πυκνότητα αναφοράς, ρ_o , αντιστοιχεί στη θερμοκρασία αναφοράς, T_o . Ο όρος $\rho_o g$ που προκύπτει στις εξισώσεις (2.7) απορροφάται στον όρο της βαθμίδας της πίεσης.

2.2.3 Συνοριακές συνθήκες

Για την επίλυση του συστήματος των εξισώσεων (2.6) έως (2.9) απαιτείται η χρήση κατάλληλων συνοριακών συνθηκών για τις συνιστώσες της ταχύτητας, τη θερμοκρασία και τις συγκεντρώσεις των συστατικών του μίγματος.

Στα στερεά τοιχώματα χρησιμοποιούνται οι συνθήκες μη ολίσθησης και μη διείσδυσης:

$$\upsilon = 0 \tag{2.12}$$

Επειδή ο αντιδραστήρας που μελετάται είναι ψυχρών τοιχωμάτων, θεωρείται ότι η θερμοκρασία στα τοιχώματα είναι σταθερή και ίση με τιμή που είναι διαθέσιμη από πειραματικές μετρήσεις:

$$T = T_{wall}$$
(2.13)

Η συνολική ροή όλων των συστατικών του αερίου μίγματος θεωρείται μηδενική:

$$\mathbf{n} \cdot \left(\mathbf{j}_{i}^{C} + \mathbf{j}_{i}^{T} \right) = 0 \tag{2.14}$$

Στην επιφάνεια απόθεσης εξαιτίας της ενσωμάτωσης των ατόμων και της έκλυσης των αερίων προϊόντων, υπάρχει μια πεπερασμένη ταχύτητα κάθετη στην επιφάνεια απόθεσης. Συγκεκριμένα, ο σχηματισμός του λεπτού υμενίου στην επιφάνεια του θερμαινόμενου υποστρώματος πραγματοποιείται μέσω επιφανειακών αντιδράσεων της γενικής μορφής:

$$\gamma_{1k}G_1 + \gamma_{2k}G_2 + \cdots \rightarrow \gamma_{(n-1)k}G_{n-1} + \gamma_{nk}G_n + \cdots + \sigma_{1k}S_1 + \sigma_{2k}S_2 + \cdots$$
(2.15)

Εξαιτίας αυτών των επιφανειακών αντιδράσεων, υπάρχει ένας καθαρός ρυθμός παραγωγής ή κατανάλωσης της μάζας του συστατικού i, MF_i, στην επιφάνεια απόθεσης:

$$MF_{i} = M_{i} \sum_{k=1}^{KS} \gamma_{ik} R_{k}^{s}$$
(2.16)

Η συνολική καθαρή ροή μάζας στην επιφάνεια απόθεσης, MF, υπολογίζεται από τη σχέση:

$$MF = \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{KS} M_{i} \gamma_{ik} R_{k}^{s}$$
(2.17)

Η ροή μάζας δημιουργεί μια συνιστώσα ταχύτητας, υ_s, κάθετη στην επιφάνεια απόθεσης:

$$\upsilon_{s} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^{N} \sum_{k=1}^{KS} M_{i} \gamma_{ik} R_{k}^{s}$$
(2.18)

Η ταχύτητα αυτή είναι μικρή στην περίπτωση πολύ αραιών μιγμάτων (ω_i < 1), οπότε, σε κάποιες περιπτώσεις η παραπάνω οριακή συνθήκη μπορεί να αντικατασταθεί με τη συνθήκη της μη ολίσθησης στη στερεή επιφάνεια απόθεσης.

Για τα αέρια συστατικά που συμμετέχουν στις επιφανειακές αντιδράσεις, η καθαρή ροή στην επιφάνεια απόθεσης ισούται ουσιαστικά με τον καθαρό ρυθμό παραγωγής ή κατανάλωσης:

$$\mathbf{n} \cdot \left(\rho \mathbf{v} \omega_{i} + \mathbf{j}_{i}^{C} + \mathbf{j}_{i}^{T}\right) = M_{i} \sum_{k=1}^{KS} \gamma_{ik} R_{k}^{s}$$
(2.19)

Ισοθερμοκρασιακή συνθήκη χρησιμοποιείται για την εξίσωση διατήρησης της ενέργειας στην επιφάνεια απόθεσης, η οποία θερμαίνεται με ακτινοβολία μέσω ηλεκτρικών λαμπτήρων:

$$T = T_{react}$$
(2.20)

Στην είσοδο καθορίζονται οι τιμές για όλες τις μεταβλητές επίλυσης:

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}_{\rm in} \tag{2.21}$$

$$T = T_{in}$$
(2.22)

$$\omega = \omega_{i,in} \tag{2.23}$$

Στην έξοδο η ροή θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{v} = 0 \tag{2.24}$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{T} = \mathbf{0} \tag{2.25}$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \omega_{\mathbf{i}} = 0 \tag{2.26}$$

2.2.4 Θερμοφυσικές ιδιότητες των συστατικών και του μίγματος

Η επίλυση της εξίσωσης διατήρησης της ενέργειας (εξ. 2.8) απαιτεί τον υπολογισμό των θερμοφυσικών ιδιοτήτων των συστατικών και του μίγματος. Για τον υπολογισμό της ειδικής θερμότητας, C_{pi}, και της ενθαλπίας σχηματισμού, H_i, των συστατικών χρησιμοποιούνται πολυωνυμικές συναρτήσεις της θερμοκρασίας, σύμφωνα με τη βάση δεδομένων CHEMKIN^[4]:

$$\frac{C_{pi}(T)}{R} = \alpha_{1i} + \alpha_{2i}T + \alpha_{3i}T^2 + \alpha_{4i}T^3 + \alpha_{5i}T^4$$
(2.27)

$$\frac{H_{i}(T)}{RT} = \alpha_{1i} + \frac{\alpha_{2i}}{2}T + \frac{\alpha_{3i}}{3}T^{2} + \frac{\alpha_{4i}}{4}T^{3} + \frac{\alpha_{5i}}{5}T^{4} + \frac{\alpha_{6i}}{T}$$
(2.28)

Οι πολυωνυμικοί συντελεστές λαμβάνονται από διαθέσιμα βιβλιογραφικά δεδομένα. Η ειδική θερμότητα του μίγματος, C_p, υπολογίζεται από τη σχέση:

$$C_{p} = \sum_{i=1}^{N} \omega_{i} C_{pi}$$
(2.29)

2.2.5 Ιδιότητες μεταφοράς των συστατικών και του μίγματος

Η πυκνότητα του μίγματος, ρ, υπολογίζεται από το νόμο των τελείων αερίων:

$$\rho = \frac{PM}{RT}$$
(2.30)

Το δυναμικό ιξώδες του συστατικού i, μi, μπορεί να υπολογισθεί από τη σχέση:

$$\mu_{i} = 2.6693 \cdot 10^{-5} \frac{\sqrt{M_{i}T}}{\sigma_{i}^{2} \Omega_{\mu,i}}$$
(2.31)

Η αδιάστατη παράμετρος (collision integral), $\Omega_{\mu,i}$, υπολογίζεται ανάλογα με την παράμετρο $\Omega_{D,ij}$ μέσω της εμπειρικής σχέσης:

$$\Omega_{\mu,ij} = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)}$$
(2.32)

о́пор, A = 1.16145, B = 0.14874, C = 0.52487, D = 0.77320, E = 2.16178, F = 2.43787, G = 0.00000, H = 0.00000

Η θερμική αγωγιμότητα του συστατικού i, λ_i, για μονοατομικά αέρια υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\lambda_{i} = \frac{15}{4} \frac{R}{M_{i}} \mu_{i} \tag{2.33}$$

ενώ για πολυατομικά αέρια χρησιμοποιείται η διόρθωση Eucken:

$$\lambda_{i} = \left(\frac{15}{4} + 1.32\left(\frac{C_{p}}{R} - \frac{5}{2}\right)\right)\frac{R}{M_{i}}\mu_{i}$$

$$(2.34)$$

Για τον υπολογισμό του δυναμικού ιξώδους του μίγματος, μ, χρησιμοποιείται η εμπειρική σχέση που προτάθηκε από τον Wilke:

$$\mu = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{x_i \mu_i}{\sum_j x_j \Phi_{ij}} \right)$$
(2.35)

όπου, ο παράγοντας συσχέτισης Φ_{ij} υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{\frac{1}{4}} \right)^2$$
(2.36)

Η θερμική αγωγιμότητα του μίγματος, λ, υπολογίζεται από ανάλογη σχέση.

2.2.6 Τελικοί υπολογισμοί του μοντέλου

Στα πειράματα που πραγματοποιούνται σε αντιδραστήρες χημικής απόθεσης από ατμό, οι μετρήσεις που προκύπτουν και οι οποίες θα πρέπει να συγκρίνονται με τις προβλέψεις ενός θεωρητικού μοντέλου αφορούν κυρίως στην κατανομή του πάχους του παραγόμενου υμενίου κατά μήκος του δισκίου αλλά και στο μέσο ρυθμό απόθεσης πάνω σε αυτό. Για το λόγο αυτό, εκτός από τις κατανομές της ταχύτητας, της θερμοκρασίας και της συγκέντρωσης των συστατικών του μίγματος, το μοντέλο προσομοίωσης της λειτουργίας αντιδραστήρων χημικής απόθεσης από ατμό υπολογίζει το ρυθμό απόθεσης πάνω στην επιφάνεια του υποστρώματος. Για τον υπολογισμό του θεωρείται ένας μηχανισμός ο οποίος στηρίζεται στα διαδοχικά στάδια της διάχυσης των αερίων συστατικών του αντιδρώντος μίγματος προς την επιφάνεια απόθεσης και της επιφανειακής αντίδρασης που οδηγεί στο σχηματισμό του λεπτού υμενίου. Επομένως, για την επιφανειακή αντίδραση k, ο ρυθμός απόθεσης, R^d_k, πάνω στο θερμαινόμενο υπόστρωμα καθορίζεται από το πιο αργό στάδιο μέσω της σχέσης:

$$\frac{1}{R_{k}^{d}} = \frac{1}{R_{k}^{s}} + \sum_{i=1}^{NR} \frac{\gamma_{ik}}{R_{Di}}$$
(2.37)

Ο ρυθμός της επιφανειακής αντίδρασης, R^s_k, υπολογίζεται μέσω της εξίσωσης (2.2), ενώ για τον υπολογισμό της μέγιστης ροής διάχυσης του συστατικού i, R_{Di}, στην επιφάνεια απόθεσης χρησιμοποιείται η σχέση:

$$R_{Di} = \frac{1}{M_i} \frac{(\rho D_i \omega_i)_1}{d_{1S}}$$
(2.38)

Ο δείκτης 1 δηλώνει τις τιμές των μεγεθών στο πρώτο πλεγματικό σημείο από την επιφάνεια απόθεσης. Η απόσταση d_{15} ισούται με την απόσταση του σημείου αυτού από τη στερεή επιφάνεια. Ο ενεργός συντελεστής του αντιδρώντος συστατικού i, D_i , στο αέριο μίγμα υπολογίζεται από τη σχέση:

$$D_{i} = -\frac{\mathbf{j}_{i}^{C}}{\rho \nabla \omega_{i}}$$
(2.39)

Η σχέση (2.38) βασίζεται στο γεγονός ότι η ροή διάχυσης προς την επιφάνεια απόθεσης παίρνει τη μέγιστη τιμή της όταν η συγκέντρωση του συστατικού i, ω_i , γίνεται μηδενική στην επιφάνεια απόθεσης. Επειδή $D_i \rightarrow 0$ για $\omega_i \rightarrow 0$, η εξίσωση (2.38) περιλαμβάνει μόνο τον όρο της συνήθους διάχυσης και όχι την επίδραση της θερμικής διάχυσης.

Για τη μετατροπή του ρυθμού απόθεσης, R_k^d [mol/m²s] στο συνολικό ρυθμό ανάπτυξης πάνω στο δισκίο απόθεσης, G [Å/min] χρησιμοποιείται η σχέση:

$$G = 6 \cdot 10^{-11} \cdot \frac{M_s}{\rho_s} \sum_{k=1}^{KS} \sigma_{sk} R_k^d$$
(2.40)

3 Αριθμητική επίλυση

Για τη μελέτη λειτουργίας του αντιδραστήρα ΧΑΑ χρησιμοποιείται διδιάστατο υπολογιστικό χωρίο (άξονες y και z) και ως κύρια διεύθυνση της ροής λαμβάνεται ο άξονας z. Για τη προσομοίωση της διεργασίας χρησιμοποιείται η μέθοδος πεπερασμένων όγκων (Finite Volume Method, FVM) μέσω του λογισμικού PHOENICS. Η μέθοδος αυτή ανήκει στις ολοκληρωτικές μεθόδους αριθμητικής επίλυσης μερικών διαφορικών εξισώσεων και περιλαμβάνει τρία στάδια.

Στο 1º στάδιο ολοκληρώνονται οι εξισώσεις διατήρησης σε όλους τους πεπερασμένους όγκους ελέγχου του χωρίου επίλυσης.

Στο 2° στάδιο πραγματοποιείται διακριτοποίηση των εξισώσεων, δηλαδή αντικατάσταση των διαφόρων όρων της ολοκληρωτικής εξίσωσης με προσεγγίσεις πεπερασμένων διαφορών (στην εργασία αυτή χρησιμοποιείται σχήμα ανάντη διαφορών).

Τέλος, στο 3° στάδιο γίνεται επίλυση των αλγεβρικών εξισώσεων με χρήση επαναληπτικής μεθόδου.

Για την επίλυση μιας ορισμένης μεταβλητής *φ* μεταβλητής απαιτείται μια εξίσωση όπου η *φ* να είναι κυρίαρχη μεταβλητή. Οι εξισώσεις διατήρησης για τη μεταβλητή *φ* σε μόνιμη κατάσταση έχουν τη γενική διαφορική μορφή:

$$\nabla \cdot (\rho \varphi \mathbf{v}) = \nabla \cdot (\Gamma_{\varphi} \nabla \varphi) + S_{\varphi}$$
(3.1)

σε ολοκληρωτική μορφή στον όγκο ελέγχου είναι:

$$\int_{CV} \nabla \cdot (\rho \varphi \mathbf{v}) \, dV = \int_{CV} \nabla \cdot (\Gamma \nabla_{\varphi} \varphi) dV + \int_{CV} S_{\varphi} \, dV$$
(3.2)

Χρησιμοποιώντας το θεώρημα απόκλισης Gauss: $\int_{CV} \nabla \cdot \mathbf{\alpha} dV = \int_{A} \mathbf{n} \cdot \mathbf{\alpha} dA$, προκύπτει:

$$\int_{A} \mathbf{n} \cdot (\rho \varphi \mathbf{v}) \, d\mathbf{A} = \int_{A} \mathbf{n} \cdot (\Gamma_{\varphi} \nabla \varphi) d\mathbf{A} + \int_{CV} S_{\varphi} \, dV$$
(3.3)

3.1 Διακριτοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς

Για τη διακριτοποίηση της εξίσωσης μεταφοράς θα χρησιμοποιηθεί το υπόδειγμα όγκου ελέγχου της επόμενης εικόνας.



Εικόνα 8. Πεπερασμένος όγκος ελέγχου με ενδείξεις για τους γειτονικούς κόμβους.

Διακριτοποιώντας την εξίσωση 3.1 προκύπτει:

$$(CN + DN) - (CS + DS) + (CH + DH) - (CL + DL) = S_{\phi,P}V_P$$
 (3.4)

όπου για τους όρους συναγωγής και διάχυσης ισχύει:

$$CN = (\rho v)_{n}A_{n}\phi_{n} \quad (3.5\alpha), \qquad DN = -\Gamma_{\phi,n}A_{n} \left[\frac{\partial \phi}{\partial y}\right]_{n} \quad (3.5\beta)$$

$$CS = (\rho v)_{s}A_{s}\phi_{s} \quad (3.5\gamma), \qquad DS = -\Gamma_{\phi,s}A_{s} \left[\frac{\partial \phi}{\partial y}\right]_{s} \quad (3.5\delta)$$

$$CH = (\rho w)_{h}A_{h}\phi_{h} \quad (3.5\varepsilon), \qquad DH = -\Gamma_{\phi,h}A_{h} \left[\frac{\partial \phi}{\partial z}\right]_{h} \quad (3.5\sigma\tau)$$

$$CL = (\rho w)_{l}A_{l}\phi_{l} \quad (3.5\zeta), \qquad DL = -\Gamma_{\phi,l}A_{l} \left[\frac{\partial \phi}{\partial z}\right]_{l} \quad (3.5\eta)$$

Όπου A_i (i = n,s,h,l) το εμβαδόν του μετώπου του όγκου ελέγχου. Ανάλογα με το σχήμα διακριτοποίησης που χρησιμοποιείται γίνεται αντικατάσταση των τιμών της φ και της παραγώγου αυτής στα μέτωπα (n, s, h, l). Εδώ χρησιμοποιείται ανάντη σχήμα διακριτοποίησης. Το σχήμα αυτό είναι μικρότερης τάξης ακρίβειας από το σχήμα κεντρικών διαφορών αλλά η ένταση της ψευδοδιάχυσης, η οποία εμφανίζεται σε όλα τα διακριτά σχήματα, είναι χαμηλότερη. Έστω στο νότιο μέτωπο:

$$φ_s = φ_S$$
, όταν $v_s \ge 0$ ή $φ_s = φ_P$, όταν $v_s < 0$ (3.6)

Για την παράγωγο ισχύει:

$$\left[\frac{\partial \varphi}{\partial y}\right]_{s} = \frac{\varphi_{P} - \varphi_{S}}{\Delta y}$$
(3.7)

- <u>-</u> -

Για τον όρο πηγής ο οποίος στη γενική περίπτωση είναι συνάρτηση της εξαρτημένης μεταβλητής εφαρμόζεται γραμμικοποίηση:

$$S_{\phi,P}V_P = SU + SP\phi_P \tag{3.8}$$

(3.9)

όπου:
$$SU = S_U V_P$$

$$και SP = S_P V_P$$
(3.10)

Η τελική μορφή της διακριτοποιημένης εξίσωσης μεταφοράς τελικά είναι:

$$(\alpha_{\rm P} - SP)\phi_{\rm P} = \alpha_{\rm N}\phi_{\rm N} + \alpha_{\rm S}\phi_{\rm S} + \alpha_{\rm H}\phi_{\rm H} + \alpha_{\rm L}\phi_{\rm L} + SU$$
(3.11)

όπου

 $\alpha_{\rm N} = D_{\rm n} + \max[-C_{\rm n}, 0] \tag{3.12a}$

$$\alpha_{\rm S} = D_{\rm s} + \max[C_{\rm s}, 0] \tag{3.12\beta}$$

$$\alpha_{\rm H} = D_{\rm h} + \max[-C_{\rm h}, 0] \tag{3.12\gamma}$$

$$\alpha_{\rm L} = D_{\rm l} + \max[C_{\rm l}, 0] \tag{3.12\delta}$$

$$\alpha_{\rm P} = \alpha_{\rm N} + \alpha_{\rm S} + \alpha_{\rm H} + \alpha_{\rm L} + [C_{\rm n} - C_{\rm s} + C_{\rm h} - C_{\rm l}]$$
(3.13)

$$C_{i} = (\rho \upsilon)_{i} A_{i} \quad \gamma \iota \alpha \quad i = n, s, h, l$$
(3.14)

$$D_{i} = \frac{\Gamma_{\varphi,i}}{\delta x_{iP}} A_{i} \quad \gamma \iota \alpha \quad i = n, s, h, l$$
(3.15)

3.2 Αλγόριθμος SIMPLE

Οι μεταβλητές που επιλύονται είναι η πίεση, οι ταχύτητες κατά την y και z διεύθυνση, η θερμοκρασία και οι συγκεντρώσεις των συστατικών. Για τις συνιστώσες της ταχύτητας επιλύονται οι εξισώσεις διατήρησης της ορμής, για τη θερμοκρασία η εξίσωση διατήρησης της ενέργειας και για τις συγκεντρώσεις των συστατικών οι εξισώσεις διατήρησης. Για την πίεση όμως δεν υπάρχει τέτοια εξίσωση. Η μόνη επιπλέον εξίσωση είναι η εξίσωση συνέχειας, στην οποία δεν εμφανίζεται η πίεση. Για να αντιμετωπιστεί το πρόβλημα αυτό χρησιμοποιείται ο *αλγόριθμος SIMPLE*. Στηρίζεται στην εκτίμηση ενός αρχικού πεδίου πίεσης και στη διόρθωση αυτού, μέχρι οι ταχύτητες που προκύπτουν να ικανοποιήσουν την εξίσωση συνέχειας και τις εξισώσεις ορμής. Τα βήματα που ακολουθούνται συνοπτικά είναι τα ακόλουθα ^[17]:

- 1. Εκτίμηση πεδίου πίεσης.
- 2. Επίλυση εξισώσεων ορμής για τις ταχύτητες.

- 3. Επίλυση εξίσωσης διόρθωσης πίεσης.
- 4. Υπολογισμός σωστής πίεσης.
- 5. Διόρθωση ταχυτήτων.
- 6. Επίλυση της εξίσωσης θερμότητας, συγκέντρωσης συστατικών και λοιπών βαθμωτών μεγεθών.
- Επιστροφή στο βήμα 1 και επανάληψη της διαδικασίας μέχρι να πραγματοποιηθεί η σύγκλιση.

Το λογισμικό PHOENICS βασίζεται στον αλγόριθμο SIMPLE και στις βελτιώσεις αυτού που ακολούθησαν, οι οποίες επιταχύνουν τη σύγκλιση.

3.3 Επαναληπτικές μέθοδοι επίλυσης

Η διακριτοποιημένη μορφή της εξίσωσης μεταφοράς (εξ. 3.11) είναι της μορφής:

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\Phi} = \mathbf{B} \tag{3.16}$$

όπου: $Φ = φ_i$ (i = 1,...,N) το διάνυσμα της μεταβλητής που επιλύεται,

Ν το πλήθος των κόμβων,

 $A = a_{ij}$ (I, j = 1, ..., N) ο πίνακας των συντελεστών της διακριτοποιημένης εξίσωσης,

 \mathbf{B} = b_i (i = 1,...,N) το υπόλοιπο της εξίσωσης

Για την επίλυση των αλγεβρικών εξισώσεων χρησιμοποιούνται οι ακόλουθες τεχνικές επίλυσης.

1. Μέθοδος πλήρους πεδίου.

$$\alpha_{P}\phi_{P}^{new} - \alpha_{N}\phi_{N}^{new} - \alpha_{S}\phi_{S}^{new} - \alpha_{H}\phi_{H}^{new} - \alpha_{L}\phi_{L}^{new} = \alpha_{T}\phi_{T} + S_{\phi}$$
(3.17)

Στη μέθοδο πλήρους πεδίου γίνεται ταυτόχρονη επίλυση των εξισώσεων σε όλα τα σημεία του πεδίου. Η τεχνική αυτή επιτρέπει την ταχύτερη διασπορά των οριακών συνθηκών σε όλο το υπολογιστικό πεδίο. Συνήθως όμως οδηγεί σε αργή σύγκλιση γιατί καθυστερεί την εξάπλωση της μεταβολής στο πεδίο. Χρησιμοποιείται για την εξίσωση διόρθωσης της πίεσης και τις εξισώσεις διατήρησης των συστατικών και της ενέργειας.

2. Μέθοδος γραμμή προς γραμμή

$$\alpha_{P}\phi_{P}^{new} - \alpha_{N}\phi_{N}^{new} - \alpha_{S}\phi_{S}^{new} = \alpha_{H}\phi_{H}^{old} + \alpha_{L}\phi_{L}^{old} + \alpha_{T}\phi_{T} + S_{\phi}$$
(3.18)

Στη μέθοδο επίλυσης γραμμή προς γραμμή γίνεται αναδιάταξη των εξισώσεων ώστε να είναι δυνατή η επίλυσή τους κατά μήκος μιας κατακόρυφης γραμμής υπολογιστικών σημείων. Οι όροι που περιέχουν τις τιμές της μεταβλητής στα σημεία έξω από τη γραμμή επίλυσης μεταφέρονται στο δεξιό σκέλος της εξίσωσης. Το σύστημα μετατρέπεται σε τρι-διαγώνιο και επιλύεται από το λογισμικό PHOENICS μέσω της μεθόδου ADI (Alternating Direction Implicit).

Στην αρχή της επαναληπτικής διαδικασίας πραγματοποιείται αρχικοποίηση των τιμών των μεταβλητών σε κάθε κελί του υπολογιστικού χωρίου. Στο στάδιο αυτό, συνήθως, τίθενται παντού οι γνωστές τιμές εισόδου κάθε μεταβλητής. Επιπλέον, ορίζεται ένας μέγιστος αριθμός επαναλήψεων και μία μέγιστη τιμή (ξεχωριστή για κάθε μεταβλητή) για τα υπόλοιπα. Όταν το υπόλοιπο (residual) κάθε μεταβλητής πάρει τιμή μικρότερη αυτής που έχει οριστεί και σταθεροποιηθεί σε αυτήν, τότε θεωρείται ότι η επίλυση έχει συγκλίνει.

3.4 Τεχνικές υποχαλάρωσης

Σε πολλές περιπτώσεις παρατηρούνται δυσκολίες κατά τη σύγκλιση της επαναληπτικής διαδικασίας για κάποιες ή όλες τις μεταβλητές που επιλύονται. Για το λόγο αυτό γίνεται χρήση τεχνικών υποχαλάρωσης:

1. Γραμμική υποχαλάρωση

Η τεχνική της γραμμικής υποχαλάρωσης (linear relaxation) είναι ο πιο κοινός τρόπος χαλάρωσης της λύσης. Η νέα τιμής της μεταβλητής προκύπτει:

$$\varphi^{\text{new}} = \alpha_{\text{L}} \varphi^{\text{new}} + (1 - \alpha_{\text{L}}) \varphi^{\text{old}}$$
(3.19)

Ο συντελεστής γραμμικής υποχαλάρωσης α_L λαμβάνει τιμές στο διάστημα (0,1). Όσο υψηλότερη η τιμή του συντελεστή αυτού τόσο ταχύτερη η σύγκλιση. Η τεχνική αυτή χρησιμοποιείται για την πίεση και τη θερμοκρασία.

2. Υποχαλάρωση ψευδούς χρονικού βήματος

Η τεχνική της υποχαλάρωσης ψευδούς χρονικού βήματος (false time step relaxation) τροποποιεί τις εξισώσεις πεπερασμένων όγκων, εισάγοντας ένα ψευδομεταβατικό όρο πηγής:

$$S_{\varphi} = (\rho V)_{P} \frac{\phi^{old} - \phi^{new}}{dt_{f}}$$
(3.20)

Από τη γραμμικοποίηση του όρου αυτού προκύπτουν οι ακόλουθοι όροι:

$$S_{\rm U} = \frac{(\rho V)_{\rm P}}{dt_{\rm f}} \phi^{\rm old}$$
(3.21)

$$S_{\rm P} = -\frac{(\rho V)_{\rm P}}{dt_{\rm f}} \tag{3.22}$$

Ο συντελεστής υποχαλάρωσης dt_f δηλώνει το ψευδές χρονικό βήμα. Όσο μικρότερος είναι ο συντελεστής αυτός, τόσο μεγαλύτερες είναι οι τιμές των όρων S_U και S_P, επομένως τόσο πιο πολύ η νέα λύση τείνει να ταυτίζεται με αυτή της προηγούμενης επανάληψης (ισχυρή υποχαλάρωση). Η τεχνική της υποχαλάρωσης ψευδούς χρονικού βήματος εφαρμόζεται στις εξισώσεις διατήρησης της ορμής και στις εξισώσεις διατήρησης των συστατικών.

4 Προσομοίωση διεργασίας4.1 Περιγραφή φυσικού προβλήματος

Η μελέτη της παρούσας εργασίας βασίζεται σε λειτουργία πειραματικής διάταξης εγκατεστημένης στο ινστιτούτο CIRIMAT της Γαλλίας. Ο αντιδραστήρας XAA αποτελείται από ένα κατακόρυφο θάλαμο κυλινδρικού σχήματος κατασκευασμένο από χαλαζία και λειτουργεί σε συνθήκες χαμηλής πίεσης. Τα τοιχώματα του αντιδραστήρα διατηρούνται ψυχρά ώστε να μην υπάρχει απόθεση σε αυτά. Ως φέρον αέριο χρησιμοποιείται το άζωτο, το οποίο αναμιγνύεται με τα αέρια αντιδρώντα πριν την είσοδο του μίγματος στον αντιδραστήρα. Εισερχόμενο το αέριο μίγμα διέρχεται μέσω καταιονιστήρα ώστε να υπάρξει επιθυμητή διασπορά πριν έλθει σε επαφή με το θερμαινόμενο υπόστρωμα στο οποίο πραγματοποιείται χημική αντίδραση. Στο επόμενο σχήμα παρουσιάζεται ένα απλοποιημένο διάγραμμα της πειραματικής διάταξης.



Εικόνα 9. Πειραματική διάταξη λειτουργίας αντιδραστήρα.

Στον πίνακα που ακολουθεί παρατίθενται οι τιμές των παραμέτρων λειτουργίας του αντιδραστήρα οι οποίες θα χρησιμοποιηθούν για την προσομοίωσή του.

4 Προσομοίωση διεργασίας

Θερμοκρασία εισόδου (T _{in})	70 °C
Θερμοκρασία τοιχωμάτων (T _{wall})	20 °C
Θερμοκρασία αντίδρασης (T _{react})	430 °C
Πίεση λειτουργίας (P _{react})	20 Torr
Ροή εισόδου (0 ºC, 1 atm) (Q _{in})	25 sccm
Ταχύτητα εισόδου (υ _{in})	0.5168 m/s

Πίνακας 1. Παράμετροι λειτουργίας αντιδραστήρα.

Λόγω του κυλινδρικού σχήματος γίνεται η παραδοχή ότι υπάρχει συμμετρία ως προς τον κάθετο άξονα (στην ανάλυση που ακολουθεί χρησιμοποιείται ως κύριος κάθετος άξονας της ροής ο άξονας z) επομένως είναι αρκετό να προσομοιωθεί τμήμα μόνο του αντιδραστήρα όπως παρουσιάζεται στο επόμενο σχήμα.



Εικόνα 10. Γεωμετρία αντιδραστήρα χημικής απόθεσης από ατμό.
Ιδιαίτερη σημασία δίνεται στην περιοχή του αντιδραστήρα όπου είναι τοποθετημένος ο καταιονιστήρας και στη μοντελοποίηση του δίσκου καταιονισμού. Στη συνέχεια παρουσιάζονται φωτογραφίες και λεπτομέρειες για τη γεωμετρία του.



Εικόνα 11. Όψεις του καταιονιστήρα που χρησιμοποιείται στην πειραματική διάταξη.

Συνολικό ύψος	26 mm
Εξωτερική διάμετρος	44 mm
Εσωτερική διάμετρος	34 mm
Ύψος δίσκου καταιονισμού	2 mm
Πλήθος οπών στον δίσκο καταιονισμού	150
Διάμετρος κεφαλής βίδας στο κέντρο του δίσκου καταιονισμού	4 mm
Διάμετρος οπής	1 mm
Πλάτος τοιχώματος στη βάση του καταιονιστήρα	5 mm

Πίνακας 2. Λεπτομέρειες γεωμετρίας καταιονιστήρα.

4.2 Δημιουργία πλέγματος και συνοριακές συνθήκες

Για την προσομοίωση λειτουργίας του αντιδραστήρα θα χρησιμοποιηθεί διδιάστατο υπολογιστικό χωρίο, το οποίο έχει συνολικό ύψος 0.315m και συνολικό πλάτος 0.023m. Θεωρείται μοναδιαία διάσταση κατά τη διεύθυνση x. Στο επόμενο σχήμα παρουσιάζονται αναλυτικά οι διαστάσεις του χωρίου.



Εικόνα 12. Διαστάσεις υπολογιστικού χωρίου.

Όσον αφορά τον δίσκο καταιονισμού, για το πρώτο στάδιο της ανάλυσης που ακολουθεί (μελέτη ανεξαρτησίας), θα χρησιμοποιηθεί διατομή 7 οπών όπως φαίνεται στην επόμενη εικόνα.



Εικόνα 13. Δίσκος καταιονισμού. Το κόκκινο ευθύγραμμα τμήμα δείχνει την κατανομή 7 οπών.

Δεδομένων των διαστάσεων του Πίνακα 2, η απόσταση των οπών μεταξύ τους, για κατανομή 7 οπών, υπολογίζεται ότι είναι ίση με 1 mm.

Για τη διακριτοποίηση του υπολογιστικού χωρίου χρησιμοποιείται διδιάστατο τοπολογικά καρτεσιανό οριόδετο πλέγμα (BFC grid). Αρχικά το χωρίο χωρίζεται σε 30 υποπεριοχές (frames) στις οποίες θα εφαρμοστούν τα διάφορα τμήματα του αριθμητικού πλέγματος, όπως φαίνεται στην Εικ. 14.

Με τα γράμματα του λατινικού αλφαβήτου (Α έως Ι) συνοδευόμενα από κάποιον αριθμό συμβολίζονται τα σημεία στις γωνίες των υποπεριοχών ενώ με το γράμμα F και τον αντίστοιχο αριθμό (F1 ... 30) οι υποπεριοχές. (Για τον πλήρη καθορισμό του πλέγματος βλ. Παράρτημα A, Group 6 του αρχείου εισόδου (q1) του λογισμικού PHOENICS).



Εικόνα 14. Χωρισμός του υπολογιστικού χωρίου σε υποπεριοχές.

Στη συνέχεια παρατίθενται οι σχέσεις υπολογισμού των κελιών σε κάθε υποπεριοχή του χωρίου.

Πλήθος κελιών στη διεύθυνση Χ:

NX = 1

Πλήθος κελιών στη διεύθυνση Υ:

NYSCR = 4*F + 1NYSP = 2*F + 1NYHO = 2*F + 1NY3 = NYSCR + NSP*NYSP + NHO*NYHO NY4 = 8*F + 1NY5 = NYSCR + 6*NYSP + 6*NYHO

```
NY6 = NYSCR + 7*NYSP + 7*NYHO
NY7 = NYSCR + 2*NYSP + NYHO
NYREST = 2*F
NY = NY3 + NY4 + NYREST
Πλήθος κελιών στη διεύθυνση Ζ:
NZ1 = 70*F + 1
NZ2 = 16*F + 1
NZ3 = 14*F + 1
NZ4 = 4*F + 1
NZ5 = 4*F
NZ6 = 60*F + 1
NZ7 = 40*F + 1
NZ8 = 300*F + 1
NZ = NZ1 + NZ2 + NZ3 + NZ4 + NZ5 + NZ6 + NZ7 + NZ8
Όπου:
        F: παράγοντας πύκνωσης πλέγματος
        NYSCR: πλήθος κελιών για την κεφαλή της βίδας στο κέντρο του δίσκου καταιο-
                νισμού
        ΝΗΟ: αριθμός οπών
        ΝΥΗΟ: πλήθος κελιών για μία οπή
        NSP: αριθμός διαστημάτων μεταξύ των οπών
        NYSP: πλήθος κελιών για κάθε διάστημα
        ΝΥ: συνολικός αριθμός κελιών στη διεύθυνση Υ
        ΝΖ: συνολικός αριθμός κελιών στη διεύθυνση Ζ
```

Στο επόμενο σχήμα γίνεται αντιστοίχιση των ανωτέρω μεταβλητών στις υποπεριοχές τους.



Εικόνα 15. Πλήθος κελιών στις υποπεριοχές του χωρίου.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται μεγεθυμένα τμήματα για το σχετικά αραιό πλέγμα με συνολικά κελιά NY×NZ = 61×515.



Εικόνα 16. Λεπτομέρειες πλέγματος NY×NZ = 61×515: α) Στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης, β) Κοντά στο δίσκο καταιονισμού.

Οι συνοριακές συνθήκες που χρησιμοποιούνται είναι οι εξής:

- Στην είσοδο, η κατανομή της ταχύτητας θεωρείται ομοιόμορφη και ίση με w = v_{in} = 0.5168 $\frac{m}{s}$. Το αέριο εισέρχεται στον αντιδραστήρα με σταθερή θερμοκρασία T_{in} = 70 °C. Για την επίλυση του υδροδυναμικού προβλήματος θεωρείται ότι στον αντιδραστήρα εισέρχεται μόνο αδρανές αέριο (N₂) με ροή 25 sccm.
- Στην έξοδο, θεωρείται ότι το αέριο μίγμα ρέει σε περιβάλλον χαμηλής πίεσης ή οποία καθορίζει την τιμή της πίεσης λειτουργίας (P_{react} = 20 Torr).
- Στον άξονα συμμετρίας, εφαρμόζεται μηδενική κλίση για όλες τις εξαρτώμενες μεταβλητές $\frac{\partial \varphi}{\partial v} = 0.$
- Σε κάθε στερεή επιφάνεια εφαρμόζεται η συνθήκη μη ολίσθησης για την ταχύτητα του αερίου.
- Τα εξωτερικά τοιχώματα του αντιδραστήρα διατηρούνται ψυχρά (T_{wall} = 20°C).
- Τα τοιχώματα του καταιονιστήρα θεωρούνται αδιαβατικά.

4.3 Μελέτη ανεξαρτησίας επίλυσης από πύκνωση του πλέγματος

Στην ενότητα αυτή πραγματοποιείται επίλυση του υδροδυναμικού προβλήματος (ροή αδρανούς αερίου N₂) για διαφορετικές τιμές συνολικού πλήθους κελιών με σκοπό να βρεθεί κατάλληλη πύκνωση πλέγματος περαιτέρω αύξηση της οποίας δεν θα επιφέρει σημαντικές μεταβολές στα αποτελέσματα της αριθμητικής επίλυσης.

Όλοι οι υπολογισμοί στην εργασία αυτή πραγματοποιήθηκαν σε υπολογιστικό σύστημα με 1 CPU, 2.4 GHz, 8 GB συνολικής μνήμης και λειτουργικό σύστημα Linux.

Παρά το γεγονός ότι στο στάδιο αυτό δεν λαμβάνεται υπ' όψιν χημική αντίδραση, έχει προστεθεί θερμαινόμενο υπόστρωμα ώστε να είναι αντιπροσωπευτική η κίνηση του ρευστού εντός του αντιδραστήρα. Η σύγκριση μεταξύ των επιλύσεων γίνεται συγκρίνοντας τις τιμές των συνιστωσών της ταχύτητας (v, w) και της θερμοκρασίας (T) σε συγκεκριμένα σημεία του χωρίου.



Εικόνα 17. Θέσεις του χωρίου στις οποίες ελέγχονται οι μεταβλητές για τη μελέτη ανεξαρτησίας.

Στη συνέχεια παρατίθενται συγκριτικά διαγράμματα για τις μεταβλητές. Η ανάλυση επικεντρώνεται στο χώρο του αντιδραστήρα γύρω από την περιοχή πραγματοποίησης της χημικής αντίδρασης. Η μικρογραφία του αντιδραστήρα δεξιά από κάθε γραφική παράσταση είναι ένα εποπτικό βοήθημα με την κόκκινη γραμμή να υποδηλώνει τα σημεία του χωρίου στα οποία αντιστοιχούν οι τιμές των μεταβλητών στις καμπύλες των γραφημάτων.

Συνιστώσα της ταχύτητας στον άξονα y (v)

Αρχικά ελέγχονται οι τιμές της συνιστώσας ν
 της ταχύτητας κατά μήκος των ευθυγράμμων τμημάτων με y = 0.0095m, y = 0.0195m, z = 0.119m και z = 0.134m.



Εικόνα 18 Κατανομή συνιστώσας ν της ταχύτητας για y = 0.0095m.



Εικόνα 19 Κατανομή συνιστώσας ν της ταχύτητας για y = 0.0195m.



Εικόνα 20 Κατανομή συνιστώσας
ν της ταχύτητας για z = 0.119m.



Εικόνα 21 Κατανομή συνιστώσας
ν της ταχύτητας για z = 0.134m.

Συνιστώσα της ταχύτητας στον άξονα z (w)

Στη συνέχεια ελέγχεται η συνιστώσα w της ταχύτητας στις ίδιες θέσεις.



Εικόνα 22 Κατανομή συνιστώσας w της ταχύτητας για y = 0.0095m.



Εικόνα 23 Κατανομή συνιστώσας w της ταχύτητας για y = 0.0195m.



Εικόνα 24 Κατανομή συνιστώσας w της ταχύτητας για z = 0.119m.



Εικόνα 25 Κατανομή συνιστώσας w της ταχύτητας για z = 0.134m.

Θερμοκρασία

Τέλος, εξετάζεται η κατανομή της θερμοκρασίας στις προαναφερθείσες θέσεις.











Εικόνα 28 Κατανομή θερμοκρασίας για z = 0.119m.



Εικόνα 29 Κατανομή θερμοκρασίας για z = 0.134m του χωρίου.

Έπειτα παρατίθεται συγκριτικός πίνακας με τις τιμές των μεταβλητών και τις ποσοστιαίες διαφορές τους, στα σημεία όπου παρατηρούνται οι μεγαλύτερες αποκλίσεις, για τα δύο πυκνότερα πλέγματα 149×1525 και 217×1973.

Μεταβλητές	Τιμή μεταβλητής στο Πλέγμα NY×NZ = 149×1525	Τιμή μεταβλητής στο Πλέγμα NY×NZ = 217×1973	Μεταβολή
$V_{y=0.0095m, z=0.127m}$	0.0290 m/s	0.0292 m/s	0.74%
$V_{y=0.0195m, z=0.131m}$	0.0341 m/s	0.0345 m/s	1.22%
V _{y=0.013m} , z=0.119m	0.0268 m/s	0.0271 m/s	1.25%
V _{y=0.015m} , z=0.134m	0.0066 m/s	0.0064 m/s	-2.04%
W _{y=0.0095m} , z=0.102m	0.1624 m/s	0.1648 m/s	1.54%
W _{y=0.0195m} , z=0.135m	0.1762 m/s	0.1770 m/s	0.45%
W _{y=0.001m} , z=0.119m	0.0200 m/s	0.0204 m/s	2.14%
W _{y=0.0193m} , z=0.134m	0.1756 m/s	0.1764 m/s	0.49%
$T_{y=0.0095m, z=0.130m}$	596.84 K	596.90 K	0.01%
$T_{y=0.0195m, z=0.129m}$	369.07 K	369.15 K	0.02%
$T_{y=0.001m, z=0.119m}$	479.86 K	479.75 K	-0.23%
$T_{y=0.0158m, z=0.134m}$	311.72 K	311.59 K	-0.04%

Πίνακας 3. Υπολογισμός μέγιστων ποσοστιαίων μεταβολών των μεταβλητών μεταξύ των δύο πυκνότε-
ρων πλεγμάτων.

Η υψηλότερη μεταβολή παρατηρείται για τη συνιστώσα w της ταχύτητας (2.14%) στο σημείο (y = 0.001m, z = 0.119m) το οποίο βρίσκεται στο μέσο της κάθετης απόστασης μεταξύ του καταιονιστήρα και του υποστρώματος και κοντά στον άξονα συμμετρίας. Η μεταβολή αυτή θεωρείται αποδεκτή, επομένως για την ανάλυση που ακολουθεί χρησιμοποιείται το πλέγμα NY×NZ = 217×1973. Εκτός από την ανεξαρτησία πλέγματος έχει πραγματοποιηθεί βελτιστοποίηση (μέσω τριών δοκιμών) του ύψους της πρώτης πλεγματικής γραμμής πάνω από την επιφάνεια απόθεσης.

Για την προσομοίωση με το πλέγμα NY×NZ = 217×1973 χρησιμοποιήθηκαν 40000 επαναλήψεις και απαιτήθηκε χρόνος CPU ίσος με 117.6 hr. Η τιμή του ολικού ισοζυγίου μετά τη σύγκλιση ήταν $-1.31 \cdot 10^{-8}$. Για τις μεταβλητές χρησιμοποιήθηκαν οι ακόλουθοι συντελεστές υποχαλάρωσης.

Πίνακας 4. Συντελεστές υποχαλάρωσης για τις μεταβλητές κατά την επίλυση του υδροδυναμικού προ-
βλήματος χρησιμοποιώντας πλέγμα NY×NZ = 217×1973.

Μεταβλητή	Μέθοδος υποχαλάρωσης	Συντελεστής υποχαλάρωσης
Πίεση	Γραμμική	0.5
Συνιστώσα ταχύτητας ν	Ψευδούς χρ. βήματος	0.2
Συνιστώσα ταχύτητας w	Ψευδούς χρ. βήματος	0.2
Θερμοκρασία	Γραμμική	0.5

Στη συνέχεια παρατίθενται, αποτελέσματα της προσομοίωσης, όπως προέκυψαν από το εργαλείο γραφικής αναπαράστασης PHOTON του λογισμικού PHOENICS.



Εικόνα 30. Λεπτομέρειες πλέγματος NY×NZ = 217×1973: (α) Στην περιοχή του καταιονιστήρα, (β) Στον δίσκο καταιονισμού.



Εικόνα 31. Διανύσματα ταχύτητας για την περιοχή εσωτερικά του καταιονιστήρα και πάνω από την περιοχή απόθεσης επιλύοντας στο πλέγμα NY×NZ = 217×1973.

4 Προσομοίωση διεργασίας



Εικόνα 32. Διανύσματα ταχύτητας (α) στον δίσκο καταιονισμού, (β) στην περιοχή απόθεσης, επιλύοντας στο πλέγμα NY×NZ = 217×1973.

Από τις κατανομές των ταχυτήτων γίνεται φανερή η επίδραση στη ροή της συνθήκης μη ολίσθησης που εφαρμόστηκε στα τοιχώματα. Λόγω της αυξημένης πύκνωσης κάθε οπή του δίσκου καταιονισμού έχει 11 κελιά στη διεύθυνση y γεγονός που επιτρέπει τη λεπτομερή μελέτη της ροής διαμέσου και γύρω από τον δίσκο. Επιπλέον δεν παρατηρούνται στροβιλισμοί του ρευστού εντός του αντιδραστήρα.



Εικόνα 33. Κατανομές συνιστωσών (α) ν, και, (β) w της ταχύτητας στο εσωτερικό του αντιδραστήρα επιλύοντας στο πλέγμα NY×NZ = 217×1973

Τέλος, παρουσιάζονται ροϊκές γραμμές, για τις οποίες ισχύει $\mathbf{v} \times \mathbf{ds} = \mathbf{0}$, στην περιοχή κάτω από τον δίσκο καταιονισμού και πάνω από την περιοχή απόθεσης.



Εικόνα 34. Ροϊκές γραμμές εντός του αντιδραστήρα κοντά στον δίσκο καταιονισμού και πάνω από την επιφάνεια απόθεσης.

4.4 Μείωση ύψους αντιδραστήρα κατά τις προσομοιώσεις

Στοχεύοντας στην εξοικονόμηση υπολογιστικών πόρων γίνεται προσπάθεια να μειωθεί το ύψος του τμήματος του αντιδραστήρα κάτω από τον υποδοχέα (susceptor) (LZ8) το οποίο αρχικά έχει τιμή 0.162m (Eικ. 12). Η μείωση αυτή θα επιτρέψει τη χρήση λιγότερων κελιών για το συγκεκριμένο τμήμα του υπολογιστικού χωρίου. Πραγματοποιούνται προσομοιώσεις για διαδοχική μείωση του ύψους LZ8 κατά 1/2 και 1/4 χρησιμοποιώντας 40000 επαναλήψεις σε κάθε προσομοίωση. Με ανάλογο τρόπο μειώνεται και το πλήθος των κελιών στη συγκεκριμένη υποπεριοχή.

Πίνακας 5. Σύγκριση χρόνου και ακρίβειας εκτέλεσης υπολογισμών μετά από μείωση του ύψους του αντιδραστήρα.

LZ8 Συνολιι αντιδρ		Πλήθος κελιών	Χρόνος εκτέ-	Εκτίμηση ακρί-
	Δυνολικό υψος	πλέγματος	λεσης υπολο-	βειας (τιμή ολικού
	ανποραστηρα	(NY×NZ)	γισμών	ισοζυγίου)
0.162 m	0.315 m	217×1973 = 428141	117.58 hr	-1.31 · 10 ⁻⁸
0.081 m	0.234 m	217×1369 = 297073	75.60 hr	-1.83 · 10 ⁻⁸
0.0405 m	0.1935 m	217×1065 = 231105	57.75 hr	-1.10 · 10 ⁻⁸

Επειδή η ανάλυση θα επικεντρωθεί κοντά στο θερμαινόμενο υπόστρωμα (χώρος πραγματοποίησης αντίδρασης), ελέγχεται η κατανομή τιμών των μεταβλητών γύρω από την περιοχή απόθεσης ώστε να εξακριβωθεί πώς επιδρά η μείωση του ύψους στην ποιότητα των αποτελεσμάτων. Στο στάδιο αυτό δεν έχει προστεθεί χημική αντίδραση στην προσομοίωση, οπότε οι μεταβλητές που εξετάζονται είναι οι δύο συνιστώσες της ταχύτητας (v, w) οι οποίες εμφανίζουν υψηλότερες αποκλίσεις σε σχέση με την θερμοκρασία. Στη συνέχεια παρατίθενται συγκριτικές καμπύλες για τις περιοχές του αντιδραστήρα όπου εμφανίζονται οι αποκλίσεις αυτές. Θα επιλεγεί, τελικά, το ύψος εκείνο του αντιδραστήρα που δεν θα επιφέρει αλλαγές μεγαλύτερες από 1% σε σχέση με το αρχικό ύψος.







Εικόνα 36. Σύγκριση τιμών ταχύτητας ν για τα τρία ύψη αντιδραστήρα για z=0.119m.



Εικόνα 37. Σύγκριση τιμών ταχύτητας w για τα τρία ύψη αντιδραστήρα για y=0.0095m.



Εικόνα 38. Σύγκριση τιμών ταχύτητας w για τα τρία ύψη αντιδραστήρα για z=0.119m.

Μεταβλητές	Τιμή μεταβλητής για ύψος αντιδραστήρα 0.315m	Τιμή μεταβλητής για ύψος αντιδραστήρα 0.193m	Μεταβολή
V _{y=0.0095} m, z=0.127m	0.02922 m/s	0.02915 m/s	-0.25%
V _{y=0.013} m, z=0.119m	0.02712 m/s	0.02711 m/s	-0.05%
W _{y=0.0095m} , z=0.102m	0.1649 m/s	0.1648 m/s	-0.01%
W _{y=0.001m} , z=0.119m	0.07502 m/s	0.07503 m/s	0.01%

Πίνακας 6. Υπολογισμός μέγιστων ποσοστιαίων μεταβολών για τις τιμές των συνιστωσών της ταχύτητας μεταξύ των υψών του αντιδραστήρα 0.315m και 0.193m.

Η υψηλότερη παρατηρούμενη μεταβολή μεταξύ των ακραίων τιμών για τα ύψη του αντιδραστήρα είναι -0.25% η οποία θεωρείται αποδεκτή. Επομένως, στις ενότητες που ακολουθούν θα χρησιμοποιείται ύψος αντιδραστήρα ίσο με 0,193m και αριθμητικό πλέγμα με συνολικό αριθμό κελιών NY×NZ = 217×1065 = 231105.

Ακολουθούν σχήματα κατανομής ταχυτήτων ν και w για τα τρία ύψη αντιδραστήρα.



Εικόνα 39. Κατανομή της συνιστώσας
ν της ταχύτητας για τα διαφορετικά ύψη αντιδραστήρα:
α. 0.315m, β. 0.234m, γ. 0.1935m.



Εικόνα 40. Κατανομή της συνιστώσας w της ταχύτητας για τα διαφορετικά ύψη αντιδραστήρα: α. 0.315m, β. 0.234m, γ. 0.1935m.

4.5 Μελέτη χημικής απόθεσης βολφραμίου

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζονται αποτελέσματα προσομοίωσης χρησιμοποιώντας χημική αντίδραση για την απόθεση στερεού υμενίου βολφραμίου (W) από διάσπαση ατμών εξαφθοριούχου βολφραμίου (WF₆) επάνω σε θερμαινόμενο υπόστρωμα.

Οι παράμετροι λειτουργίας του αντιδραστήρα περιγράφονται στον επόμενο πίνακα.

Θερμοκρασία εισόδου (T _{in})	70 °C
Θερμοκρασία τοιχωμάτων (T _{wall})	20 °C
Θερμοκρασία αντίδρασης (Treact)	430 °C
Πίεση λειτουργίας (P _{react})	20 Torr
Ροή εισόδου (0 ºC, 1 atm) (Q _{in})	25 sccm
Ταχύτητα εισόδου (υ _{in})	0.5168 m/s

Πίνακας 7. Παράμετροι λειτουργίας αντιδραστήρα κατά τη μελέτη χημικής απόθεσης βολφραμίου.

Το αέριο μίγμα εισόδου αποτελείται από τα αέρια WF_6 και H_2 ενώ ως φέρον αέριο χρησιμοποιείται το Ar. Για τα χημικά είδη ισχύουν τα ακόλουθα.

Πίνακας 8 Αςδομένα για τα	vouvà ciôn	στην είσοδο του	ωπιδοαστήρα
πινακάς ο. Δεύομενα για τα	χημικά είση	0111 210000 100	av nopuo npu.

Χημικό είδος	Μοριακό βάρος (Mi) [kg/mol]	Ογκομετρική ροή στην είσοδο (Q _{i,in}) [sccm]	Κλάσμα mole στην είσοδο (x _{i,in})	Κλάσμα μάζας στην είσοδο (ω _{i,in})
Ar	39.948 · 10 ⁻³	2	0.08	0.1113
WF ₆	297.83 · 10 ⁻³	2	0.08	0.8297
H ₂	2.016 · 10 ⁻³	21	0.84	0.0590
HF	20.01 · 10 ⁻³	0	0.00	0.0000

Το μέσο μοριακό βάρος του μίγματος στην είσοδο είναι:

$$M_{mix,in} = \sum x_{i,in} M_i = 0.0287 \frac{kg}{mol}$$

και η πυκνότητα του μίγματος στην είσοδο, μέσω του νόμου των τελείων αερίων: pmix,in = 0.027 kg/m³

$$\rho_{\text{mix,in}} = \frac{P_{\text{react}} M_{\text{mix,in}}}{R T_{\text{in}}} = 0.027 \frac{kg}{m^3}$$

Για τις προσομοιώσεις που ακολουθούν χρησιμοποιείται το αριθμητικό πλέγμα (NY×NZ = 217×1065) όπως προέκυψε από την ανάλυση που προηγήθηκε.

Ο επόμενος πίνακας περιέχει τις τιμές συντελεστών υποχαλάρωσης των μεταβλητών που επιλύονται για τις προσομοιώσεις που ακολουθούν.

Μεταβλητή	Μέθοδος υποχαλάρωσης	Συντελεστής υποχαλάρωσης
Πίεση	Γραμμική	0.5
Συνιστώσα ταχύτητας ν	Ψευδούς χρ. βήματος	0.2
Συνιστώσα ταχύτητας w	Ψευδούς χρ. βήματος	0.2
Θερμοκρασία	Γραμμική	0.5
Ar	Ψευδούς χρ. Βήματος	100
WF ₆	Ψευδούς χρ. Βήματος	100
H ₂	Ψευδούς χρ. βήματος	100
HF	Ψευδούς χρ. βήματος	100

Πίνακας 9. Συντελεστές υποχαλάρωσης για τις μεταβλητές που επιλύονται κατά την προσομοίωση της διεργασίας με χημική αντίδραση για την περίπτωση δύο διατομών του δίσκου καταιονισμού.

4.5.1 Αποτελέσματα για δύο κατανομές οπών του δίσκου καταιονισμού

Για την καλύτερη περιγραφή της ροής διαμέσου του δίσκου καταιονισμού επιλέγεται να γίνουν δύο προσομοιώσεις για δύο διατομές οπών κάθετες μεταξύ τους. Κάθε διατομή περιλαμβάνει τη μισή κεφαλή της βίδας στο κέντρο του καταιονιστήρα, συγκεκριμένο αριθμό οπών και το περιμετρικό τοίχωμα στα άκρα του καταιονιστήρα. Η πρώτη διατομή περιλαμβάνει επτά και η δεύτερη τέσσερις οπές.



Διατομή Α (7 οπές)

Εικόνα 41. Επιλογή δύο κατανομών (Α: 7 οπές, Β: 4 οπές) για τον δίσκο καταιονισμού.

Συνολικό ὑψος	26 mm	
Εξωτερική διάμετρος	44 mm	
Εσωτερική διάμετρος	34 mm	
Ύψος δίσκου καταιονισμού	2 mm	
Διάμετρος κεφαλής βίδας στο κέντρο του	ς στο κέντρο του ου καταιονισμού 4 mm	
δίσκου καταιονισμού		
Διάμετρος οπής	1 mm	
Πλάτος τοιχώματος στη βάση του	5 mm	
καταιονιστήρα		
Απόσταση μεταξύ των οπών για διατομή Α	ον οπών για διατομή Α (7 οπές)	
(7 οπἑς)		
Απόσταση μεταξύ των οπών για διατομή Β	2.2 mm	
(4 οπἑς)	2,2 IIIII	

Πίνακας 10. Λεπτομέρειες γεωμετρίας καταιονιστήρα για διατομές 7 και 4 οπών του δίσκου καταιονισμού.

Στη συνέχεια παρατίθενται αποτελέσματα προσομοίωσης για τις δύο περιπτώσεις κατανομής οπών στον δίσκο καταιονισμού. Ο απαιτούμενος χρόνος υπολογισμού CPU ήταν περίπου 131 hr για κάθε μία προσομοίωση.



Εικόνα 42. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας εντός του αντιδραστήρα για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού.

Στα ανωτέρω σχήματα είναι φανερή η πλήρης ανάπτυξη της ροής μετά την είσοδο του αερίου μίγματος στον αντιδραστήρα.



Εικόνα 43. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού.



Εικόνα 44. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας στον δίσκο καταιονισμού διατομή 7 οπών του δίσκου καταιονισμού για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών.

Οι κατανομές των ταχυτήτων είναι παρόμοιες για τις δύο περιπτώσεις με τις μεγαλύτερες διαφορές να παρατηρούνται στον δίσκο καταιονισμού. Λόγω του περιορισμού της ροής στην κατανομή με τις 4 οπές η ταχύτητα του ρευστού μέσω των οπών είναι σχεδόν διπλάσια. Για την περίπτωση των 7 οπών η υψηλότερη ταχύτητα που παρατηρείται διαμέσου του δίσκου καταιονισμού είναι 0.44 m/s, ενώ για τις 4 οπές η τιμή αυτή είναι 0.76 m/s.

Στη συνέχεια παρατίθενται κατανομές της θερμοκρασίας εντός του αντιδραστήρα.

4 Προσομοίωση διεργασίας



Εικόνα 45. Κατανομές τιμών θερμοκρασίας [Κ] στο εσωτερικό του αντιδραστήρα για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού.



Εικόνα 46. Κατανομές τιμών θερμοκρασίας [Κ] στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού.

Το αέριο μίγμα εισέρχεται στον αντιδραστήρα με θερμοκρασία 70°C και κατερχόμενο θερμαίνεται. Εντός του καταιονιστήρα έχει θερμοκρασία περίπου 114°C και αφού διέλθει μέσω του δίσκου καταιονισμού κατευθύνεται προς το θερμαινόμενο υπόστρωμα το οποίο βρίσκεται σε θερμοκρασία 430°C. Εξετάζοντας τις ισοϋψείς καμπύλες της θερμοκρασίας δεν παρατηρούνται μεγάλες διαφορές για τις δύο περιπτώσεις που εξετάζονται.

Έπειτα παρουσιάζονται κατανομές των τιμών για την πυκνότητα του ρευστού και για τα κλάσματα mole των χημικών ειδών.



Εικόνα 47. Κατανομές τιμών πυκνότητας μίγματος [kg/m³] στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού.

4 Προσομοίωση διεργασίας



Εικόνα 48. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο αντιδρών WF₆ για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού.



Εικόνα 49. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο αντιδρών H₂ για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού.

4 Προσομοίωση διεργασίας



Εικόνα 50. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο προϊόν ΗF για διατομές (α) 7 οπών, (β) 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού.

Από τις κατανομές των κλασμάτων των χημικών ειδών φαίνεται η κατανάλωση των αντιδρώντων WF_6 και H_2 και η παραγωγή του αέριου HF στην περιοχή απόθεσης.

Τέλος, παρατίθεται ο εκτιμώμενος ρυθμός απόθεσης βολφραμίου στο υπόστρωμα.



Εικόνα 51. Κατανομή ρυθμού απόθεσης επάνω στο υπόστρωμα για διατομές 7 και 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού.

Ο ρυθμός απόθεσης κυμαίνεται στο εύρος 3507-3523 Å/min και για τις δύο περιπτώσεις. Προκύπτει επομένως το συμπέρασμα ότι η χρήση της μίας κατανομής οπών έναντι της άλλης δεν οδηγεί σε διαφορετική ροή του αέριου αντιδρώντος μίγματος επάνω στο υπόστρωμα πριν την πραγματοποίηση της αντίδρασης γεγονός που θα έδινε διαφορετικούς ρυθμούς απόθεσης. Φαίνεται, δηλαδή, ότι η κατακόρυφη απόσταση μεταξύ του καταιονιστήρα και του υποστρώματος (30 mm) είναι αρκετή ώστε να εξαλειφθούν οι όποιες διαταράξεις της ροής είχαν δημιουργηθεί τοπικά στον δίσκο καταιονισμού.

4.5.2 Αποτελέσματα για κατανομή 7 οπών του δίσκου καταιονισμού και ψυχρά τοιχώματα καταιονιστήρα

Στην ενότητα αυτή γίνεται χρήση συγκεκριμένης τιμής θερμοκρασίας για τα τοιχώματα του καταιονιστήρα. Επιβάλλεται συνοριακή συνθήκη τύπου Dirichlet (αντί Neumann) με τιμή θερμοκρασίας $T_{sh,wall} = T_{wall} = 20^{\circ}$ C, ώστε τα τοιχώματα του καταιονιστήρα να θεωρούνται ψυχρά. Οι λοιπές συνθήκες λειτουργίας παραμένουν αμετάβλητες (Πίνακες 7, 8) όπως και οι χρησιμοποιούμενοι συντελεστές υποχαλάρωσης (Πίν. 9). Για τον δίσκο καταιονισμού χρησιμοποιείται η κατανομή 7 οπών με τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά που περιγράφονται στον Πίνακα 10.

Για την περίπτωση των ψυχρών τοιχωμάτων καταιονιστήρα απαιτήθηκε υπολογισμού CPU ίσος με 131hr και 30000 επαναλήψεις της επαναληπτικής διαδικασίας επίλυσης.

Στα σχήματα που ακολουθούν παρατίθενται τα αποτελέσματα για ψυχρά τοιχώματα καταιονιστήρα μαζί με τα αντίστοιχα για αδιαβατικά τοιχώματα για λόγους σύγκρισης. Αρχικά παρουσιάζονται οι κατανομές των διανυσμάτων της ταχύτητας του ρευστού εντός του αντιδραστήρα.



Εικόνα 52. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας εντός του αντιδραστήρα για διατομή 7 οπών στον δίσκο καταιονισμού και (α) αδιαβατικά, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα.



Εικόνα 53. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας θερμοκρασίας στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης για διατομή 7 οπών στον δίσκο καταιονισμού και (α) αδιαβατικά, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα.



Εικόνα 54. Κατανομές διανυσμάτων ταχύτητας στην διατομή 7 οπών του δίσκου καταιονισμού και (α) αδιαβατικά, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα.

Από τις κατανομές της ταχύτητας γίνονται φανερά τα εξής. Καταρχάς, η ροή πριν φτάσει στον καταιονιστήρα είναι πλήρως ανεπτυγμένη και σε όλα τα τοιχώματα τηρείται η συνθήκη μη ολίσθησης κάτι το οποίο γίνεται ιδιαίτερα φανερό στις οπές του δίσκου καταιονισμού. Για την περίπτωση των ψυχρών τοιχωμάτων του καταιονιστήρα παρατηρείται επιβράδυνση της ροής του ρευστού. Χαρακτηριστικά αναφέρεται ότι η μέγιστη ταχύτητα διέλευσης διαμέσου των οπών στην περίπτωση αυτή είναι περίπου 0.32 m/s ενώ για την περί πτωση των αδιαβατικών τοιχωμάτων η τιμή είναι περίπου 0.44 m/s. Επιπλέον δεν παρατηρείται στροβιλισμός του ρευστού σε κάποιο σημείο του αντιδραστήρα.

4 Προσομοίωση διεργασίας



Εικόνα 55. Κατανομές τιμών θερμοκρασίας στην περιοχή του καταιονιστήρα και στην περιοχή απόθεσης για διατομή 7 οπών στον δίσκο καταιονισμού και (α) αδιαβατικά, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα.

Από τις κατανομές της θερμοκρασίας διαφαίνεται ο περιορισμός των υψηλών θερμοκρασιών στην περιοχή κάτω από τον καταιονιστήρα για την περίπτωση ψυχρών τοιχωμάτων. Στην περίπτωση αυτή το προθερμασμένο αέριο μίγμα εισόδου ψύχεται σταδιακά έως ότου αποκτήσει θερμοκρασία ίση με T_{wall} = 20°C.

Στη συνέχεια παρατίθενται κατανομές για την πυκνότητα του μίγματος αερίων και για τα κλάσματα mole των χημικών ειδών κατά μήκος του αντιδραστήρα.



Εικόνα 56. Κατανομές τιμών πυκνότητας μίγματος [kg/m³] για (α) αδιαβατικά, και, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα.

Από τις Εικ. 55β και 56β φαίνεται ότι η χαμηλότερη θερμοκρασία οδηγεί σε τοπική αύξηση της πυκνότητας του ρευστού εντός του καταιονιστήρα, γεγονός που εξηγεί τις χαμηλότερες ταχύτητες της Εικ. 54β.



Εικόνα 57. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο αντιδρών WF₆ για (α) αδιαβατικά, και, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα.



Εικόνα 58. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο αντιδρών Η2 για (α) αδιαβατικά, και, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα.

4 Προσομοίωση διεργασίας



Εικόνα 59. Κατανομές κλάσματος μάζας για το αέριο προϊόν ΗF για (α) αδιαβατικά, και, (β) ψυχρά, τοιχώματα καταιονιστήρα.

Για τις κατανομές κλασμάτων των χημικών ειδών δεν παρατηρούνται μεγάλες διαφορές για τις δύο μελετώμενες περιπτώσεις.

Τέλος, παρατίθεται η κατανομή του ρυθμού απόθεσης πάνω στο θερμαινόμενο υπόστρωμα για τις δύο περιπτώσεις.



Εικόνα 60. Κατανομή ρυθμού απόθεσης επάνω στο υπόστρωμα για αδιαβατικά και ψυχρά τοιχώματα καταιονιστήρα.

Παρατηρείται ότι οι κατανομές του ρυθμού απόθεσης για τις δύο περιπτώσεις θερμοκρασίας τοιχωμάτων καταιονιστήρα είναι παρόμοιες. Επομένως, η χρήση ψυχρών τοιχωμάτων για τον καταιονιστήρα δεν επιφέρει μεγάλη μεταβολή στην απόθεση βολφραμίου, παρά το γεγονός ότι είχε επέλθει μείωση της ταχύτητας του ρευστού διαμέσου του καταιονιστήρα.

5 Συμπεράσματα

Στην εργασία αυτή έγινε επιτυχής προσομοίωση, μέσω του υπολογιστικού εργαλείου PHOENICS, ενός κατακόρυφου αντιδραστήρα χημικής απόθεσης από ατμό με ψυχρά τοιχώματα σε συνθήκες χαμηλής πίεσης. Η ιδιαιτερότητα της περίπτωσης αυτής είναι ότι περιλαμβάνει καταιονιστήρα για την επίτευξη ομοιόμορφης διασποράς του αερίου αντιδρώντος μίγματος πριν αυτό έλθει σε επαφή με το θερμαινόμενο υπόστρωμα στο οποίο πραγματοποιείται η χημική αντίδραση.

Για τη μελέτη της διεργασίας χρησιμοποιήθηκε δισδιάστατο υπολογιστικό χωρίο. Είναι εξαρχής βέβαιο όμως ότι για την πληρότητα της ανάλυσης θα απαιτείτο η χρήση τρισδιάστατου πλέγματος. Για την καλύτερη περιγραφή των φαινομένων ροής χρησιμοποιήθηκαν δύο διατομές (με 7 και 4 οπές) του δίσκου καταιονισμού. Τα αποτελέσματα εμφανίζουν παρόμοια προφίλ ταχυτήτων εντός του αντιδραστήρα με την κυριότερη διαφορά να παρατηρείται στη μέγιστη ταχύτητα διέλευσης του ρευστού διαμέσου του δίσκου καταιονισμού η οποία για την περίπτωση των 4 οπών ήταν σχεδόν διπλάσια από την αντίστοιχη για τις 7 οπές. Η κατανομή του ρυθμού απόθεσης, τέλος, δεν εμφάνισε διαφορές για τις δύο περιπτώσεις.

Επιπλέον, μελετήθηκε η χρήση ψυχρών τοιχωμάτων για τον καταιονιστήρα. Λόγω της ψύξης του ρεύματος εισόδου μειώνεται η πυκνότητα του ρευστού και επέρχεται μείωση της ταχύτητας του στην περιοχή του καταιονιστήρα. Η κατανομή του ρυθμού απόθεσης δεν εμφανίζει σημαντικές διαφορές σε σχέση με τα αδιαβατικά τοιχώματα καταιονιστήρα.

Ως μελλοντική μελέτη και επέκταση της υπάρχουσας εργασίας θα μπορούσαν να εξεταστούν τα ακόλουθα θέματα:

- Επαλήθευση αποτελεσμάτων προσομοίωσης μέσω πειραματικών μετρήσεων.
- Μεταβολή της διαμέτρου των οπών και εξέταση της επίδρασης στο ρυθμό απόθεσης του προϊόντος στο υπόστρωμα.
- Μεταβολή της κατακόρυφης απόστασης μεταξύ του δίσκου καταιονισμού και του υποστρώματος.
- Πραγματοποίηση προσομοιώσεων για διαφορετικές τιμές παραμέτρων λειτουργίας (θερμοκρασία αντίδρασης, πίεση λειτουργίας, ροή ρευστού στην είσοδο κ.α.) και σύγκριση αποτελεσμάτων με αντίστοιχα πειραματικά.
- Χρήση τρισδιάστατου πλέγματος για το υπολογιστικό χωρίο.

6 Βιβλιογραφία

- 1. Fogler H. Scott, Μηχανική χημικών αντιδράσεων και σχεδιασμός αντιδραστήρων, 4^η έκδοση, Εκδόσεις Τζιόλα, 2009, σ. 900-904.
- 2. Freund L. B.; Suresh S., Thin Film Materials: Stress, Defect Formation and Surface Evolution, Cambridge University Press, 2006, pp. 9-10.
- 3. Jones A. C.; Hitchman M. L., Chemical Vapour Deposition: Precursors, Processes and Applications, Royal Society of Chemistry Publishing, 2008, ch. 1.
- 4. Kee R. J.; Rupley F. M.; Miller J. A., The CHEMKIN thermodynamic database. Sandia National Laboratories Technical Report, 1987, SAND87-8215.
- 5. Kleijn C. R.; Werner C., Modeling of Chemical Vapor Deposition of Tungsten Films, Springer Basel AG, 1993,
- 6. Luo G.; Vanka S. P.; Glumac N., Fluid flow and transport processes in a large area atmospheric pressure stagnation flow CVD reactor for deposition of thin films, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 47, Issue 23, November 2004, pp. 4979-4994.
- 7. Park J. H., Mathematical Modeling for Chemical Vapor Deposition in a Single-Wafer Reactor: Application to Low-Pressure Deposition of Tungsten, Korean Journal of Chemical Engineering, Vol. 19, Issue 3, May 2002, pp 391-399.
- 8. Pierson Hugh O., Handbook of Chemical Vapor Deposition, 2nd edition, Noyes Publications, 1999, pp. 108-140.
- 9. Schmidt Lanny D., The engineering of chemical reactions, 2nd edition, Oxford University Press, 2005, pp. 353-357.
- 10. Versteeg H; Malalasekera W., An introduction to computational fluid dynamics, 2nd edition, Pearson Ed., 2007.
- 11. Xenidou T. C.; Boudouvis A. G.; Markatos N. C.; Samelor D.; Senocq F.; Prud'homme N.; Vahlas, An experimental and computational analysis of a MOCVD process for the growth of Al films using DMEAA, Surface and Coatings Technology, Vol. 201, 2007, pp. 8868-8872.
- 12. Xenidou T. C.; Prud'homme N.; Vahlas C.; Markatos N. C.; Boudouvis A. G., A Comprehensive Insight in the MOCVD of Aluminum Through Interaction Between Reactive Transport Modeling and Targeted Growth Experiments, ECS Transactions, Vol. 25, Issue 8 Part 1, 2009, pp. 99-106.
- 13. Xenidou T. C.; Prud'homme N.; Vahlas C.; Markatos N. C.; Boudouvis A. G., Reaction and Transport Interplay in Al MOCVD Investigated Through Experiments and Computational Fluid Dynamic Analysis, Journal of the Electrochemical Society, Vol. 157, Issue 12, 2010, pp. D663-D641.
- 14. Xenidou T. C.; Prud'homme N.; Aloui L.; Vahlas C.; Markatos N. C.; Boudouvis A. G., Shape Optimization of a Showerhead System for the Control of Growth Uniformity in a MOCVD Reactor Using CFD-Based Evolutionary Algorithms, ECS Transactions, Vol. 25, Issue 8 Part 1, 2009, pp. 1053-1060.

- 15. http://www.cham.co.uk/phoenics/d_polis/d_enc/encindex.htm
- 16. http://encyclopedia.che.engin.umich.edu/Pages/Reactors/CVDReactors/CVDReactors.html
- 17. Μαρκάτος Ν. Ασημακόπουλος Δ., Υπολογιστική Ρευστοδυναμική, εκδ. Παπασωτηρίου, Αθήνα 1995, σ. 99-126.
- 18. Ξενίδου Θ. Χ., 2003, Σχεδιασμός αντιδραστήρων χημικής απόθεσης από ατμό: εφαρμογή στην απόθεση οξειδίου του βολφραμίου και στην απόθεση οξειδίου του κασσιτέρου, Διδακτορική Διατριβή, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Αθήνα.
- 19. Παπαϊωάννου Α. Θ., Μηχανική των Ρευστών, Τόμοι Ι & ΙΙ, εκδ. Δ. Μαυρομμάτη, Αθήνα, 2002.
Α. Αρχείο εισόδου (q1) του λογισμικού PHOENICS για διατομή 7 οπών στον δίσκο καταιονισμού

```
TALK=F; RUN(1, 1)
     >> GROUP 1. Run title and other preliminaries
     _____
 TEXT (2D CVD WITH SHOWERHEAD)
     ** Data for grid generation **
 REAL(LL); LL = 1.0
     ** Number of Holes and Spaces on showerplate **
 INTEGER (NHO, NSP); NHO = 7; NSP = NHO + 1
     ** Distances in Y and Z direction **
 REAL(LX)
 REAL(LY1,LY2,LY3,LY4,LY5,LY6,LY7,LY)
 REAL (LYSCR, LYHO, LYSP)
 REAL(LZ1,LZ2,LZ3,LZ4,LZ5,LZ6,LZ7,LZ8,LZ)
 LX=1.
 LY1 = LL*3.5E-3; LY2 = LL*19.5E-3; LY3 = LL*17.E-3;
 LY4 = LL*5.E-3; LY5 = LL*14.5E-3; LY6 = LL*16.E-3;
 LY7 = LL*5.E-3; LYSCR=LL*2.E-3;
                                    LYHO = LL*1.E-3;
 LYSP= LL*(LY3-LYSCR-NHO*LYHO)/NSP
 LY=LY1+LY2;
 LZ1=LL*78.E-3; LZ2=LL*13.E-3; LZ3=LL*10.E-3; LZ4=LL*2.E-3;
 LZ5=LL*1.E-3; LZ6=LL*30.E-3; LZ7=LL*19.E-3; LZ8=LL*40.5E-3;
 LZ=LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7+LZ8
     ** Factor F is used for grid refinement **
 INTEGER(F); F=1
 INTEGER (NYSCR, NYSP, NYHO, NY3, NY4, NY5, NY6, NY7, NYREST)
 INTEGER(NZ1,NZ2,NZ3,NZ4,NZ5,NZ6,NZ7,NZ8)
     ** Cells in Y-direction **
 NYSCR = 4*F+1; NYSP = 2*F+1; NYHO = 2*F+1;
 NY3 = NYSCR+NSP*NYSP+NHO*NYHO; NY4 = 8*F+1;
 NY5 = NYSCR+6*NYSP+6*NYHO;
 NY6 = NYSCR+7*NYSP+7*NYHO; NY7 = NYSCR+2*NYSP+NYHO
 NYREST = 2 * F
     ** Sum of cells for screw, NSP spaces, NHO holes, showerhead
    wall and rest **
 NY = NY3 + NY4 + NYREST
     ** Cells in Z-direction **
 NZ1=70*(F+1)+1; NZ2=15*(F+1)+1; NZ3=14*(F+1)+1;
 NZ4=4*(F+1)+1; NZ5=4*(F+1);
                                 NZ6=60*F+1;
 NZ7=40*(F+1)+1; NZ8=77*(F+1)+1
 NZ=NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+NZ8
     ** Calculation of grid-cell number for Grid Independent Study
 INTEGER (NYM, NZM)
 NYM=NYSCR+NSP*NYSP+NHO*NYHO+((NY4+1)/2)
 NZM=NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+((NZ6+1)/2)
 REAL(QIN, PREACT)
 REAL (RHOIN, VISCREF, DENREF)
```

```
REAL (AREAIN, UAVER, MASFLUX)
REAL (LENGTH, GAC, RE, GA, GR)
GAC = 9.81
REAL (UAV)
REAL(PI)
PI = 4.0 * ATAN (1.0)
    ** Data for temperature & pressure in the CVD reactor **
REAL(TIN, TWALL, TREACT, TREF)
TIN = 70. + 273.
TREACT = 430.+273.
TWALL = 20. + 273.
TREF=(TREACT+TWALL)/2.
PREACT = 2.66645E+03
   _____
   -- Reacion & Species declaration
   ------
      Ar : carrier gas
      1
      S1
      WF6 + 3H2 \iff 6HF + W(s)
       2
            3
                    4
     S177 S80
                   S97
   _____
    ** Variables for species **
REAL (X1IN, X2IN, X3IN, X4IN, C1IN, C2IN, C3IN, C4IN)
REAL(GMW1,GMW2,GMW3,GMW4,GMW)
REAL(Q1IN,Q2IN,Q3IN,Q4IN,QINN)
    ** Flow rates in sccm (OoC, latm) **
Q1IN=2.
Q2IN=2.
Q3IN=21.
Q4IN=0.
QINN = Q1IN+Q2IN+Q3IN+Q4IN
    ** Flow rate in m3/s - standard conditions:0oC,1atm **
QIN = QINN*(1.E-6/60.)
    ** Flow rate in reactor conditions (TIN, PREACT) **
QIN = QIN * (1.013E+5/PREACT) * (TIN/273.)
     ** Species **
GMW1 = 39.948E-3
GMW2 = 2.978E-1
GMW3 = 2.016E-3
GMW4 = 2.001E-2
  -- Inlet mass fractions
X2IN=Q2IN/QINN
X3IN=Q3IN/QINN
X4IN=Q4IN/QINN
X1IN=1.-X2IN-X3IN-X4IN
GMW = X1IN*GMW1+X2IN*GMW2+X3IN*GMW3+X4IN*GMW4
C2IN=X2IN*GMW2/GMW
C3IN=X3IN*GMW3/GMW
C4IN=X4IN*GMW4/GMW
C1IN=1.-C2IN-C3IN-C4IN
```

```
>> GROUP 2. Transience; time-step specification
     _____
 STEADY = T
    >> GROUP 3. X-direction grid specification
     _____
 CARTES = T; NX = 1
    >> GROUP 4. Y-direction grid specification
     _____
    >> GROUP 5. Z-direction grid specification
     _____
    >> GROUP 6. Body-fitted coordinates or grid distortion
     _____
BFC = T
GSET(D,NX,NY,NZ,LX,LY,LZ)
    ** Points **
GSET(P,A1,0.0,0.0,0.0)
GSET(P,A2,0.0,LY1,0.0)
 GSET(P,A3,0.0,LY,0.0)
GSET(P, B1, 0.0, 0.0, LZ1)
GSET (P, B2, 0.0, LY1, LZ1)
GSET(P,B3,0.0,LY,LZ1)
 GSET (P, C1, 0.0, 0.0, LZ1+LZ2)
GSET (P, C2, 0.0, LY3, LZ1+LZ2)
GSET (P, C3, 0.0, LY3+LY4, LZ1+LZ2)
GSET (P, C4, 0.0, LY, LZ1+LZ2)
GSET(P,D1,0.0,0.0,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET (P, 1A, 0.0, LYSCR, LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1B,0.0,LYSCR + LYSP,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET (P, 1C, 0.0, LYSCR + LYSP + LYHO, LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1D,0.0,LYSCR + 2*LYSP + LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1E,0.0,LYSCR + 2*LYSP + 2*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1F,0.0,LYSCR + 3*LYSP + 2*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET (P, 1G, 0.0, LYSCR + 3*LYSP + 3*LYHO, LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1H,0.0,LYSCR + 4*LYSP + 3*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1I,0.0,LYSCR + 4*LYSP + 4*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1J,0.0,LYSCR + 5*LYSP + 4*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1K,0.0,LYSCR + 5*LYSP + 5*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1L,0.0,LYSCR + 6*LYSP + 5*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1M,0.0,LYSCR + 6*LYSP + 6*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1N,0.0,LYSCR + 7*LYSP + 6*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,10,0.0,LYSCR + 7*LYSP + 7*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET (P, D2, 0.0, LY3, LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,D3,0.0,LY3+LY4,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,D4,0.0,LY,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET (P, E1, 0.0, 0.0, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET (P, 2A, 0.0, LYSCR, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET (P, 2B, 0.0, LYSCR + LYSP, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2C,0.0,LYSCR + LYSP + LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2D,0.0,LYSCR + 2*LYSP + LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2E,0.0,LYSCR + 2*LYSP + 2*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2F,0.0,LYSCR + 3*LYSP + 2*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2G,0.0,LYSCR + 3*LYSP + 3*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2H,0.0,LYSCR + 4*LYSP + 3*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2I,0.0,LYSCR + 4*LYSP + 4*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2J,0.0,LYSCR + 5*LYSP + 4*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2K,0.0,LYSCR + 5*LYSP + 5*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2L,0.0,LYSCR + 6*LYSP + 5*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
```

```
GSET(P,2M,0.0,LYSCR + 6*LYSP + 6*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2N,0.0,LYSCR + 7*LYSP + 6*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,20,0.0,LYSCR + 7*LYSP + 7*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
 GSET (P, E2, 0.0, LY3, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
 GSET(P,E3,0.0,LY3+LY4,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
 GSET (P, E4, 0.0, LY, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
 GSET(P,F1,0.0,0.0,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
 GSET (P, F2, 0.0, LY7, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
 GSET(P,F3,0.0,LY5,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
 GSET (P, F4, 0.0, LY6, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
 GSET(P,F5,0.0,LY3,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
 GSET(P,F6,0.0,LY3+LY4,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
 GSET(P,F7,0.0,LY,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
GSET(P,G1,0.0,0.0,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
GSET(P,G2,0.0,LY7,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
 GSET(P,G3,0.0,LY5,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
 GSET(P,G4,0.0,LY6,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
 GSET(P,G5,0.0,LY3,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
 GSET(P,G6,0.0,LY3+LY4,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
 GSET (P,G7,0.0,LY,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
 GSET(P,H1,0.0,0.0,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
GSET (P, H2, 0.0, LY7, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
 GSET (P, H3, 0.0, LY5, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
 GSET (P, H4, 0.0, LY6, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
 GSET (P, H5, 0.0, LY3, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
 GSET (P, H6, 0.0, LY3+LY4, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
 GSET (P, H7, 0.0, LY, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
 GSET(P, I1, 0.0, 0.0, LZ)
 GSET (P, I2, 0.0, LY7, LZ)
 GSET(P, I3, 0.0, LY5, LZ)
 GSET(P, I4, 0.0, LY6, LZ)
 GSET (P, I5, 0.0, LY3, LZ)
 GSET (P, I6, 0.0, LY3+LY4, LZ)
 GSET(P, I7, 0.0, LY, LZ)
     ** Lines **
 GSET(L, A1A2, A1, A2, NYSCR+NSP*NYSP+NHO*NYHO, 1.2)
 GSET(L, A2A3, A2, A3, NY4+NYREST, S1.2)
GSET(L,A1B1,A1,B1,NZ1,1.0)
 GSET(L, A2B2, A2, B2, NZ1, 1.0)
 GSET(L,A3B3,A3,B3,NZ1,1.0)
 GSET (L, B1B2, B1, B2, NYSCR+NSP*NYSP+NHO*NYHO, 1.2)
 GSET(L, B2B3, B2, B3, NY4+NYREST, S1.2)
GSET(L, B1C1, B1, C1, NZ2, 1.0)
 GSET(L, B2C2, B2, C2, NZ2, 1.0)
 GSET(L, B3C4, B3, C4, NZ2, 1.0)
 GSET (L, C1C2, C1, C2, NYSCR+NSP*NYSP+NHO*NYHO, 1.2)
 GSET(L,C2C3,C2,C3,NY4,1.0)
 GSET(L,C3C4,C3,C4,NYREST,S1.2)
 GSET(L,C1D1,C1,D1,NZ3,1.0)
 GSET(L,C2D2,C2,D2,NZ3,1.0)
 GSET(L,C3D3,C3,D3,NZ3,1.0)
 GSET(L,C4D4,C4,D4,NZ3,1.0)
```

```
GSET (L, D11A, D1, 1A, NYSCR, 1.0)
GSET(L, 1A1B, 1A, 1B, NYSP, 1.0)
GSET(L, 1B1C, 1B, 1C, NYHO, 1.0)
GSET(L,1C1D,1C,1D,NYSP,1.0)
GSET (L, 1D1E, 1D, 1E, NYHO, 1.0)
GSET (L, 1E1F, 1E, 1F, NYSP, 1.0)
GSET (L, 1F1G, 1F, 1G, NYHO, 1.0)
GSET (L, 1G1H, 1G, 1H, NYSP, 1.0)
GSET (L, 1H1I, 1H, 1I, NYHO, 1.0)
GSET(L,1I1J,1I,1J,NYSP,1.0)
GSET (L, 1J1K, 1J, 1K, NYHO, 1.0)
GSET(L,1K1L,1K,1L,NYSP,1.0)
GSET (L, 1L1M, 1L, 1M, NYHO, 1.0)
GSET(L, 1M1N, 1M, 1N, NYSP, 1.0)
GSET(L, 1N10, 1N, 10, NYHO, 1.0)
GSET(L, 10D2, 10, D2, NYSP, 1.0)
GSET(L,D2D3,D2,D3,NY4,1.0)
GSET(L, D3D4, D3, D4, NYREST, S1.2)
GSET(L, D1E1, D1, E1, NZ4, 1.0)
GSET(L, 1A2A, 1A, 2A, NZ4, 1.0)
GSET(L, 1B2B, 1B, 2B, NZ4, 1.0)
GSET(L, 1C2C, 1C, 2C, NZ4, 1.0)
GSET(L, 1D2D, 1D, 2D, NZ4, 1.0)
GSET(L,1E2E,1E,2E,NZ4,1.0)
GSET(L, 1F2F, 1F, 2F, NZ4, 1.0)
GSET(L, 1G2G, 1G, 2G, NZ4, 1.0)
GSET(L,1H2H,1H,2H,NZ4,1.0)
GSET(L,1I2I,1I,2I,NZ4,1.0)
GSET(L,1J2J,1J,2J,NZ4,1.0)
GSET(L, 1K2K, 1K, 2K, NZ4, 1.0)
GSET(L,1L2L,1L,2L,NZ4,1.0)
GSET (L, 1M2M, 1M, 2M, NZ4, 1.0)
GSET(L, 1N2N, 1N, 2N, NZ4, 1.0)
GSET(L, 1020, 10, 20, NZ4, 1.0)
GSET(L, D2E2, D2, E2, NZ4, 1.0)
GSET(L, D3E3, D3, E3, NZ4, 1.0)
GSET(L, D4E4, D4, E4, NZ4, 1.0)
GSET(L, E12A, E1, 2A, NYSCR, 1.0)
GSET(L, 2A2B, 2A, 2B, NYSP, 1.0)
GSET(L,2B2C,2B,2C,NYHO,1.0)
GSET(L,2C2D,2C,2D,NYSP,1.0)
GSET(L,2D2E,2D,2E,NYHO,1.0)
GSET(L,2E2F,2E,2F,NYSP,1.0)
GSET(L,2F2G,2F,2G,NYHO,1.0)
GSET(L,2G2H,2G,2H,NYSP,1.0)
GSET(L,2H2I,2H,2I,NYHO,1.0)
GSET(L,212J,21,2J,NYSP,1.0)
GSET (L, 2J2K, 2J, 2K, NYHO, 1.0)
GSET(L, 2K2L, 2K, 2L, NYSP, 1.0)
GSET (L, 2L2M, 2L, 2M, NYHO, 1.0)
GSET (L, 2M2N, 2M, 2N, NYSP, 1.0)
GSET(L, 2N2O, 2N, 2O, NYHO, 1.0)
GSET(L, 20E2, 20, E2, NYSP, 1.0)
GSET(L, E2E3, E2, E3, NY4, 1.0)
GSET(L, E3E4, E3, E4, NYREST, S1.2)
GSET(L, E1F1, E1, F1, NZ5, 1.0)
GSET(L, E2F5, E2, F5, NZ5, 1.0)
GSET(L,E3F6,E3,F6,NZ5,1.0)
GSET(L, E4F7, E4, F7, NZ5, 1.0)
```

GSET(L, F1F2, F1, F2, NY7, 1.0) GSET(L, F2F3, F2, F3, NY5-NY7, 1.0) GSET(L, F3F4, F3, F4, NY6-NY5, 1.0) GSET(L, F4F5, F4, F5, NY3-NY6, 1.0) GSET(L, F5F6, F5, F6, NY4, 1.0) GSET (L, F6F7, F6, F7, NYREST, S1.2) GSET(L, F1G1, F1, G1, NZ6, -1.2) GSET(L, F2G2, F2, G2, NZ6, -1.2) GSET(L, F3G3, F3, G3, NZ6, -1.2) GSET(L, F4G4, F4, G4, NZ6, -1.2) GSET(L, F5G5, F5, G5, NZ6, -1.2) GSET(L, F6G6, F6, G6, NZ6, -1.2) GSET(L, F7G7, F7, G7, NZ6, -1.2) GSET(L,G1G2,G1,G2,NY7,1.0) GSET(L,G2G3,G2,G3,NY5-NY7,1.0) GSET(L,G3G4,G3,G4,NY6-NY5,1.0) GSET(L,G4G5,G4,G5,NY3-NY6,1.0) GSET(L,G5G6,G5,G6,NY4,1.0) GSET (L, G6G7, G6, G7, NYREST, S1.2) GSET(L,G1H1,G1,H1,NZ7,1.0) GSET(L,G2H2,G2,H2,NZ7,1.0) GSET(L,G3H3,G3,H3,NZ7,1.0) GSET(L,G4H4,G4,H4,NZ7,1.0) GSET(L,G5H5,G5,H5,NZ7,1.0) GSET(L,G6H6,G6,H6,NZ7,1.0) GSET(L,G7H7,G7,H7,NZ7,1.0) GSET(L, H1H2, H1, H2, NY7, 1.0) GSET (L, H2H3, H2, H3, NY5-NY7, 1.0) GSET (L, H3H4, H3, H4, NY6-NY5, 1.0) GSET (L, H4H5, H4, H5, NY3-NY6, 1.0) GSET (L, H5H6, H5, H6, NY4, 1.0) GSET (L, H6H7, H6, H7, NYREST, S1.2) GSET(L, H1I1, H1, I1, NZ8, 1.0) GSET(L, H2I2, H2, I2, NZ8, 1.0) GSET(L, H3I3, H3, I3, NZ8, 1.0) GSET(L, H4I4, H4, I4, NZ8, 1.0) GSET(L, H5I5, H5, I5, NZ8, 1.0) GSET(L, H6I6, H6, I6, NZ8, 1.0) GSET(L, H7I7, H7, I7, NZ8, 1.0) GSET(L, I1I2, I1, I2, NY7, 1.0) GSET(L, I2I3, I2, I3, NY5-NY7, 1.0) GSET(L, I3I4, I3, I4, NY6-NY5, 1.0) GSET(L, I4I5, I4, I5, NY3-NY6, 1.0) GSET(L, I5I6, I5, I6, NY4, 1.0) GSET(L, 1617, 16, 17, NYREST, S1.2) ** Frames ** GSET(F, F1, A1, -, A2, -, B2, -, B1, -) GSET (F, F2, A2, -, A3, -, B3, -, B2, -) GSET(F,F3,B1,-,B2,-,C2,-,C1,-) GSET (F, F4, B2, -, B3, -, C4, C3, C2, -) GSET (F, F5, C1, -, C2, -, D2, 10.1N.1M.1L.1K.1J.\$ 1I.1H.1G.1F.1E.1D.1C.1B.1A, D1, -) GSET(F, F6, C2, -, C3, -, D3, -, D2, -) GSET(F, F7, C3, -, C4, -, D4, -, D3, -)

```
GSET (F, FSCR, D1, -, 1A, -, 2A, -, E1, -)
GSET (F, FSP1, 1A, -, 1B, -, 2B, -, 2A, -)
GSET (F, FHO1, 1B, -, 1C, -, 2C, -, 2B, -)
GSET (F, FSP2, 1C, -, 1D, -, 2D, -, 2C, -)
GSET (F, FHO2, 1D, -, 1E, -, 2E, -, 2D, -)
GSET (F, FSP3, 1E, -, 1F, -, 2F, -, 2E, -)
GSET (F, FHO3, 1F, -, 1G, -, 2G, -, 2F, -)
GSET (F, FSP4, 1G, -, 1H, -, 2H, -, 2G, -)
GSET (F, FHO4, 1H, -, 1I, -, 2I, -, 2H, -)
GSET(F,FSP5,11,-,1J,-,2J,-,2I,-)
GSET (F, FHO5, 1J, -, 1K, -, 2K, -, 2J, -)
GSET (F, FSP6, 1K, -, 1L, -, 2L, -, 2K, -)
GSET (F, FHO6, 1L, -, 1M, -, 2M, -, 2L, -)
GSET (F, FSP7, 1M, -, 1N, -, 2N, -, 2M, -)
GSET (F, FHO7, 1N, -, 10, -, 20, -, 2N, -)
GSET(F,FSP8,10,-,D2,-,E2,-,20,-)
 GSET(F,F8,D2,-,D3,-,E3,-,E2,-)
 GSET(F,F9,D3,-,D4,-,E4,-,E3,-)
 GSET(F,F10,E1,2A.2B.2C.2D.2E.2F.2G.2H.2I.2J.2K.$
2L.2M.2N.2O, E2, -, F5, F4.F3.F2, F1, -)
 GSET (F, F11, E2, -, E3, -, F6, -, F5, -)
 GSET (F, F12, E3, -, E4, -, F7, -, F6, -)
 GSET (F, F13, F1, -, F2, -, G2, -, G1, -)
 GSET (F, F14, F2, -, F3, -, G3, -, G2, -)
 GSET (F, F15, F3, -, F4, -, G4, -, G3, -)
 GSET(F, F16, F4, -, F5, -, G5, -, G4, -)
 GSET (F, F17, F5, -, F6, -, G6, -, G5, -)
 GSET(F, F18, F6, -, F7, -, G7, -, G6, -)
 GSET (F, F19, G1, -, G2, -, H2, -, H1, -)
 GSET (F, F20, G2, -, G3, -, H3, -, H2, -)
 GSET (F, F21, G3, -, G4, -, H4, -, H3, -)
 GSET (F, F22, G4, -, G5, -, H5, -, H4, -)
 GSET (F, F23, G5, -, G6, -, H6, -, H5, -)
 GSET(F,F24,G6,-,G7,-,H7,-,H6,-)
 GSET(F,F25,H1,-,H2,-,I2,-,I1,-)
 GSET (F, F26, H2, -, H3, -, I3, -, I2, -)
 GSET(F,F27,H3,-,H4,-,I4,-,I3,-)
 GSET(F,F28,H4,-,H5,-,I5,-,I4,-)
 GSET(F,F29,H5,-,H6,-,I6,-,I5,-)
 GSET(F,F30,H6,-,H7,-,I7,-,I6,-)
      ** Grid on frames **
 GSET (M, F1, +J+K, 1, 1, 1)
 GSET (M, F2, +J+K, 1, NY3+1, 1)
 GSET (M, F3, +J+K, 1, 1, NZ1+1)
 GSET (M, F4, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+1)
 GSET (M, F5, +J+K, 1, 1, NZ1+NZ2+1)
 GSET (M, F6, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+NZ2+1)
 GSET (M, F7, +J+K, 1, NY3+NY4+1, NZ1+NZ2+1)
 GSET (M, FSCR, +J+K, 1, 1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FSP1, +J+K, 1, NYSCR+1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FHO1, +J+K, 1, NYSCR+NYSP+1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FSP2, +J+K, 1, NYSCR+NYSP+NYHO+1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FHO2, +J+K, 1, NYSCR+2*NYSP+NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
```

```
GSET (M, FSP3, +J+K, 1, NYSCR+2*NYSP+2*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FHO3, +J+K, 1, NYSCR+3*NYSP+2*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FSP4, +J+K, 1, NYSCR+3*NYSP+3*NYHO+1, $
NZ1 + NZ2 + NZ3 + 1)
 GSET (M, FHO4, +J+K, 1, NYSCR+4*NYSP+3*NYHO+1, $
NZ1 + NZ2 + NZ3 + 1)
 GSET (M, FSP5, +J+K, 1, NYSCR+4*NYSP+4*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FHO5, +J+K, 1, NYSCR+5*NYSP+4*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FSP6, +J+K, 1, NYSCR+5*NYSP+5*NYHO+1, $
NZ1 + NZ2 + NZ3 + 1)
 GSET (M, FHO6, +J+K, 1, NYSCR+6*NYSP+5*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FSP7, +J+K, 1, NYSCR+6*NYSP+6*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FHO7, +J+K, 1, NYSCR+7*NYSP+6*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FSP8, +J+K, 1, NYSCR+7*NYSP+7*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, F8, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, F9, +J+K, 1, NY3+NY4+1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, F10, +J+K, 1, 1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1)
 GSET (M, F11, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1)
 GSET (M, F12, +J+K, 1, NY3+NY4+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1)
 GSET (M, F13, +J+K, 1, 1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F14, +J+K, 1, NY7+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F15, +J+K, 1, NY5+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F16, +J+K, 1, NY6+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F17, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F18, +J+K, 1, NY3+NY4+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F19, +J+K, 1, 1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET (M, F20, +J+K, 1, NY7+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET (M, F21, +J+K, 1, NY5+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET (M, F22, +J+K, 1, NY6+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET (M, F23, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET (M, F24, +J+K, 1, NY3+NY4+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET(M, F25, +J+K, 1, 1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
 GSET (M, F26, +J+K, 1, NY7+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
 GSET (M, F27, +J+K, 1, NY5+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
 GSET (M, F28, +J+K, 1, NY6+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
 GSET (M, F29, +J+K, 1, NY3+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
 GSET (M, F30, +J+K, 1, NY3+NY4+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
      ** Copy grid from x=0 to x=1 **
 GSET(C, I2, F, I1, +, LX, 0.0, 0.0)
     >> GROUP 7. Variables stored, solved & named
 ONEPHS = T
```

```
** U1 -> x
   ** V1 -> y
   ** W1 -> z
   ** Non-default variable names **
NAME (16) = S1
NAME (17) = S177
NAME(18)=S80
NAME(19)=S97
NAME(144) =BLOK
NAME(145) =TEM1 ; NAME(146) =DEPO
NAME(147) = PRPS ; NAME(148) = ENUL
NAME (149) = RHO1 ; NAME (150) = EMIS
    ** Solved variables list **
SOLVE(P1, V1, W1, TEM1)
SOLVE(S177, S80, S97)
    ** Stored variables list **
STORE (EMIS, RHO1, ENUL, PRPS, DEPO, BLOK)
STORE (S1)
STORE(FR01, FR02, FR03, FR04)
    ** Additional solver options **
SOLUTN(P1, Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN (V1, Y,Y,N,N,N,Y)
SOLUTN (W1, Y,Y,N,N,N,Y)
SOLUTN (TEM1, Y, Y, Y, N, N, Y)
SOLUTN (S177, Y, Y, Y, N, N, Y)
SOLUTN(S80, Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(S97, Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN (TEM1, Y, Y, Y, N, N, Y)
IVARBK = -1; ISOLBK = 1
    >> GROUP 8. Terms (in differential equations) & devices
                        _____
DIFCUT = 0.00000E+00
NEWRH1 = F
NEWENL = F
ISOLX
       = 0; ISOLY = 0; ISOLZ = 0
    ** DIffusion Coefficients **
UDIFF=T
    ** Soret Thermal Diffusion **
UDIFNE = T
USOURC = T
TERMS (P1 ,Y,Y,Y,N,Y,Y)
TERMS (V1 , Y, Y, Y, Y, Y, Y)
TERMS (W1
           , Y, Y, Y, Y, Y, Y)
TERMS (S177, N, Y, Y, Y, Y, Y)
TERMS (S80 , N, Y, Y, Y, Y, Y)
TERMS (S97, N, Y, Y, Y, Y, Y)
TERMS (S1 ,N,Y,Y,Y,Y,Y)
TERMS (TEM1, N, Y, Y, Y, Y, Y)
    >> GROUP 9. Properties of the medium (or media)
    ____
                           _____
PRESSO = PREACT
```

** Mixture density in TIN, PREACT (in kg/m3) - Ideal Gas Law

```
RHOIN = (PRESS0*GMW/(8.31441*TIN))
     ** Sutherland's law for H2 viscosity (Pa*s)
 VISCREF=8.35E-06*((83.+273.)/(83.+TREF))*((TREF/273.)**1.5)
     ** reference density
 DENREF = (PRESSO*GMW/(8.31441*TREF))
 RHO1
       = GRND8
        = GRND8
 CP1
        = GRND8; ENUT = 0.000000E+00
 ENUT.
 PRNDTL (S177) =-GRND8
 PRNDTL(S80) =-GRND8
 PRNDTL (S97) =-GRND8
 PRNDTL(S1) =-GRND8
 PRNDTL(TEM1) = -GRND8
 PRLH1A = 0.000000E+00 ; PRLH1B = 0.000000E+00
 PRLH1C = 0.00000E+00
   * List of user-defined materials to be read by EARTH
 MATFLG=T; IMAT=1
   * Name
   *Ind. Dens. Viscos. Spec.heat Conduct. Expans. Compr.
   * <GAS MIXTURE>
  70 GRND8 GRND8 GRND8 GRND8 1.000 0.000
  *
        constants for GRND option no 1
  0 0
   *
          constants for GRND option no 2
  0 0
   *
          constants for GRND option no 3
  0 0
   *
          constants for GRND option no 4
  0 0
     >> GROUP 10. Inter-phase-transfer processes and properties
                  _____
     >> GROUP 11. Initialization of variable or porosity fields
 FIINIT(BLOK) = 1.000000E+00
 FIINIT(PRPS) = 7.000000E+01
 FIINIT(TEM1) = TREF
 FIINIT(V1) = 1.E-06; FIINIT(W1) = 1.E-0
 FIINIT(S177)=C2IN
 FIINIT(S80)=C3IN
 FIINIT(S97) = 1.e - 4
 CONPOR(ELASMA,0.00,NORTH,1,NX,NY3,NY3,1,NZ1+NZ2)
 INIT(ELASMA, BLOK, 0.000000E+00, 2.000000E+00)
 INIT(ELASMA, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02)
     ** Screw at the center of showerhead **
 CONPOR(SCR, 0.00, CELL, 1, NX, 1, NYSCR, NZ1+NZ2+NZ3+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4)
 INIT (SCR, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00)
 INIT (SCR, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02)
     ** Spaces between showerhead holes **
 CONPOR(HSP1,0.00,CELL,1,NX,NYSCR+1,NYSCR+NYSP,$
NZ1+NZ2+NZ3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4)
 INIT (HSP1, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00)
 INIT (HSP1, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02)
 CONPOR(HSP2,0.00,CELL,1,NX,NYSCR+NYSP+NYHO+1,$
```

NYSCR+2*NYSP+NYHO, NZ1+NZ2+NZ3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT(HSP2, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(HSP2, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) CONPOR (HSP3, 0.00, CELL, 1, NX, NYSCR+2*NYSP+2*NYHO+1, \$ NYSCR+3*NYSP+2*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT (HSP3, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT (HSP3, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) CONPOR(HSP4,0.00,CELL,1,NX,NYSCR+3*NYSP+3*NYHO+1,\$ NYSCR+4*NYSP+3*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT(HSP4, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(HSP4, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) CONPOR(HSP5,0.00,CELL,1,NX,NYSCR+4*NYSP+4*NYHO+1,\$ NYSCR+5*NYSP+4*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT(HSP5, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(HSP5, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) CONPOR (HSP6, 0.00, CELL, 1, NX, NYSCR+5*NYSP+5*NYHO+1, \$ NYSCR+6*NYSP+5*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT(HSP6, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(HSP6, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) CONPOR(HSP7,0.00,CELL,1,NX,NYSCR+6*NYSP+6*NYHO+1,\$ NYSCR+7*NYSP+6*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT(HSP7, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(HSP7, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) CONPOR(HSP8,0.00,CELL,1,NX,NYSCR+7*NYSP+7*NYHO+1,\$ NYSCR+8*NYSP+7*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT(HSP8, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(HSP8, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) ** Wall at the end of showerhead ** CONPOR (BL2, 0.00, CELL, 1, NX, NY3+1, NY3+NY4, \$ NZ1+NZ2+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5) INIT(BL2,BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT (BL2, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) ** Below wafer ** CONPOR (BL1, 0.00, CELL, 1, NX, 1, NY6, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+\$ NZ5+NZ6+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7) INIT(BL1,BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(BL1, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) ** Wafer ** CONPOR(WAFER, 0.00, CELL, 1, NX, 1, NY5, \$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1) INIT(WAFER, BLOK, 0.000000E+00, 4.000000E+00) INIT(WAFER, PRPS, 0.000000E+00, 1.110000E+02) CONPOR(SUSC, 0.00, CELL, 1, NX, 1, NY7, \$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1,NZ) INIT(SUSC, BLOK, 0.000000E+00, 5.000000E+00) INIT (SUSC, PRPS, 0.000000E+00, 1.110000E+02) INIADD = F>> GROUP 12. Patchwise adjustment of terms (in differential equations) _____ No PATCHes used for this Group

```
>> GROUP 13. Boundary conditions and special sources
     _____
     ** Total inlet velocity (in m/s) **
 AREAIN = PI^*(LY1^{**2.})
 UAVER = QIN/AREAIN
     ** mass flux in TIN, PREACT (in kg/s) **
 MASFLUX = RHOIN*UAVER
 INLET (INLET, LOW, 1, NX, 1, NY3, 1, 1, 1, LSTEP)
 VALUE (INLET, P1, MASFLUX)
 VALUE (INLET, W1, UAVER)
 VALUE (INLET, S1, C1IN)
 VALUE (INLET, S177, C2IN)
 VALUE (INLET, S80, C3IN)
 VALUE (INLET, S97, C4IN)
 VALUE (INLET, TEM1, TIN)
 PATCH (OUT, HIGH, 1, NX, NY7, NY, NZ, NZ, 1, LSTEP)
 COVAL (OUT, P1, FIXP, 0.000000E+00)
 COVAL (OUT, S1, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, S177, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, S80, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, S97, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, TEM1, 0.000000E+00, SAME)
     ** Reactor walls **
 PATCH (WALL1, LWALL, 1, NX, NY3+1, NY, 1, 1, 1, LSTEP)
 COVAL (WALL1,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
COVAL (WALL1,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
COVAL (WALL1,TEM1, GRND2, TWALL)
 PATCH (WALL2, NWALL, 1, NX, NY, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
 COVAL (WALL2,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
                  , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WALL2,W1
 COVAL (WALL2, TEM1, GRND2, TWALL)
     ** BL1 walls **
     ** Heated plate at the position of the substrate **
 PATCH (WAFET, HIGH, 1, NX, 1, NY5, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,1,LSTEP)
 COVAL (WAFET, TEM1, FIXVAL, TREACT)
PATCH (WALL3, HWALL, 1, NX, NY5+1, NY6, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,1,LSTEP)
 COVAL (WALL3,V1 , GRND2, 0.00000E+00)
 COVAL (WALL3,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WALL3, TEM1, GRND2, TWALL)
 PATCH (WALL4, SWALL, 1, NX, NY6+1, NY6+1, NZ1+NZ2+NZ3+$
NZ4+NZ5+NZ6+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7,1,LSTEP)
 COVAL (WALL4,V1 , GRND2, 0.00000E+00)
 COVAL (WALL4,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WALL4, TEM1, GRND2, TWALL)
 PATCH (WALL5, LWALL, 1, NX, NY7+1, NY6, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+$
NZ5+NZ6+NZ7+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1,1,LSTEP)
 COVAL (WALL5,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WALL5,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WALL5, TEM1, GRND2, TWALL)
     ** Succeptor walls **
 PATCH (WALL6, SWALL, 1, NX, NY7+1, NY7+1, $
```

NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1,NZ,1,LSTEP) COVAL (WALL6,V1 , GRND2, 0.00000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WALL6,W1 COVAL (WALL6, TEM1, GRND2, TWALL) ** Showerhead ** ** Screw walls ** PATCH (WSCR1, HWALL, 1, NX, 1, NYSCR, \$ NZ1+NZ2+NZ3, NZ1+NZ2+NZ3, 1, LSTEP) COVAL (WSCR1,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSCR1,W1 COVAL (WSCR1, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSCR2, SWALL, 1, NX, NYSCR+1, NYSCR+1, \$ NZ1+NZ2+NZ3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4, 1, LSTEP) COVAL (WSCR2,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSCR2,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSCR2, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSCR3, LWALL, 1, NX, 1, NYSCR, \$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSCR3,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSCR3,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSCR3, TEM1, GRND2, TWALL) ** 1st Space walls ** PATCH (WSP11, HWALL, 1, NX, NYSCR+1, NYSCR+NYSP, \$ NZ1+NZ2+NZ3,NZ1+NZ2+NZ3,1,LSTEP) COVAL (WSP11,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP11,W1 , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WSP11, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP12, SWALL, 1, NX, NYSCR+NYSP+1, NYSCR+NYSP+1, \$ NZ1+NZ2+NZ3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4, 1, LSTEP) COVAL (WSP12,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WSP12,W1 COVAL (WSP12, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP13, LWALL, 1, NX, NYSCR+1, NYSCR+NYSP, \$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSP13,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP13,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP13, TEM1, GRND2, TWALL) ** 2nd Space walls ** PATCH (WSP21, HWALL, 1, NX, NYSCR+NYSP+NYHO+1, \$ NYSCR+2*NYSP+NYHO,NZ1+NZ2+NZ3,NZ1+NZ2+NZ3,1,LSTEP) COVAL (WSP21,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP21,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP21, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP22, SWALL, 1, NX, NYSCR+2*NYSP+NYHO+1, \$ NYSCR+2*NYSP+NYHO+1,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP22,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP22,W1 COVAL (WSP22, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP23, LWALL, 1, NX, NYSCR+NYSP+NYHO+1, \$ NYSCR+2*NYSP+NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSP23,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP23,W1 , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WSP23, TEM1, GRND2, TWALL)

PATCH (WSP24, NWALL, 1, NX, NYSCR+NYSP+NYHO, NYSCR+NYSP+NYHO, \$ NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP24,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP24,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP24, TEM1, GRND2, TWALL) ** 3rd Space walls ** PATCH (WSP31, HWALL, 1, NX, NYSCR+2*NYSP+2*NYHO+1, \$ NYSCR+3*NYSP+2*NYHO, NZ1+NZ2+NZ3, NZ1+NZ2+NZ3, 1, LSTEP) COVAL (WSP31,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WSP31,W1 COVAL (WSP31, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP32, SWALL, 1, NX, NYSCR+3*NYSP+2*NYHO+1, \$ NYSCR+3*NYSP+2*NYHO+1,NZ1+NZ2+NZ3+1,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP32,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP32,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP32, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP33, LWALL, 1, NX, NYSCR+2*NYSP+2*NYHO+1, \$ NYSCR+3*NYSP+2*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSP33,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP33,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP33, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP34, NWALL, 1, NX, NYSCR+2*NYSP+2*NYHO, \$ NYSCR+2*NYSP+2*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP34,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP34,W1 COVAL (WSP34, TEM1, GRND2, TWALL) ** 4th Space walls ** PATCH (WSP41, HWALL, 1, NX, NYSCR+3*NYSP+3*NYHO+1, \$ NYSCR+4*NYSP+3*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3,NZ1+NZ2+NZ3,1,LSTEP) COVAL (WSP41,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP41,W1 COVAL (WSP41, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP42, SWALL, 1, NX, NYSCR+4*NYSP+3*NYHO+1, \$ NYSCR+4*NYSP+3*NYHO+1,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP42,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WSP42,W1 COVAL (WSP42, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP43,LWALL,1,NX,NYSCR+3*NYSP+3*NYHO+1,NYSCR+4*NYSP+3*NYHO,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSP43,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP43,W1 COVAL (WSP43, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP44,NWALL,1,NX,NYSCR+3*NYSP+3*NYHO,NYSCR+3*NYSP+3*NYHO,\$ NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP44,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP44,W1 COVAL (WSP44, TEM1, GRND2, TWALL) ** 5th Space walls ** PATCH (WSP51, HWALL, 1, NX, NYSCR+4*NYSP+4*NYHO+1, NYSCR+5*NYSP+4*NYHO, \$ NZ1+NZ2+NZ3, NZ1+NZ2+NZ3, 1, LSTEP) COVAL (WSP51,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP51,W1 , GRND2, 0.000000E+00)

COVAL (WSP51, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP52, SWALL, 1, NX, NYSCR+5*NYSP+4*NYHO+1, \$ NYSCR+5*NYSP+4*NYHO+1,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP52,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP52,W1 , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WSP52, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP53,LWALL,1,NX,NYSCR+4*NYSP+4*NYHO+1,NYSCR+5*NYSP+4*NYHO,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSP53,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP53,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP53, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP54,NWALL,1,NX,NYSCR+4*NYSP+4*NYHO,NYSCR+4*NYSP+4*NYHO,\$ NZ1+NZ2+NZ3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4, 1, LSTEP) COVAL (WSP54,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP54,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP54, TEM1, GRND2, TWALL) ** 6th Space walls ** PATCH (WSP61, HWALL, 1, NX, NYSCR+5*NYSP+5*NYHO+1, NYSCR+6*NYSP+5*NYHO, \$ NZ1+NZ2+NZ3,NZ1+NZ2+NZ3,1,LSTEP) COVAL (WSP61,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP61,W1 COVAL (WSP61, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP62, SWALL, 1, NX, NYSCR+6*NYSP+5*NYHO+1, \$ NYSCR+6*NYSP+5*NYHO+1,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP62,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WSP62,W1 COVAL (WSP62, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP63,LWALL,1,NX,NYSCR+5*NYSP+5*NYHO+1,NYSCR+6*NYSP+5*NYHO,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1, 1, LSTEP) COVAL (WSP63,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP63,W1 COVAL (WSP63, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP64,NWALL,1,NX,NYSCR+5*NYSP+5*NYHO,NYSCR+5*NYSP+5*NYHO,\$ NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP64,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP64,W1 COVAL (WSP64, TEM1, GRND2, TWALL) ** 7th Space walls ** PATCH (WSP71, HWALL, 1, NX, NYSCR+6*NYSP+6*NYHO+1, NYSCR+7*NYSP+6*NYHO, \$ NZ1+NZ2+NZ3,NZ1+NZ2+NZ3,1,LSTEP) COVAL (WSP71,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP71,W1 COVAL (WSP71, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP72, SWALL, 1, NX, NYSCR+7*NYSP+6*NYHO+1, \$ NYSCR+7*NYSP+6*NYHO+1,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP72,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP72,W1 COVAL (WSP72, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP73,LWALL,1,NX,NYSCR+6*NYSP+6*NYHO+1,NYSCR+7*NYSP+6*NYHO,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1, 1, LSTEP) COVAL (WSP73,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP73,W1 COVAL (WSP73, TEM1, GRND2, TWALL)

```
PATCH (WSP74, NWALL, 1, NX, NYSCR+6*NYSP+6*NYHO, NYSCR+6*NYSP+6*NYHO, $
NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP)
 COVAL (WSP74,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WSP74,W1
                 , GRND2, 0.00000E+00)
       COVAL (WSP74, TEM1, GRND2, TWALL)
     ** 8th Space walls **
 PATCH (WSP81, HWALL, 1, NX, NYSCR+7*NYSP+7*NYHO+1, NYSCR+8*NYSP+7*NYHO, $
NZ1+NZ2+NZ3,NZ1+NZ2+NZ3,1,LSTEP)
 COVAL (WSP81,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WSP81,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
       COVAL (WSP81, TEM1, GRND2, TWALL)
 PATCH (WSP82,LWALL,1,NX,NYSCR+7*NYSP+7*NYHO+1,NYSCR+8*NYSP+7*NYHO,$
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1, 1, LSTEP)
 COVAL (WSP82,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WSP82,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
       COVAL (WSP82, TEM1, GRND2, TWALL)
 PATCH (WSP83,NWALL,1,NX,NYSCR+7*NYSP+7*NYHO,NYSCR+7*NYSP+7*NYHO,$
NZ1+NZ2+NZ3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4, 1, LSTEP)
 COVAL (WSP83,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WSP83,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
       COVAL (WSP83, TEM1, GRND2, TWALL)
     ** BL2 walls **
 PATCH (WAL71, HWALL, 1, NX, NY3+1, NY3+NY4, NZ1+NZ2, NZ1+NZ2, 1, LSTEP)
 COVAL (WAL71,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WAL71,W1
                  , GRND2, 0.00000E+00)
       COVAL (WAL71, TEM1, GRND2, TWALL)
 PATCH (WAL72, SWALL, 1, NX, NY3+NY4+1, NY3+NY4+1, $
NZ1+NZ2+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5, 1, LSTEP)
 COVAL (WAL72,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
                  , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WAL72,W1
       COVAL (WAL72, TEM1, GRND2, TWALL)
 PATCH (WAL73, LWALL, 1, NX, NY3+1, NY3+NY4, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1,1,LSTEP)
 COVAL (WAL73,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
                  , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WAL73,W1
       COVAL (WAL73, TEM1, GRND2, TWALL)
 PATCH (WAL74, NWALL, 1, NX, NY3, NY3, $
NZ1+NZ2+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5, 1, LSTEP)
 COVAL (WAL74,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WAL74,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
       COVAL (WAL74, TEM1, GRND2, TWALL)
      _____
      Reaction
 PATCH (SURF01, HIGH, 1, NX, 1, NY5, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,1,LSTEP)
 COVAL (SURF01, P1, 1.000000E+00, GRND1)
 COVAL(SURF01,S1, FIXFLU,
                                GRND1)
 COVAL (SURF01, S80, FIXFLU,
                                GRND1)
 COVAL (SURF01, S177, FIXFLU,
                                GRND1)
 COVAL(SURF01, S97, FIXFLU,
                               GRND1)
 COVAL (SURF01, TEM1, FIXFLU,
                                GRND1)
      SURF01=SKIP
      -- Buoyancy terms
```

```
BUOYC = 9.81
BUOYD = DENREF
PATCH (BUOY, PHASEM, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL (BUOY, W1, FIXFLU, DENSDIFF)
    BUOY=SKIP
PATCH (RELT, PHASEM, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
COVAL (RELT, S177, GRND1, SAME)
COVAL (RELT, S97, GRND1, SAME)
COVAL (RELT, S80, GRND1, SAME)
COVAL (RELT, S1, GRND1, SAME)
    >> GROUP 14. Downstream pressure for PARAB=.TRUE.
    _____
    >> GROUP 15. Termination of sweeps
    _____
LSWEEP = 40000
TSTSWP = 20
SELREF = T
RESFAC = 1.E-3
    >> GROUP 16. Termination of iterations
    -----
USOLVE=F
LITER(P1)=200; LITER(S1)=200
LITER(S177)=200; LITER(S80)=200; LITER(S97)=200
LITER (TEM1) = 200
ENDIT (P1) =1.E-12
ENDIT(S1) = GRND1; ENDIT(S177) = GRND1; ENDIT(S97) = GRND1;
ENDIT (S80) = GRND1
ENDIT (TEM1) = GRND1
    >> GROUP 17. Under-relaxation devices
      _____
                _____
RELAX(P1 ,LINRLX, 5.0E-01)
RELAX(V1 ,FALSDT, 2.0E-01)
RELAX(W1 ,FALSDT, 2.0E-01)
RELAX(S1 ,FALSDT, 2.0E-01)
RELAX (S177, FALSDT, 2.0E-01)
RELAX(S80, FALSDT, 2.0E-01)
RELAX(S97, FALSDT, 2.0E-01)
RELAX (TEM1, LINRLX, 5.0E-01)
    >> GROUP 18. Limits on variables or increments to them
    _____
VARMAX(V1 ) = 1.000000E+06 ; VARMIN(V1 ) =-1.000000E+06
VARMAX(W1 ) = 1.000000E+06 ;VARMIN(W1 ) =-1.000000E+06
VARMAX(S177)=1.000000E+00; VARMIN(S177)=1.000000E-20
VARMAX(S97)=1.000000E+00; VARMIN(S97)=1.000000E-20
VARMAX(S80)=1.000000E+00; VARMIN(S80)=1.000000E-20
VARMAX(TEM1) = 3.000000E+03 ;VARMIN(TEM1) = 2.600000E+02
    >> GROUP 19. Data communicated by satellite to GROUND
    _____
NAMGRD = CVD
CSG10 = 'Q1'
SPEDAT (SET, CVD, MCDOPT, I, 2)
SPEDAT(SET, CVD, SMRLX, R, 1.E-2)
SPEDAT (SET, CVD, BINOPT, I, 4)
SPEDAT (SET, CVD, MCPROP, I, 3)
SPEDAT (SET, CVD, CHMRLX, R, 5.00000E-02)
    ** Thermal diffusion **
SPEDAT (SET, CVD, THMDIF, L, T)
```

```
SPEDAT (SET, CVD, THMOPT, I, 1)
SPEDAT (SET, CVD, THMFRQ, I, 3)
    ** Reaction **
SPEDAT (SET, CVD, NSREAC, I, 1)
SPEDAT (SET, CVD, SREAC(1), I, 17)
SPEDAT (SET, CVD, XMIR, L, F)
SPEDAT (SET, CVD, YMIR, L, F)
SPEDAT (SET, CVD, ZMIR, L, F)
SPEDAT (SET, CVD, AXIBFC, L, F)
SPEDAT (SET, CVD, NOSPCT, L, F)
SPEDAT (SET, CVD, FINE3D, L, F)
SPEDAT (SET, CVD, VFNORM, L, T)
SPEDAT(SET, CVD, NUMRAY, I, 1)
 _____
--- Dimensionless groups
_____
    REYNOLDS
LENGTH = 0.8
UAV = QIN / (PI*(LENGTH**2.))
RE = DENREF*UAV*LENGTH/VISCREF
   GAY-LUSSAC
GA = (TREACT-TWALL) / TREF
    GRASHOF
GR = (GAC*(DENREF**2.)*(LENGTH**3.)*(TREACT-TWALL))/((VISCREF**2.)*$
TREF)
   >> GROUP 20. Preliminary print-out
   _____
ECHO = T
   >> GROUP 21. Print-out of variables
     _____
           _____
   >> GROUP 22. Spot-value print-out
     _____.
IXMON=1; IYMON=NYM; IZMON=NZM
   >> GROUP 23. Field print-out and plot control
      No PATCHes used for this Group
   >> GROUP 24. Dumps for restarts
      _____
NPLT=2
ITABL=3
UWATCH=F
YPLS=T
   ** Variables displayed in Satellite **
LSWEEP
TSTSWP
XULAST
YVLAST
ZWLAST
NX
NΥ
N7
UAVER
```

STOP

B. Αρχείο εισόδου (q1) του λογισμικού PHOENICS για διατομή 4 οπών στον δίσκο καταιονισμού

TALK=F; RUN(1,1)

```
>> GROUP 1. Run title and other preliminaries
    _____
TEXT (2D CVD WITH SHOWERHEAD)
    ** Data for grid generation **
REAL(LL); LL = 1.0
    ** Number of Holes and Spaces on showerplate **
INTEGER (NHO, NSP); NHO = 4; NSP = NHO + 1
    ** Distances in Y and Z direction **
REAL(LX)
REAL (LY1, LY2, LY3, LY4, LY5, LY6, LY7, LY)
REAL (LYSCR, LYHO, LYSP)
REAL(LZ1, LZ2, LZ3, LZ4, LZ5, LZ6, LZ7, LZ8, LZ)
LX=1.
LY1 = LL*3.5E-3; LY2 = LL*19.5E-3; LY3 = LL*17.E-3;
LY4 = LL*5.E-3; LY5 = LL*14.5E-3; LY6 = LL*16.E-3;
LY7 = LL*5.E-3; LYSCR=LL*2.E-3;
                                   LYHO = LL*1.E-3;
LYSP= LL*(LY3-LYSCR-NHO*LYHO)/NSP
LY=LY1+LY2;
LZ1=LL*78.E-3; LZ2=LL*13.E-3; LZ3=LL*10.E-3; LZ4=LL*2.E-3;
LZ5=LL*1.E-3; LZ6=LL*30.E-3; LZ7=LL*19.E-3; LZ8=LL*40.5E-3;
LZ=LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7+LZ8
    ** Factor F is used for grid refinement **
INTEGER(F); F=3
INTEGER (NYSCR, NYSP, NYHO, NY3, NY4, NY5, NY6, NY7, NYREST)
INTEGER(NZ1,NZ2,NZ3,NZ4,NZ5,NZ6,NZ7,NZ8)
    ** Cells in Y-direction **
NYSCR = 4*F+5; NYSP = 6*F+6; NYHO = 2*F+5;
NY3 = NYSCR+NSP*NYSP+NHO*NYHO; NY4 = 8*F+5;
NY5 = NYSCR+4*NYSP+4*NYHO;
NY6 = NYSCR+4*NYSP+5*NYHO; NY7 = NYSCR+NYSP+NYHO
NYREST = 2 * F + 1
    ** Sum of cells for screw, NSP spaces, NHO holes, showerhead
       wall and rest **
NY = NY3 + NY4 + NYREST
    ** Cells in Z-direction **
NZ1=70*(F+1)+1; NZ2=15*(F+1)+1; NZ3=14*(F+1)+1;
NZ4=4*(F+1)+1; NZ5=4*(F+1);
                                NZ6=60*F+1;
NZ7=40*(F+1)+1; NZ8=77*(F+1)+1
NZ=NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+NZ8
    ** Calculation of grid-cell number for Grid Independent Study
INTEGER (NYM, NZM)
NYM=NYSCR+NSP*NYSP+NHO*NYHO+((NY4+1)/2)
NZM=NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+((NZ6+1)/2)
REAL(QIN, PREACT)
REAL(RHOIN, VISCREF, DENREF)
REAL (AREAIN, UAVER, MASFLUX)
REAL (LENGTH, GAC, RE, GA, GR)
GAC = 9.81
```

```
REAL (UAV)
REAL(PI)
PI = 4.0 * ATAN(1.0)
    ** Data for temperature & pressure in the CVD reactor **
REAL(TIN, TWALL, TREACT, TREF)
TIN = 70. + 273.
TREACT = 430.+273.
TWALL = 20. + 273.
TREF=(TREACT+TWALL)/2.
PREACT = 2.66645E+03
   -- Reacion & Species declaration
   -----
      Ar : carrier gas
      1
      S1
      WF6 + 3H2 \iff 6HF + W(s)
       2
            3
                    4
     S177 S80
                  S97
   _____
    ** Variables for species **
REAL (X1IN, X2IN, X3IN, X4IN, C1IN, C2IN, C3IN, C4IN)
REAL(GMW1,GMW2,GMW3,GMW4,GMW)
REAL(Q1IN,Q2IN,Q3IN,Q4IN,QINN)
    ** Flow rates in sccm (0oC,1atm) **
Q1IN=2.
Q2IN=2.
Q3IN=21.
Q4IN=0.
QINN = Q1IN+Q2IN+Q3IN+Q4IN
    ** Flow rate in m3/s - standard conditions:0oC,1atm **
QIN = QINN*(1.E-6/60.)
    ** Flow rate in reactor conditions (TIN, PREACT) **
QIN = QIN * (1.013E+5/PREACT) * (TIN/273.)
     ** Species **
GMW1 = 39.948E-3
GMW2 = 2.978E-1
GMW3 = 2.016E-3
GMW4 = 2.001E-2
  -- Inlet mass fractions
X2IN=Q2IN/QINN
X3IN=Q3IN/QINN
X4IN=Q4IN/QINN
X1IN=1.-X2IN-X3IN-X4IN
GMW = X1IN*GMW1+X2IN*GMW2+X3IN*GMW3+X4IN*GMW4
C2IN=X2IN*GMW2/GMW
C3IN=X3IN*GMW3/GMW
C4IN=X4IN*GMW4/GMW
C1IN=1.-C2IN-C3IN-C4IN
    >> GROUP 2. Transience; time-step specification
```

```
STEADY = T
    >> GROUP 3. X-direction grid specification
     _____
 CARTES = T; NX = 1
    >> GROUP 4. Y-direction grid specification
     _____
    >> GROUP 5. Z-direction grid specification
     _____
    >> GROUP 6. Body-fitted coordinates or grid distortion
     _____
 BFC = T
 GSET (D, NX, NY, NZ, LX, LY, LZ)
     ** Points **
GSET(P,A1,0.0,0.0,0.0)
 GSET(P,A2,0.0,LY1,0.0)
GSET(P,A3,0.0,LY,0.0)
GSET(P,B1,0.0,0.0,LZ1)
GSET(P, B2, 0.0, LY1, LZ1)
GSET(P,B3,0.0,LY,LZ1)
GSET(P,C1,0.0,0.0,LZ1+LZ2)
GSET (P, C2, 0.0, LY3, LZ1+LZ2)
GSET (P, C3, 0.0, LY3+LY4, LZ1+LZ2)
 GSET(P,C4,0.0,LY,LZ1+LZ2)
GSET(P, D1, 0.0, 0.0, LZ1+LZ2+LZ3)
GSET (P, 1A, 0.0, LYSCR, LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1B,0.0,LYSCR + LYSP,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET (P, 1C, 0.0, LYSCR + LYSP + LYHO, LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1D,0.0,LYSCR + 2*LYSP + LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1E,0.0,LYSCR + 2*LYSP + 2*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1F,0.0,LYSCR + 3*LYSP + 2*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1G,0.0,LYSCR + 3*LYSP + 3*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1H,0.0,LYSCR + 4*LYSP + 3*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,1I,0.0,LYSCR + 4*LYSP + 4*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P, D2, 0.0, LY3, LZ1+LZ2+LZ3)
GSET (P, D3, 0.0, LY3+LY4, LZ1+LZ2+LZ3)
GSET (P, D4, 0.0, LY, LZ1+LZ2+LZ3)
GSET(P,E1,0.0,0.0,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2A,0.0,LYSCR,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2B,0.0,LYSCR + LYSP,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2C,0.0,LYSCR + LYSP + LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2D,0.0,LYSCR + 2*LYSP + LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2E,0.0,LYSCR + 2*LYSP + 2*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2F,0.0,LYSCR + 3*LYSP + 2*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2G,0.0,LYSCR + 3*LYSP + 3*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2H,0.0,LYSCR + 4*LYSP + 3*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET(P,2I,0.0,LYSCR + 4*LYSP + 4*LYHO,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET (P, E2, 0.0, LY3, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET (P, E3, 0.0, LY3+LY4, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
GSET (P, E4, 0.0, LY, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4)
 GSET(P,F1,0.0,0.0,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
 GSET (P, F2, 0.0, LY7, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
 GSET (P, F3, 0.0, LY5, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
 GSET (P, F4, 0.0, LY6, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
 GSET (P, F5, 0.0, LY3, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
 GSET (P, F6, 0.0, LY3+LY4, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
```

```
GSET (P, F7, 0.0, LY, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5)
GSET (P,G1,0.0,0.0,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
GSET (P,G2,0.0,LY7,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
GSET (P,G3,0.0,LY5,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
GSET (P, G4, 0.0, LY6, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
GSET (P,G5,0.0,LY3,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
GSET (P,G6,0.0,LY3+LY4,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
GSET (P, G7, 0.0, LY, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6)
GSET (P, H1, 0.0, 0.0, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
GSET (P, H2, 0.0, LY7, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
GSET (P, H3, 0.0, LY5, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
GSET(P,H4,0.0,LY6,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
GSET(P,H5,0.0,LY3,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
GSET (P, H6, 0.0, LY3+LY4, LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
GSET(P,H7,0.0,LY,LZ1+LZ2+LZ3+LZ4+LZ5+LZ6+LZ7)
GSET(P, I1, 0.0, 0.0, LZ)
GSET(P, I2, 0.0, LY7, LZ)
GSET(P, I3, 0.0, LY5, LZ)
GSET(P, I4, 0.0, LY6, LZ)
GSET(P, I5, 0.0, LY3, LZ)
GSET (P, I6, 0.0, LY3+LY4, LZ)
GSET(P, I7, 0.0, LY, LZ)
    ** Lines **
GSET (L, A1A2, A1, A2, NYSCR+NSP*NYSP+NHO*NYHO, 1.2)
GSET (L, A2A3, A2, A3, NY4+NYREST, S1.2)
GSET(L, A1B1, A1, B1, NZ1, 1.0)
GSET(L, A2B2, A2, B2, NZ1, 1.0)
GSET(L, A3B3, A3, B3, NZ1, 1.0)
GSET (L, B1B2, B1, B2, NYSCR+NSP*NYSP+NHO*NYHO, 1.2)
GSET (L, B2B3, B2, B3, NY4+NYREST, S1.2)
GSET(L, B1C1, B1, C1, NZ2, 1.0)
GSET(L, B2C2, B2, C2, NZ2, 1.0)
GSET(L, B3C4, B3, C4, NZ2, 1.0)
GSET(L,C1C2,C1,C2,NYSCR+NSP*NYSP+NHO*NYHO,1.2)
GSET(L,C2C3,C2,C3,NY4,1.0)
GSET(L,C3C4,C3,C4,NYREST,S1.2)
GSET(L,C1D1,C1,D1,NZ3,1.0)
GSET(L,C2D2,C2,D2,NZ3,1.0)
GSET(L,C3D3,C3,D3,NZ3,1.0)
GSET(L,C4D4,C4,D4,NZ3,1.0)
GSET(L, D11A, D1, 1A, NYSCR, 1.0)
GSET (L, 1A1B, 1A, 1B, NYSP, 1.0)
GSET (L, 1B1C, 1B, 1C, NYHO, 1.0)
GSET(L,1C1D,1C,1D,NYSP,1.0)
GSET (L, 1D1E, 1D, 1E, NYHO, 1.0)
GSET(L, 1E1F, 1E, 1F, NYSP, 1.0)
GSET (L, 1F1G, 1F, 1G, NYHO, 1.0)
GSET (L, 1G1H, 1G, 1H, NYSP, 1.0)
GSET (L, 1H1I, 1H, 1I, NYHO, 1.0)
GSET(L, 1ID2, 1I, D2, NYSP, 1.0)
GSET(L, D2D3, D2, D3, NY4, 1.0)
GSET (L, D3D4, D3, D4, NYREST, S1.2)
```

GSET(L, D1E1, D1, E1, NZ4, 1.0) GSET(L, 1A2A, 1A, 2A, NZ4, 1.0) GSET(L, 1B2B, 1B, 2B, NZ4, 1.0) GSET(L, 1C2C, 1C, 2C, NZ4, 1.0) GSET(L, 1D2D, 1D, 2D, NZ4, 1.0) GSET(L, 1E2E, 1E, 2E, NZ4, 1.0) GSET(L, 1F2F, 1F, 2F, NZ4, 1.0) GSET(L, 1G2G, 1G, 2G, NZ4, 1.0) GSET (L, 1H2H, 1H, 2H, NZ4, 1.0) GSET(L,1I2I,1I,2I,NZ4,1.0) GSET(L, D2E2, D2, E2, NZ4, 1.0) GSET(L, D3E3, D3, E3, NZ4, 1.0) GSET(L, D4E4, D4, E4, NZ4, 1.0) GSET(L, E12A, E1, 2A, NYSCR, 1.0) GSET(L, 2A2B, 2A, 2B, NYSP, 1.0) GSET(L,2B2C,2B,2C,NYHO,1.0) GSET(L, 2C2D, 2C, 2D, NYSP, 1.0) GSET(L, 2D2E, 2D, 2E, NYHO, 1.0) GSET(L,2E2F,2E,2F,NYSP,1.0) GSET(L, 2F2G, 2F, 2G, NYHO, 1.0) GSET(L, 2G2H, 2G, 2H, NYSP, 1.0) GSET(L,2H2I,2H,2I,NYHO,1.0) GSET(L,2IE2,2I,E2,NYSP,1.0) GSET(L, E2E3, E2, E3, NY4, 1.0) GSET(L, E3E4, E3, E4, NYREST, S1.2) GSET(L, E1F1, E1, F1, NZ5, 1.0) GSET(L, E2F5, E2, F5, NZ5, 1.0) GSET(L,E3F6,E3,F6,NZ5,1.0) GSET(L, E4F7, E4, F7, NZ5, 1.0) GSET(L, F1F2, F1, F2, NY7, 1.0) GSET(L, F2F3, F2, F3, NY5-NY7, 1.0) GSET(L, F3F4, F3, F4, NY6-NY5, 1.0) GSET (L, F4F5, F4, F5, NY3-NY6, 1.0) GSET(L, F5F6, F5, F6, NY4, 1.0) GSET(L, F6F7, F6, F7, NYREST, S1.2) GSET(L, F1G1, F1, G1, NZ6, -1.2) GSET(L, F2G2, F2, G2, NZ6, -1.2) GSET(L, F3G3, F3, G3, NZ6, -1.2) GSET(L, F4G4, F4, G4, NZ6, -1.2) GSET(L, F5G5, F5, G5, NZ6, -1.2) GSET(L, F6G6, F6, G6, NZ6, -1.2) GSET(L, F7G7, F7, G7, NZ6, -1.2) GSET(L,G1G2,G1,G2,NY7,1.0) GSET(L,G2G3,G2,G3,NY5-NY7,1.0) GSET(L,G3G4,G3,G4,NY6-NY5,1.0) GSET(L,G4G5,G4,G5,NY3-NY6,1.0) GSET(L,G5G6,G5,G6,NY4,1.0) GSET(L,G6G7,G6,G7,NYREST,S1.2) GSET(L,G1H1,G1,H1,NZ7,1.0) GSET(L,G2H2,G2,H2,NZ7,1.0) GSET(L,G3H3,G3,H3,NZ7,1.0) GSET(L,G4H4,G4,H4,NZ7,1.0) GSET(L,G5H5,G5,H5,NZ7,1.0) GSET(L,G6H6,G6,H6,NZ7,1.0) GSET(L,G7H7,G7,H7,NZ7,1.0)

GSET(L, H1H2, H1, H2, NY7, 1.0)

```
GSET(L, H2H3, H2, H3, NY5-NY7, 1.0)
 GSET (L, H3H4, H3, H4, NY6-NY5, 1.0)
 GSET(L, H4H5, H4, H5, NY3-NY6, 1.0)
 GSET(L, H5H6, H5, H6, NY4, 1.0)
 GSET (L, H6H7, H6, H7, NYREST, S1.2)
 GSET(L, H1I1, H1, I1, NZ8, 1.0)
 GSET(L, H2I2, H2, I2, NZ8, 1.0)
 GSET(L, H3I3, H3, I3, NZ8, 1.0)
 GSET(L, H4I4, H4, I4, NZ8, 1.0)
 GSET(L, H5I5, H5, I5, NZ8, 1.0)
 GSET(L, H6I6, H6, I6, NZ8, 1.0)
 GSET(L, H7I7, H7, I7, NZ8, 1.0)
 GSET(L, I112, I1, I2, NY7, 1.0)
 GSET(L, I2I3, I2, I3, NY5-NY7, 1.0)
 GSET(L, I3I4, I3, I4, NY6-NY5, 1.0)
 GSET(L, I4I5, I4, I5, NY3-NY6, 1.0)
 GSET(L, I5I6, I5, I6, NY4, 1.0)
 GSET(L, 1617, 16, 17, NYREST, S1.2)
      ** Frames **
 GSET(F,F1,A1,-,A2,-,B2,-,B1,-)
 GSET (F, F2, A2, -, A3, -, B3, -, B2, -)
 GSET(F,F3,B1,-,B2,-,C2,-,C1,-)
 GSET(F,F4,B2,-,B3,-,C4,C3,C2,-)
 GSET(F,F5,C1,-,C2,-,D2,1I.1H.$
1G.1F.1E.1D.1C.1B.1A, D1, -)
 GSET(F, F6, C2, -, C3, -, D3, -, D2, -)
 GSET (F, F7, C3, -, C4, -, D4, -, D3, -)
GSET (F, FSCR, D1, -, 1A, -, 2A, -, E1, -)
GSET (F, FSP1, 1A, -, 1B, -, 2B, -, 2A, -)
GSET(F, FHO1, 1B, -, 1C, -, 2C, -, 2B, -)
GSET(F,FSP2,1C,-,1D,-,2D,-,2C,-)
GSET(F, FHO2, 1D, -, 1E, -, 2E, -, 2D, -)
GSET (F, FSP3, 1E, -, 1F, -, 2F, -, 2E, -)
GSET(F, FHO3, 1F, -, 1G, -, 2G, -, 2F, -)
GSET (F, FSP4, 1G, -, 1H, -, 2H, -, 2G, -)
GSET (F, FHO4, 1H, -, 1I, -, 2I, -, 2H, -)
 GSET(F,FSP5,1I,-,D2,-,E2,-,2I,-)
 GSET(F, F8, D2, -, D3, -, E3, -, E2, -)
 GSET(F,F9,D3,-,D4,-,E4,-,E3,-)
 GSET (F, F10, E1, 2A.2B.2C.2D.2E.2F.2G.2H.$
2I, E2, -, F5, F4.F3.F2, F1, -)
 GSET(F,F11,E2,-,E3,-,F6,-,F5,-)
 GSET (F, F12, E3, -, E4, -, F7, -, F6, -)
 GSET (F, F13, F1, -, F2, -, G2, -, G1, -)
 GSET (F, F14, F2, -, F3, -, G3, -, G2, -)
 GSET(F,F15,F3,-,F4,-,G4,-,G3,-)
 GSET(F,F16,F4,-,F5,-,G5,-,G4,-)
 GSET(F, F17, F5, -, F6, -, G6, -, G5, -)
 GSET(F,F18,F6,-,F7,-,G7,-,G6,-)
 GSET (F, F19, G1, -, G2, -, H2, -, H1, -)
 GSET (F, F20, G2, -, G3, -, H3, -, H2, -)
 GSET (F, F21, G3, -, G4, -, H4, -, H3, -)
 GSET(F,F22,G4,-,G5,-,H5,-,H4,-)
 GSET (F, F23, G5, -, G6, -, H6, -, H5, -)
```

```
GSET (F, F24, G6, -, G7, -, H7, -, H6, -)
 GSET (F, F25, H1, -, H2, -, I2, -, I1, -)
 GSET(F,F26,H2,-,H3,-,I3,-,I2,-)
 GSET(F, F27, H3, -, H4, -, I4, -, I3, -)
 GSET (F, F28, H4, -, H5, -, I5, -, I4, -)
 GSET (F, F29, H5, -, H6, -, I6, -, I5, -)
 GSET (F, F30, H6, -, H7, -, I7, -, I6, -)
      ** Grid on frames **
 GSET (M, F1, +J+K, 1, 1, 1)
 GSET (M, F2, +J+K, 1, NY3+1, 1)
 GSET (M, F3, +J+K, 1, 1, NZ1+1)
 GSET (M, F4, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+1)
 GSET (M, F5, +J+K, 1, 1, NZ1+NZ2+1)
 GSET (M, F6, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+NZ2+1)
 GSET (M, F7, +J+K, 1, NY3+NY4+1, NZ1+NZ2+1)
 GSET (M, FSCR, +J+K, 1, 1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FSP1, +J+K, 1, NYSCR+1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FHO1, +J+K, 1, NYSCR+NYSP+1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FSP2, +J+K, 1, NYSCR+NYSP+NYHO+1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FHO2, +J+K, 1, NYSCR+2*NYSP+NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FSP3, +J+K, 1, NYSCR+2*NYSP+2*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FHO3, +J+K, 1, NYSCR+3*NYSP+2*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FSP4, +J+K, 1, NYSCR+3*NYSP+3*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FHO4, +J+K, 1, NYSCR+4*NYSP+3*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, FSP5, +J+K, 1, NYSCR+4*NYSP+4*NYHO+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, F8, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, F9, +J+K, 1, NY3+NY4+1, NZ1+NZ2+NZ3+1)
 GSET (M, F10, +J+K, 1, 1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1)
 GSET (M, F11, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1)
 GSET (M, F12, +J+K, 1, NY3+NY4+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1)
 GSET (M, F13, +J+K, 1, 1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F14, +J+K, 1, NY7+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F15, +J+K, 1, NY5+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F16, +J+K, 1, NY6+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F17, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F18, +J+K, 1, NY3+NY4+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1)
 GSET (M, F19, +J+K, 1, 1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET (M, F20, +J+K, 1, NY7+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET (M, F21, +J+K, 1, NY5+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET (M, F22, +J+K, 1, NY6+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET (M, F23, +J+K, 1, NY3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET (M, F24, +J+K, 1, NY3+NY4+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1)
 GSET (M, F25, +J+K, 1, 1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
 GSET (M, F26, +J+K, 1, NY7+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
 GSET (M, F27, +J+K, 1, NY5+1, $
```

```
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
 GSET (M, F28, +J+K, 1, NY6+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
 GSET (M, F29, +J+K, 1, NY3+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
 GSET (M, F30, +J+K, 1, NY3+NY4+1, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1)
     ** Copy grid from x=0 to x=1 **
 GSET(C, I2, F, I1, +, LX, 0.0, 0.0)
     >> GROUP 7. Variables stored, solved & named
     _____
 ONEPHS = T
    ** U1 -> x
    ** V1 -> y
    ** W1 -> z
    ** Non-default variable names **
 NAME(16)=S1
 NAME (17) = S177
 NAME(18)=S80
 NAME (19) = S97
 NAME (144) =BLOK
 NAME(145) = TEM1 ; NAME(146) = DEPO
 NAME(147) = PRPS ; NAME(148) = ENUL
 NAME(149) = RHO1 ; NAME(150) = EMIS
     ** Solved variables list **
 SOLVE(P1, V1, W1, TEM1)
 SOLVE(S177, S80, S97)
     ** Stored variables list **
 STORE (EMIS, RHO1, ENUL, PRPS, DEPO, BLOK)
 STORE (S1)
 STORE (FR01, FR02, FR03, FR04)
     ** Additional solver options **
 SOLUTN(P1, Y,Y,Y,N,N,Y)
 SOLUTN(V1, Y,Y,N,N,N,Y)
 SOLUTN(W1, Y,Y,N,N,N,Y)
 SOLUTN(TEM1,Y,Y,Y,N,N,Y)
 SOLUTN(S177,Y,Y,Y,N,N,Y)
 SOLUTN(S80, Y,Y,Y,N,N,Y)
 SOLUTN(S97, Y,Y,Y,N,N,Y)
 SOLUTN(TEM1,Y,Y,Y,N,N,Y)
 IVARBK = -1; ISOLBK = 1
     >> GROUP 8. Terms (in differential equations) & devices
     _____
 DIFCUT = 0.00000E+00
 NEWRH1 = F
 NEWENL =
            F
 ISOLX = 0; ISOLY = 0; ISOLZ = 0
     ** DIffusion Coefficients **
 UDIFF=T
     ** Soret Thermal Diffusion **
 UDIFNE = T
 USOURC = T
```

TERMS (P1 ,Y,Y,Y,N,Y,Y) TERMS (V1 , Y, Y, Y, Y, Y, Y) TERMS (W1 , Y, Y, Y, Y, Y, Y) TERMS (S177, N, Y, Y, Y, Y, Y) TERMS (S80 , N, Y, Y, Y, Y, Y) TERMS (S97 , N, Y, Y, Y, Y, Y) TERMS (S1 , N, Y, Y, Y, Y, Y) TERMS (TEM1, N, Y, Y, Y, Y, Y) >> GROUP 9. Properties of the medium (or media) PRESSO = PREACT ** Mixture density in TIN, PREACT (in kg/m3) - Ideal Gas Law RHOIN = (PRESS0*GMW/(8.31441*TIN))** Sutherland's law for H2 viscosity (Pa*s) VISCREF=8.35E-06*((83.+273.)/(83.+TREF))*((TREF/273.)**1.5) ** reference density DENREF = (PRESSO*GMW/(8.31441*TREF)) = GRND8 RHO1 = GRND8 CP1 = GRND8; ENUT = 0.000000E+00 ENUL PRNDTL (S177) =-GRND8 PRNDTL (S80) =-GRND8 PRNDTL (S97) =-GRND8 PRNDTL(S1) =-GRND8 PRNDTL(TEM1) = -GRND8PRLH1A = 0.000000E+00 ; PRLH1B = 0.000000E+00 PRLH1C = 0.00000E+00* List of user-defined materials to be read by EARTH MATFLG=T; IMAT=1 * Name *Ind. Dens. Viscos. Spec.heat Conduct. Expans. Compr. * <GAS MIXTURE> 70 GRND8 GRND8 GRND8 GRND8 1.000 0.000 * constants for GRND option no 1 0 0 * constants for GRND option no 2 0 0 constants for GRND option no 3 0 0 constants for GRND option no 4 0 0 >> GROUP 10. Inter-phase-transfer processes and properties _____ >> GROUP 11. Initialization of variable or porosity fields _____ FIINIT(BLOK) = 1.000000E+00FIINIT(PRPS) = 7.000000E+01FIINIT (TEM1) = TREF FIINIT(V1) = 1.E-06; FIINIT(W1) = 1.E-0FIINIT (S177) =C2IN FIINIT(S80)=C3IN FIINIT(S97) = 1.e - 4CONPOR (ELASMA, 0.00, NORTH, 1, NX, NY3, NY3, 1, NZ1+NZ2) INIT (ELASMA, BLOK, 0.000000E+00, 2.000000E+00)

INIT (ELASMA, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) ** Screw at the center of showerhead ** CONPOR(SCR, 0.00, CELL, 1, NX, 1, NYSCR, NZ1+NZ2+NZ3+1, \$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4)INIT (SCR, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT (SCR, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) ** Spaces between showerhead holes ** CONPOR(HSP1,0.00,CELL,1,NX,NYSCR+1,NYSCR+NYSP,\$ NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT(HSP1, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(HSP1, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) CONPOR(HSP2,0.00,CELL,1,NX,NYSCR+NYSP+NYHO+1,\$ NYSCR+2*NYSP+NYHO, NZ1+NZ2+NZ3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT(HSP2, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(HSP2, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) CONPOR (HSP3, 0.00, CELL, 1, NX, NYSCR+2*NYSP+2*NYHO+1, \$ NYSCR+3*NYSP+2*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT(HSP3, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(HSP3, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) CONPOR(HSP4,0.00,CELL,1,NX,NYSCR+3*NYSP+3*NYHO+1,\$ NYSCR+4*NYSP+3*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT(HSP4, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(HSP4, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) CONPOR(HSP5,0.00,CELL,1,NX,NYSCR+4*NYSP+4*NYHO+1,\$ NYSCR+5*NYSP+4*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4) INIT(HSP5, BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(HSP5, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) ** Wall at the end of showerhead ** CONPOR (BL2, 0.00, CELL, 1, NX, NY3+1, NY3+NY4, \$ NZ1+NZ2+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5) INIT(BL2,BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT (BL2, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) ** Below wafer ** CONPOR (BL1, 0.00, CELL, 1, NX, 1, NY6, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+\$ NZ5+NZ6+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7) INIT(BL1,BLOK, 0.000000E+00, 3.000000E+00) INIT(BL1, PRPS, 0.000000E+00, 1.980000E+02) ** Wafer ** CONPOR(WAFER,0.00,CELL,1,NX,1,NY5,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+1) INIT (WAFER, BLOK, 0.000000E+00, 4.000000E+00) INIT(WAFER, PRPS, 0.000000E+00, 1.110000E+02) CONPOR(SUSC, 0.00, CELL, 1, NX, 1, NY7, \$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1,NZ) INIT(SUSC,BLOK, 0.000000E+00, 5.000000E+00) INIT (SUSC, PRPS, 0.000000E+00, 1.110000E+02) INIADD = F>> GROUP 12. Patchwise adjustment of terms (in differential equations) No PATCHes used for this Group

```
>> GROUP 13. Boundary conditions and special sources
     _____
     ** Total inlet velocity (in m/s) **
 AREAIN = PI^*(LY1^{**2.})
 UAVER = QIN/AREAIN
     ** mass flux in TIN, PREACT (in kg/s) **
 MASFLUX = RHOIN*UAVER
 INLET (INLET, LOW, 1, NX, 1, NY3, 1, 1, 1, LSTEP)
 VALUE (INLET, P1, MASFLUX)
 VALUE (INLET, W1, UAVER)
 VALUE (INLET, S1, C1IN)
 VALUE (INLET, S177, C2IN)
 VALUE (INLET, S80, C3IN)
 VALUE (INLET, S97, C4IN)
 VALUE (INLET, TEM1, TIN)
 PATCH (OUT, HIGH, 1, NX, NY7, NY, NZ, NZ, 1, LSTEP)
 COVAL (OUT, P1, FIXP, 0.000000E+00)
 COVAL (OUT, S1, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, S177, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, S80, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, S97, ONLYMS, 0.0)
 COVAL (OUT, TEM1, 0.000000E+00, SAME)
     ** Reactor walls **
 PATCH (WALL1, LWALL, 1, NX, NY3+1, NY, 1, 1, 1, LSTEP)
 COVAL (WALL1,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
COVAL (WALL1,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
COVAL (WALL1,TEM1, GRND2, TWALL)
 PATCH (WALL2, NWALL, 1, NX, NY, NY, 1, NZ, 1, LSTEP)
 COVAL (WALL2,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
                  , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WALL2,W1
 COVAL (WALL2, TEM1, GRND2, TWALL)
     ** BL1 walls **
     ** Heated plate at the position of the substrate **
 PATCH (WAFET, HIGH, 1, NX, 1, NY5, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,1,LSTEP)
 COVAL (WAFET, TEM1, FIXVAL, TREACT)
PATCH (WALL3, HWALL, 1, NX, NY5+1, NY6, $
NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,1,LSTEP)
 COVAL (WALL3,V1 , GRND2, 0.00000E+00)
 COVAL (WALL3,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WALL3, TEM1, GRND2, TWALL)
 PATCH (WALL4, SWALL, 1, NX, NY6+1, NY6+1, NZ1+NZ2+NZ3+$
NZ4+NZ5+NZ6+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7,1,LSTEP)
 COVAL (WALL4,V1 , GRND2, 0.00000E+00)
 COVAL (WALL4,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WALL4, TEM1, GRND2, TWALL)
 PATCH (WALL5, LWALL, 1, NX, NY7+1, NY6, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+$
NZ5+NZ6+NZ7+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1,1,LSTEP)
 COVAL (WALL5,V1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WALL5,W1 , GRND2, 0.000000E+00)
 COVAL (WALL5, TEM1, GRND2, TWALL)
     ** Succeptor walls **
 PATCH (WALL6, SWALL, 1, NX, NY7+1, NY7+1, $
```

NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6+NZ7+1,NZ,1,LSTEP) COVAL (WALL6,V1 , GRND2, 0.00000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WALL6,W1 COVAL (WALL6, TEM1, GRND2, TWALL) ** Showerhead ** ** Screw walls ** PATCH (WSCR1, HWALL, 1, NX, 1, NYSCR, \$ NZ1+NZ2+NZ3, NZ1+NZ2+NZ3, 1, LSTEP) COVAL (WSCR1,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSCR1,W1 COVAL (WSCR1, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSCR2, SWALL, 1, NX, NYSCR+1, NYSCR+1, \$ NZ1+NZ2+NZ3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4, 1, LSTEP) COVAL (WSCR2,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSCR2,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSCR2, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSCR3, LWALL, 1, NX, 1, NYSCR, \$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSCR3,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSCR3,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSCR3, TEM1, GRND2, TWALL) ** 1st Space walls ** PATCH (WSP11, HWALL, 1, NX, NYSCR+1, NYSCR+NYSP, \$ NZ1+NZ2+NZ3,NZ1+NZ2+NZ3,1,LSTEP) COVAL (WSP11,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP11,W1 , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WSP11, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP12, SWALL, 1, NX, NYSCR+NYSP+1, NYSCR+NYSP+1, \$ NZ1+NZ2+NZ3+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4, 1, LSTEP) COVAL (WSP12,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WSP12,W1 COVAL (WSP12, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP13, LWALL, 1, NX, NYSCR+1, NYSCR+NYSP, \$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSP13,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP13,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP13, TEM1, GRND2, TWALL) ** 2nd Space walls ** PATCH (WSP21, HWALL, 1, NX, NYSCR+NYSP+NYHO+1, \$ NYSCR+2*NYSP+NYHO,NZ1+NZ2+NZ3,NZ1+NZ2+NZ3,1,LSTEP) COVAL (WSP21,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP21,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP21, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP22, SWALL, 1, NX, NYSCR+2*NYSP+NYHO+1, \$ NYSCR+2*NYSP+NYHO+1,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP22,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP22,W1 COVAL (WSP22, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP23, LWALL, 1, NX, NYSCR+NYSP+NYHO+1, \$ NYSCR+2*NYSP+NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSP23,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP23,W1 , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WSP23, TEM1, GRND2, TWALL)

PATCH (WSP24, NWALL, 1, NX, NYSCR+NYSP+NYHO, NYSCR+NYSP+NYHO, \$ NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP24,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP24,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP24, TEM1, GRND2, TWALL) ** 3rd Space walls ** PATCH (WSP31, HWALL, 1, NX, NYSCR+2*NYSP+2*NYHO+1, \$ NYSCR+3*NYSP+2*NYHO, NZ1+NZ2+NZ3, NZ1+NZ2+NZ3, 1, LSTEP) COVAL (WSP31,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WSP31,W1 COVAL (WSP31, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP32, SWALL, 1, NX, NYSCR+3*NYSP+2*NYHO+1, \$ NYSCR+3*NYSP+2*NYHO+1,NZ1+NZ2+NZ3+1,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP32,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP32,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP32, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP33, LWALL, 1, NX, NYSCR+2*NYSP+2*NYHO+1, \$ NYSCR+3*NYSP+2*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSP33,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP33,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP33, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP34, NWALL, 1, NX, NYSCR+2*NYSP+2*NYHO, \$ NYSCR+2*NYSP+2*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP34,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP34,W1 COVAL (WSP34, TEM1, GRND2, TWALL) ** 4th Space walls ** PATCH (WSP41, HWALL, 1, NX, NYSCR+3*NYSP+3*NYHO+1, \$ NYSCR+4*NYSP+3*NYHO,NZ1+NZ2+NZ3,NZ1+NZ2+NZ3,1,LSTEP) COVAL (WSP41,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP41,W1 COVAL (WSP41, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP42, SWALL, 1, NX, NYSCR+4*NYSP+3*NYHO+1, \$ NYSCR+4*NYSP+3*NYHO+1,NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP42,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP42,W1 COVAL (WSP42, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP43,LWALL,1,NX,NYSCR+3*NYSP+3*NYHO+1,NYSCR+4*NYSP+3*NYHO,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSP43,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP43,W1 COVAL (WSP43, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP44,NWALL,1,NX,NYSCR+3*NYSP+3*NYHO,NYSCR+3*NYSP+3*NYHO,\$ NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP44,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP44,W1 COVAL (WSP44, TEM1, GRND2, TWALL) ** 5th Space walls ** PATCH (WSP51, HWALL, 1, NX, NYSCR+4*NYSP+4*NYHO+1, NYSCR+5*NYSP+4*NYHO, \$ NZ1+NZ2+NZ3, NZ1+NZ2+NZ3, 1, LSTEP) COVAL (WSP51,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP51,W1 , GRND2, 0.000000E+00)

COVAL (WSP51, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP53,LWALL,1,NX,NYSCR+4*NYSP+4*NYHO+1,NYSCR+5*NYSP+4*NYHO,\$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+1,1,LSTEP) COVAL (WSP53,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP53,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP53, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WSP54,NWALL,1,NX,NYSCR+4*NYSP+4*NYHO,NYSCR+4*NYSP+4*NYHO,\$ NZ1+NZ2+NZ3+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4,1,LSTEP) COVAL (WSP54,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP54,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WSP54, TEM1, GRND2, TWALL) ** BL2 walls ** PATCH (WAL71, HWALL, 1, NX, NY3+1, NY3+NY4, NZ1+NZ2, NZ1+NZ2, 1, LSTEP) COVAL (WAL71,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WAL71,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WAL71, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WAL72, SWALL, 1, NX, NY3+NY4+1, NY3+NY4+1, \$ NZ1+NZ2+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5, 1, LSTEP) COVAL (WAL72,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WAL72,W1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WAL72, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WAL73, LWALL, 1, NX, NY3+1, NY3+NY4, \$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+1,1,LSTEP) COVAL (WAL73,V1 , GRND2, 0.000000E+00) COVAL (WAL73,W1 , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WAL73, TEM1, GRND2, TWALL) PATCH (WAL74, NWALL, 1, NX, NY3, NY3, \$ NZ1+NZ2+1, NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5, 1, LSTEP) COVAL (WAL74,V1 , GRND2, 0.000000E+00) , GRND2, 0.00000E+00) COVAL (WAL74,W1 COVAL (WAL74, TEM1, GRND2, TWALL) Reaction PATCH (SURF01, HIGH, 1, NX, 1, NY5, \$ NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,NZ1+NZ2+NZ3+NZ4+NZ5+NZ6,1,LSTEP) COVAL(SURF01, P1, 1.000000E+00, GRND1) COVAL(SURF01,S1, FIXFLU, GRND1) COVAL(SURF01, S80, FIXFLU, GRND1) COVAL (SURF01, S177, FIXFLU, GRND1) COVAL(SURF01, S97, FIXFLU, GRND1) COVAL (SURF01, TEM1, FIXFLU, GRND1) SURF01=SKIP _____ -- Buoyancy terms _____ BUOYC = 9.81BUOYD = DENREF PATCH (BUOY, PHASEM, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP) COVAL (BUOY, W1, FIXFLU, DENSDIFF) BUOY=SKIP PATCH (RELT, PHASEM, 1, NX, 1, NY, 1, NZ, 1, LSTEP) COVAL (RELT, S177, GRND1, SAME) COVAL (RELT, S97, GRND1, SAME) COVAL (RELT, S80, GRND1, SAME)

COVAL (RELT, S1, GRND1, SAME) >> GROUP 14. Downstream pressure for PARAB=.TRUE. _____ >> GROUP 15. Termination of sweeps _____ LSWEEP = 80000TSTSWP = -2RESTRT (ALL) SELREF = TRESFAC = 1.E-3>> GROUP 16. Termination of iterations ------USOLVE=F LITER(P1)=200; LITER(S1)=200 LITER(S177)=200; LITER(S80)=200; LITER(S97)=200 LITER (TEM1) =200 ENDIT(P1)=1.E-12 ENDIT(S1)=GRND1; ENDIT(S177)=GRND1; ENDIT(S97)=GRND1; ENDIT(S80)=GRND1 ENDIT (TEM1) = GRND1 >> GROUP 17. Under-relaxation devices _____ RELAX(P1 ,LINRLX, 5.0E-01) ,FALSDT, 8.0E-01) RELAX (V1 RELAX(W1 ,FALSDT, 8.0E-01) ,FALSDT, 1.0E+02) RELAX(S1 RELAX (S177, FALSDT, 1.0E+02) RELAX(S80,FALSDT, 1.0E+02) RELAX(S97, FALSDT, 1.0E+02) RELAX (TEM1, LINRLX, 5.0E-01) >> GROUP 18. Limits on variables or increments to them -----------VARMAX(V1) = 1.000000E+06; VARMIN(V1) =-1.000000E+06 VARMAX(W1) = 1.000000E+06 ;VARMIN(W1) =-1.000000E+06 VARMAX(S177)=1.000000E+00; VARMIN(S177)=1.000000E-20 VARMAX(S97)=1.000000E+00; VARMIN(S97)=1.000000E-20 VARMAX(S80)=1.000000E+00; VARMIN(S80)=1.000000E-20 VARMAX(TEM1) = 3.000000E+03 ;VARMIN(TEM1) = 2.600000E+02 >> GROUP 19. Data communicated by satellite to GROUND NAMGRD = CVDCSG10 = 'Q1' SPEDAT (SET, CVD, MCDOPT, I, 2) SPEDAT(SET, CVD, SMRLX, R, 1.E-2) SPEDAT (SET, CVD, BINOPT, I, 4) SPEDAT (SET, CVD, MCPROP, I, 3) SPEDAT (SET, CVD, CHMRLX, R, 5.00000E-02) ** Thermal diffusion ** SPEDAT (SET, CVD, THMDIF, L, T) SPEDAT (SET, CVD, THMOPT, I, 1) SPEDAT (SET, CVD, THMFRQ, I, 3) ** Reaction ** SPEDAT (SET, CVD, NSREAC, I, 1) SPEDAT (SET, CVD, SREAC(1), I, 17) SPEDAT (SET, CVD, XMIR, L, F) SPEDAT (SET, CVD, YMIR, L, F)

```
SPEDAT (SET, CVD, ZMIR, L, F)
 SPEDAT (SET, CVD, AXIBFC, L, F)
 SPEDAT (SET, CVD, NOSPCT, L, F)
 SPEDAT (SET, CVD, FINE3D, L, F)
 SPEDAT (SET, CVD, VFNORM, L, T)
 SPEDAT (SET, CVD, NUMRAY, I, 1)
  _____
 --- Dimensionless groups
 _____
    REYNOLDS
LENGTH = 0.8
UAV = QIN / (PI*(LENGTH**2.))
RE = DENREF*UAV*LENGTH/VISCREF
    GAY-LUSSAC
GA = (TREACT-TWALL) / TREF
    GRASHOF
GR = (GAC*(DENREF**2.)*(LENGTH**3.)*(TREACT-TWALL))/((VISCREF**2.)*$
TREF)
    >> GROUP 20. Preliminary print-out
    _____
ECHO = T
    >> GROUP 21. Print-out of variables
    _____
    >> GROUP 22. Spot-value print-out
    _____
 IXMON=1; IYMON=NYM; IZMON=NZM
    >> GROUP 23. Field print-out and plot control
    _____
                           _____
    No PATCHes used for this Group
    >> GROUP 24. Dumps for restarts
    _____
NPLT=2
 ITABL=3
UWATCH=F
YPLS=T
      SEEPTS(0.0,0.0,0.0,23.E-3,0.0,270.E-3)
    ** Variables displayed in Satellite **
LSWEEP
TSTSWP
XULAST
YVLAST
ZWLAST
UAVER
STOP
```