



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Χημικών Μηχανικών

ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ ΣΤΗΝ
ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ

**Προσομοίωση ροής SiH₄ σε αντιδραστήρα πλάσματος
χημικής απόθεσης ατμών
(Plasma CVD Reactor)**

Μεταπτυχιακή φοιτήτρια: Τσακουμάκη Μαρία
Αριθμός Μητρώου: 52121017

Επιβλέπων Καθηγητής: Ν. Μαρκάτος

ΑΘΗΝΑ, 2023

ΣΚΟΠΟΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ

Σκοπός της μεταπτυχιακής αυτής εργασίας είναι η προσομοίωση ενός αντιδραστήρα εναπόθεσης χημικών ατμών πλάσματος (PECVD) με ψυχρό τοίχωμα. Η διεργασία της χημικής απόθεσης από ατμό, αποτελεί μια εξελιγμένη τεχνική σύνθεσης υλικών που χρησιμοποιείται σε ένα ευρύ φάσμα βιομηχανιών, από την κατασκευή ημιαγωγών έως την παραγωγή προηγμένων επικαλύψεων και νανοϋλικών, με ιδιαίτερη πολυπλοκότητα.

Αυτή η εργασία προσδοκά να διερευνήσει τις διαδικασίες PECVD με στόχο την κατανόησή τους, την ενίσχυση της απόδοσης και της ποιότητας των παραγόμενων υλικών. Ειδικότερα, γίνεται μια μελέτη περίπτωσης της παραγωγής πολυκρυσταλλικής σιλικόνης σε θερμαινόμενο υπόστρωμα, χρησιμοποιώντας ένα αέριο μίγμα από N_2 και SiH_4 . Για την προσομοίωση, χρησιμοποιείται το λογισμικό Phoenics, με τη βοήθεια του οποίου δημιουργείται το χωρίο του αντιδραστήρα. Οι εξισώσεις διατήρησης της μάζας, της ορμής, της ενέργειας και των συστατικών του αερίου μίγματος διακριτοποιούνται με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου και επιλύονται σε ένα διδιάστατο καρτεσιανό πλέγμα σε συνθήκες μόνιμης κατάστασης και στρωτής ροής. Το μοντέλο μεταφοράς λαμβάνει υπόψη την εξάρτηση των φυσικών ιδιοτήτων από τη θερμοκρασία, την πίεση και τη σύσταση του αερίου μίγματος, την ακτινοβολία, την πολυσυστατική διάχυση και τη θερμική διάχυση. Τα απαιτούμενα δεδομένα χημικής κινητικής λαμβάνονται από τη βιβλιογραφία. Αναλύονται η ανεξαρτησία του πλέγματος και παρουσιάζονται οι κατανομές των θερμοκρασίας, πίεσης, ταχύτητας, και κλασμάτων μάζας των αντιδραστηρίων και των προϊόντων των χημικών αντιδράσεων που επηρεάζουν τη διαδικασία. Τέλος, πραγματοποιείται παραμετρική μελέτη ως προς την ταχύτητα εισόδου του ρευστού και τη θερμοκρασία του υποστρώματος που επηρεάζουν την διαδικασία εναπόθεσης.

Περιεχόμενα

ΣΚΟΠΟΣ ΕΡΓΑΣΙΑΣ	2
ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ	5
Μέθοδος Διεργασίας Χημικής Απόθεσης από Ατμό	5
Μέθοδος Διεργασίας Χημικής Απόθεσης από Ατμό Πλάσματος	7
Αντιδραστήρας Πλάσματος	9
Μαθηματικό Μοντέλο	12
Εξισώσεις φαινομένων μεταφοράς και διατήρησης μεγεθών	12
Συνοριακές Συνθήκες	13
2. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ	20
Μέθοδος πεπερασμένων όγκων ελέγχου	20
Σχήμα διαφοράσης	22
Λογισμικό Επίλυσης	23
Αλγόριθμοι SIMPLE και SIMPLEST	23
Υποχαλάρωση και κριτήρια σύγκλισης	24
Υπολογιστικό Μέρος	26
Ανεξαρτησία πλέγματος	26
Ισουψείς καμπύλες για τα διάφορα πλέγματα	33
Παραμετροποίηση πλέγματος 107x70	40
Θερμοκρασία	40
Ταχύτητα στον άξονα Y	42
Ταχύτητα Vz	43
Σιλάνιο S140	45
Αντιδρών S142	46
Ρυθμός Χημικής Απόθεσης	48
Κατανομή Πίεσης	49
Συμπεράσματα Παραμετρικής Ανάλυσης	55
Βιβλιογραφία	56
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ	57
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β	67

Εικόνα 1: Σχηματική αναπαράσταση αντιδραστήρα ατμού πλάσματος.....	11
Εικόνα 2 Ισοψείς καμπύλες θερμοκρασίας για τα πλέγματα 59x39,80x50,90x60,107x70,100x100 & 227x107	33
Εικόνα 3 Ισοψείς καμπύλες ταχύτητας στον Y άξονα για τα πλέγματα 59x39,80x50,90x60,107x70,100x100 & 227x107	34
Εικόνα 4 Ισοψείς καμπύλες ταχύτητας στον Z άξονα για τα πλέγματα 59x39,80x50,90x60,107x70,100x100 & 227x107	35
Εικόνα 5 Ισοψείς καμπύλες σιλανίου SiH ₄ για τα πλέγματα 59x39,80x50,90x60,107x70,100x100 & 227x107	36
Εικόνα 6 Ισοψείς καμπύλες αντιδρώντος S142 για τα πλέγματα 59x39,80x50,90x60,107x70,100x100 & 227x107	37
Εικόνα 7 Ισοψείς ρυθμού απόθεσης για τα πλέγματα 59x39,80x50,90x60,107x70,100x100 & 227x107.....	38
Εικόνα 8 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 2	40
Εικόνα 9 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 1	40
Εικόνα 10 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 3	40
Εικόνα 11 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 8	41
Εικόνα 12 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 9	41
Εικόνα 13 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 7	41
Εικόνα 14 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 5	41
Εικόνα 15 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 6	41
Εικόνα 16 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 4	41
Εικόνα 17 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vy για την περίπτωση 5	42
Εικόνα 18 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vy για την περίπτωση 4	42
Εικόνα 19 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vy για την περίπτωση 6	42
Εικόνα 20 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vy για την περίπτωση 3	42
Εικόνα 21 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vy για την περίπτωση 2	42
Εικόνα 22 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vy για την περίπτωση 1	42
Εικόνα 23 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vy για την περίπτωση 7	43
Εικόνα 24 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vy για την περίπτωση 8	43
Εικόνα 25 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vy για την περίπτωση 9	43
Εικόνα 26 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vz για την περίπτωση 1	43
Εικόνα 27 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vz για την περίπτωση 3	43
Εικόνα 28 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vz για την περίπτωση 2	43
Εικόνα 29 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vz για την περίπτωση 6	44
Εικόνα 30.....	44
Εικόνα 31 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας Vz για την περίπτωση 5	44
Πίνακας 1: Γεωμετρικά χαρακτηριστικά αντιδραστήρα ατμού πλάσματος.....	11
Πίνακας 2: Συντελεστές υποχαλάρωσης για τις διάφορες μεταβλητές.....	25
Πίνακας 3 Τιμές απόκλισης από το πιο πυκνό πλέγμα στο πιο αραιό για τους συντελεστές χαλάρωσης του Πίνακα 2	32
Πίνακας 4 Αποτελέσματα χρόνων σύγκλισης του κάθε πλέγματος κάνοντας χρήση των συντελεστών υποχαλάρωσης του Πίνακα 2	32

ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ

Μέθοδος Διεργασίας Χημικής Απόθεσης από Ατμό

Η χημική απόθεση από ατμό (CVD) είναι μια ευέλικτη και ευρέως χρησιμοποιούμενη τεχνική σύνθεσης υλικών στον τομέα της επιστήμης και της μηχανικής υλικών. Η CVD περιλαμβάνει την ελεγχόμενη εναπόθεση λεπτών μεμβρανών, επικαλύψεων ή νανοδομών σε μια επιφάνεια υποστρώματος μέσω της χημικής αντίδρασης αέριων πρόδρομων μορίων. Αυτή η διαδικασία λαμβάνει χώρα σε έναν εξειδικευμένο αντιδραστήρα ή θάλαμο υπό προσεκτικά ελεγχόμενες συνθήκες θερμοκρασίας, πίεσης και ρυθμών ροής αερίου.

Επιγραμματικά, τα βασικά στάδια της διεργασίας CVD είναι τα ακόλουθα:

Εισαγωγή προδρόμων αερίων: Η CVD ξεκινά με την εισαγωγή πρόδρομων αερίων στον θάλαμο αντίδρασης. Αυτά τα πρόδρομα αέρια αποτελούνται από χημικές ουσίες ή ενώσεις που περιέχουν τα στοιχεία που απαιτούνται για να σχηματιστεί το επιθυμητό υλικό.

Χημικές αντιδράσεις: Μέσα στο θάλαμο, τα πρόδρομα αέρια υφίστανται χημικές αντιδράσεις που προκαλούνται από θερμότητα ή άλλες πηγές ενέργειας. Αυτές οι αντιδράσεις έχουν ως αποτέλεσμα το σχηματισμό υλικών στερεάς φάσης. Οι αντιδράσεις έχουν σχεδιαστεί για να είναι θερμοδυναμικά ευνοϊκές και μπορεί να περιλαμβάνουν εναπόθεση, αποσύνθεση ή συνδυασμό χημικών διεργασιών.

Ανάπτυξη λεπτού φιλμ: Τα υλικά στερεάς φάσης που παράγονται από τις χημικές αντιδράσεις εναποτίθενται σε μια επιφάνεια υποστρώματος. Το υπόστρωμα μπορεί να ποικίλλει ευρέως και μπορεί να περιλαμβάνει πυρίτιο, γυαλί, μέταλλα ή άλλα υλικά, ανάλογα με την εφαρμογή.

Ελεγχόμενες παράμετροι: Ο ακριβής έλεγχος των παραμέτρων διεργασίας όπως η θερμοκρασία, η πίεση, οι ρυθμοί ροής αερίου και ο χρόνος αντίδρασης είναι κρίσιμος στη διεργασία CVD. Αυτές οι παράμετροι προσαρμόζονται για να διασφαλιστούν οι επιθυμητές ιδιότητες του υλικού και να ελέγχεται το πάχος και η ομοιομορφία του εναποτιθέμενου φιλμ (1).

Η CVD έχει τεράστια σημασία στη σφαίρα της επιστήμης και της μηχανικής των υλικών

για διάφορους λόγους. Επιτρέπει την ακριβή προσαρμογή των ιδιοτήτων του υλικού, συμπεριλαμβανομένης της σύνθεσης, της κρυσταλλικής δομής, του πάχους και των χαρακτηριστικών της επιφάνειας. Επιπλέον, επιτρέπει την παραγωγή υλικών με υψηλή καθαρότητα και εξαιρετική ομοιομορφία, καθιστώντας τα ιδανικά για την κατασκευή ημιαγωγών, οπτικές επιστρώσεις και προηγμένες ηλεκτρονικές συσκευές. Χρησιμοποιείται για την ανάπτυξη ενός ευρέως φάσματος υλικών, όπως ενεργειακά αποδοτικές επιστρώσεις, υλικά ηλιακών κυψελών και επιστρώσεις θερμικού φραγμού για τουρμπίνες, ακόμη και στη σύνθεση νανοδομών με μοναδικές ηλεκτρονικές, οπτικές και μηχανικές ιδιότητες. Επιπροσθέτως, παίζει κεντρικό ρόλο στην κατασκευή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων και μικροηλεκτρονικών συσκευών, όπου η ακριβής εναπόθεση υλικού είναι απαραίτητη. Η ευελιξία που αφορά το φάσμα υλικών που περιλαμβάνει αλλά και η δυνατότητα της διεργασίας αυτής να επεκτείνεται στην παραγωγή βιομηχανικής κλίμακας όσο και στις προσπάθειες έρευνας και ανάπτυξης, αποτελεί ένα ακόμη πλεονέκτημά της (1), (2).

Ωστόσο, παρά τα πολυάριθμα πλεονεκτήματά της, η CVD έχει ορισμένα μειονεκτήματα και προκλήσεις. Ένας σημαντικός περιορισμός είναι η πολυπλοκότητα της διαδικασίας, η οποία απαιτεί ακριβή έλεγχο σε διάφορες παραμέτρους, συμπεριλαμβανομένων της θερμοκρασίας, της πίεσης και του ρυθμού ροής αερίου. Η επίτευξη και η διατήρηση αυτών των συνθηκών μπορεί να είναι τεχνικά απαιτητική και να απαιτεί εξελιγμένο εξοπλισμό, οδηγώντας σε υψηλό κόστος εγκατάστασης και λειτουργίας. Επιπλέον, η CVD μπορεί να παράγει επικίνδυνα υποπροϊόντα, ιδιαίτερα όταν χρησιμοποιούνται τοξικά ή αντιδραστικά πρόδρομα αέρια, που απαιτούν αυστηρά μέτρα ασφαλείας και κατάλληλα πρωτόκολλα διάθεσης απορριμμάτων. Επιπλέον, η επιλογή των κατάλληλων πρόδρομων υλικών και ο χειρισμός τους μπορεί να είναι απαιτητική, καθώς ορισμένα μπορεί να είναι ακριβά ή να θέτουν κινδύνους για την υγεία και το περιβάλλον. Οι ρυθμοί ανάπτυξης των μεμβρανών στη CVD μπορεί να είναι σχετικά αργοί σε σύγκριση με άλλες μεθόδους εναπόθεσης, καθιστώντας το λιγότερο κατάλληλο για παραγωγή υψηλής απόδοσης. Τέλος, η CVD μπορεί να περιοριστεί ως προς τους τύπους των υλικών που μπορεί να εναποθέσει, και ορισμένα υλικά μπορεί να απαιτούν πολύπλοκες χημείες πρόδρομων ουσιών ή εξειδικευμένο εξοπλισμό, αυξάνοντας την πολυπλοκότητα και το κόστος της διαδικασίας (1).

Μέθοδος Διεργασίας Χημικής Απόθεσης από Ατμό Πλάσματος

Η εναπόθεση χημικών ατμών πλάσματος είναι μια παραλλαγή της παραδοσιακής διαδικασίας CVD που ενσωματώνει μια πηγή πλάσματος. Αυτή η τροποποίηση επιτρέπει την ακριβέστερη και ελεγχόμενη εναπόθεση υλικού, ιδιαίτερα για εφαρμογές που απαιτούν λεπτές μεμβράνες με συγκεκριμένες ιδιότητες. Ακολουθεί μια εξήγηση για το πώς λειτουργεί ένας αντιδραστήρας PECVD πλάσματος:

Ρύθμιση αντιδραστήρα: Ένας αντιδραστήρας PECVD πλάσματος αποτελείται από έναν θάλαμο αντίδρασης, συνήθως κατασκευασμένο από χαλαζία ή άλλο υλικό υψηλής θερμοκρασίας, εξοπλισμένο με θερμαντικά στοιχεία και συστήματα ψύξης. Ο θάλαμος εκκενώνεται για να δημιουργηθεί ένα περιβάλλον χαμηλής πίεσης και το υπόστρωμα όπου θα αποτεθεί το υλικό τοποθετείται μέσα.

Πρόδρομα αέρια: Αέριες πρόδρομες χημικές ουσίες εισάγονται στο θάλαμο του αντιδραστήρα. Αυτοί οι πρόδρομοι μπορεί να είναι οργανικές ή ανόργανες ενώσεις και περιέχουν τα απαραίτητα στοιχεία για την επιθυμητή εναπόθεση υλικού.

Δημιουργία πλάσματος: Η βασική διαφορά μεταξύ της τυπικής CVD και της PECVD είναι η εισαγωγή μιας πηγής πλάσματος. Μια πηγή πλάσματος παράγει ένα πλάσμα υψηλής ενέργειας, συνήθως χρησιμοποιώντας μία από τις ακόλουθες μεθόδους:

Πλάσμα ραδιοσυχνότητας (RF): Η ενέργεια ραδιοσυχνότητας εφαρμόζεται στο μείγμα αερίων για να δημιουργηθεί ένα πλάσμα. Αυτή η μέθοδος χρησιμοποιείται συχνά για διηλεκτρικά φιλμ και υλικά ημιαγωγών.

Πλάσμα μικροκυμάτων: Τα μικροκύματα χρησιμοποιούνται για να ιονίσουν το μείγμα αερίων και να δημιουργήσουν ένα πλάσμα. Αυτή η μέθοδος είναι αποτελεσματική για υλικά όπως το διαμάντι και οι νανοσωλήνες άνθρακα.

Πλάσμα συνεχούς ρεύματος (DC): Σε αυτή τη μέθοδο, χρησιμοποιείται συνεχές ρεύμα για τη διατήρηση του πλάσματος.

Ενεργοποίηση πλάσματος: Το παραγόμενο πλάσμα είναι εξαιρετικά ενεργητικό και περιέχει φορτισμένα ιόντα, ηλεκτρόνια και δραστικές ρίζες. Αυτά τα είδη έχουν υψηλή κινητική ενέργεια, επιτρέποντάς τους να αλληλεπιδρούν με τα πρόδρομα αέρια και να προάγουν χημικές αντιδράσεις. Η ενεργοποίηση του πλάσματος διασπά τα πρόδρομα

μόρια και ξεκινά το σχηματισμό υλικών στερεάς φάσης.

Ανάπτυξη λεπτού φιλμ: Τα ενεργοποιημένα πρόδρομα αέρια αντιδρούν στην επιφάνεια του υποστρώματος για να εναποθέσουν το επιθυμητό υλικό ως λεπτή μεμβράνη. Τα ενεργητικά είδη στο πλάσμα διασφαλίζουν ότι η διαδικασία εναπόθεσης πραγματοποιείται σε χαμηλότερες θερμοκρασίες και με μεγαλύτερη ακρίβεια σε σύγκριση με την παραδοσιακή. Η λεπτή μεμβράνη αναπτύσσεται στρώμα προς στρώμα καθώς εισάγονται περισσότερα πρόδρομα αέρια και αντιδρούν με το υπόστρωμα.

Παράμετροι ελέγχου: Οι παράμετροι της διαδικασίας, συμπεριλαμβανομένης της ισχύος πλάσματος, των ρυθμών ροής αερίου, της θερμοκρασίας, της πίεσης και των ιδιοτήτων του υποστρώματος, ελέγχονται στενά για την επίτευξη των επιθυμητών ιδιοτήτων φιλμ, όπως το πάχος, η σύνθεση και η κρυσταλλικότητα.

Ψύξη και σταθεροποίηση: Κατά τη διάρκεια της διαδικασίας PECVD, το υπόστρωμα και άλλα εξαρτήματα του αντιδραστήρα μπορεί να θερμανθούν λόγω της ενέργειας που εισέρχεται από την εκκένωση πλάσματος και τις χημικές αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα. Αέριο άζωτο εισάγεται στο τέλος της διαδικασίας για να ψυχθεί το σύστημα και να σταθεροποιηθεί η θερμοκρασία. Αυτό το βήμα ψύξης βοηθά στην αποφυγή θερμικής ζημιάς στο υπόστρωμα και διασφαλίζει ότι το εναποτιθέμενο φιλμ προσκολλάται καλά στο υπόστρωμα. Το PECVD συχνά περιλαμβάνει τη χρήση πρόδρομων αερίων (π.χ. σιλάνιο, αμμωνία, οξυγόνο) για την εναπόθεση λεπτών μεμβρανών ή επικαλύψεων στο υπόστρωμα. Αυτά τα πρόδρομα αέρια μπορεί να είναι αντιδραστικά και μπορεί να οδηγήσουν σε ανεπιθύμητες αντιδράσεις ή μόλυνση εάν παραμείνουν στον αντιδραστήρα μετά την ολοκλήρωση της διαδικασίας εναπόθεσης. Το αέριο άζωτο χρησιμοποιείται για τον καθαρισμό και την απομάκρυνση τυχόν υπολειμματικών πρόδρομων αερίων από τον αντιδραστήρα. Με την εισαγωγή αζώτου, τα εναπομείναντα αντιδρώντα αέρια ξεπλένονται από το σύστημα, μειώνοντας τον κίνδυνο μόλυνσης στις επόμενες δοκιμές. Σε ορισμένες διεργασίες PECVD, ιδιαίτερα εκείνες που περιλαμβάνουν υλικά με βάση το πυρίτιο, είναι σημαντικό να αποφεύγεται η έκθεση στο οξυγόνο μετά την εναπόθεση. Το οξυγόνο μπορεί να οξειδώσει το αποτιθέμενο υλικό και να αλλάξει τις ιδιότητές του. Το άζωτο είναι ένα αδρανές αέριο, που σημαίνει ότι δεν αντιδρά εύκολα με άλλες ουσίες, συμπεριλαμβανομένου του εναποτιθέμενου υλικού. Η χρήση αζώτου ως αερίου καθαρισμού βοηθά στη διατήρηση της ακεραιότητας του εναποτιθέμενου φιλμ και αποτρέπει την οξείδωση. Η εισαγωγή ενός αδρανούς αερίου όπως το άζωτο στο τέλος της

διαδικασίας μπορεί επίσης να έχει οφέλη για την ασφάλεια. Βοηθά στην αραίωση και την απομάκρυνση τυχόν επικίνδυνων ή εύφλεκτων αερίων που μπορεί να έχουν χρησιμοποιηθεί κατά τη διαδικασία PECVD, διασφαλίζοντας ένα ασφαλές και ελεγχόμενο περιβάλλον για τον τερματισμό και τη συντήρηση του εξοπλισμού. Συνολικά, η εισαγωγή αζώτου στο τέλος μιας διαδικασίας PECVD είναι μια κοινή πρακτική για τη βελτιστοποίηση της ποιότητας των εναποτιθέμενων μεμβρανών, τη διατήρηση της καθαριότητας του αντιδραστήρα και τη διασφάλιση της ασφάλειας του εξοπλισμού και του προσωπικού. Οι συγκεκριμένες διαδικασίες και οι ροές αερίου μπορεί να διαφέρουν ανάλογα με το συγκεκριμένο σύστημα PECVD και τα υλικά που εναποτίθενται (3).

Χαρακτηρισμός φιλμ: Μετά την εναπόθεση, το λεπτό φιλμ μπορεί να χαρακτηριστεί χρησιμοποιώντας διάφορες αναλυτικές τεχνικές, συμπεριλαμβανομένης της περίθλασης ακτίνων X, της ηλεκτρονικής μικροσκοπίας σάρωσης και της φασματοσκοπίας, για την αξιολόγηση της ποιότητας και των ιδιοτήτων του.

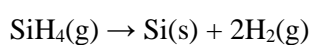
Το PECVD προσφέρει πολλά πλεονεκτήματα σε σχέση με τις συμβατικές μεθόδους CVD, όπως χαμηλότερες θερμοκρασίες εναπόθεσης, βελτιωμένη ποιότητα φιλμ και δυνατότητα εναπόθεσης υλικών που κατά τα άλλα είναι δύσκολο να αναπτυχθούν χρησιμοποιώντας τυπικό CVD. Αυτό την καθιστά πολύτιμη τεχνική σε εφαρμογές όπως η κατασκευή ημιαγωγών, οι προηγμένες επικαλύψεις και η σύνθεση νανοϋλικών (1).

Αντιδραστήρας Πλάσματος

Το σιλάνιο (SiH_4) διαδραματίζει κρίσιμο ρόλο στους αντιδραστήρες εναπόθεσης χημικών ατμών πλάσματος, ιδιαίτερα στο πλαίσιο της εναπόθεσης ημιαγωγών και λεπτής μεμβράνης. Το σιλάνιο είναι ένα πρόδρομο αέριο πυριτίου που όταν εισάγεται στον αντιδραστήρα CVD μαζί με μια κατάλληλη πηγή πλάσματος, συμβάλλει στην ανάπτυξη λεπτών μεμβρανών με βάση το πυρίτιο. Το υψηλής ενέργειας πλάσμα εντός του αντιδραστήρα διασπά μόρια σιλανίου, απελευθερώνοντας άτομα πυριτίου που αντιδρούν με άλλα πρόδρομα αέρια για να σχηματίσουν λεπτές μεμβράνες πυριτίου ή ενώσεις που περιέχουν πυρίτιο στην επιφάνεια ενός υποστρώματος. Το σιλάνιο εκτιμάται για το ρόλο του στην παραγωγή μεμβρανών πυριτίου υψηλής καθαρότητας, υψηλής ποιότητας, τα οποία είναι απαραίτητα στη βιομηχανία ημιαγωγών για την κατασκευή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων και άλλων ηλεκτρονικών συσκευών. Ο ακριβής έλεγχος και η αντιδραστικότητά του σε περιβάλλον πλάσματος το καθιστούν ακρογωνιαίο λίθο των

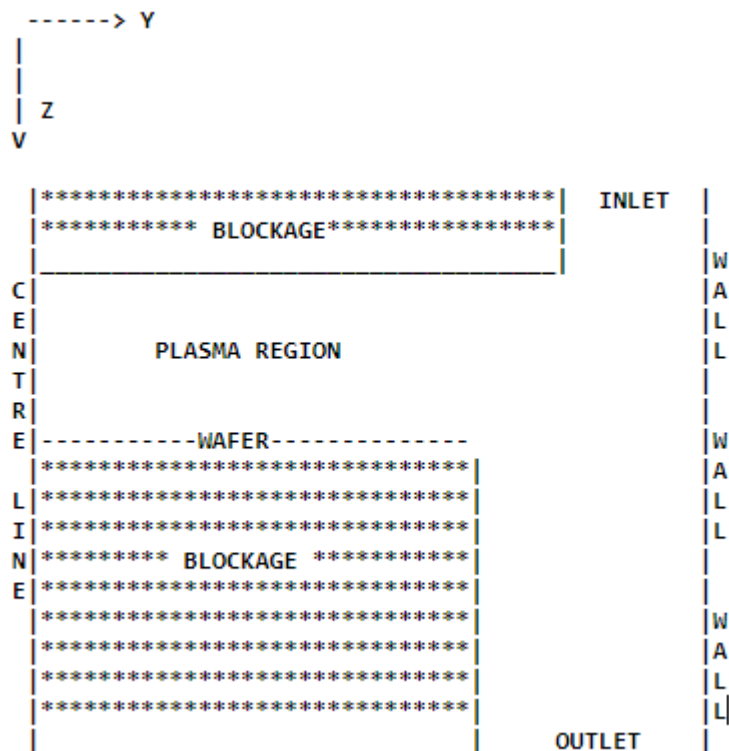
διαδικασιών CVD πλάσματος, επιτρέποντας τη δημιουργία περίπλοκων δομών ημιαγωγών με εξαιρετική ακρίβεια και ομοιομορφία. Έχει την ιδιότητα να αποσυντίθεται με ευκολία σε υψηλές θερμοκρασίες για να σχηματίσει άτομα πυριτίου, τα οποία στη συνέχεια μπορούν να συνδυαστούν για να σχηματίσουν το φιλμ πολυπυριτίου.

Αρχικά, το υπόστρωμα και το πρόδρομο αέριο τοποθετούνται μέσα σε ένα θάλαμο αντίδρασης, με σταθερές συνθήκες θερμοκρασίας και πίεσης. Ο θάλαμος αυτός, διατηρείται είτε σε συνθήκες κενού, είτε σε χαμηλή πίεση, ώστε να εξασφαλιστεί η καθαρότητα της διαδικασίας. Το σιλάνιο (SiH_4), εισάγεται στον θάλαμο αντίδρασης και θερμαίνεται έως μια θερμοκρασία, μεταξύ 550°C και 650°C για τις εφαρμογές με πολυπυρίτιο. Κατόπιν, αποσυντίθεται σε αέρια πυριτίου (Si) και υδρογόνο (H_2) όπως φαίνεται από την παρακάτω χημική αντίδραση:



Τα άτομα πυριτίου που απελευθερώνονται σε αυτή την αντίδραση αρχίζουν να εναποτίθενται στην επιφάνεια του υποστρώματος. Τα άτομα πυριτίου αρχίζουν να σχηματίζουν μικρούς πυρήνες στην επιφάνεια του υποστρώματος. Αυτοί οι πυρήνες λειτουργούν ως σημεία εκκίνησης για την ανάπτυξη του φιλμ πολυπυριτίου. Καθώς η εναπόθεση προχωρά, άτομα πυριτίου συνεχίζουν να προστίθενται σε αυτούς τους πυρήνες, προκαλώντας την ανάπτυξη του φιλμ. Το πάχος του φιλμ πολυπυριτίου ελέγχεται από τον χρόνο εναπόθεσης και τον ρυθμό ροής του πρόδρομου αερίου μέσα στο θάλαμο. Ο ακριβής έλεγχος είναι απαραίτητος για την επίτευξη του επιθυμητού πάχους φιλμ για συγκεκριμένες εφαρμογές συσκευών ημιαγωγών.

Παρακάτω παρουσιάζεται μια σχηματική αναπαράσταση του αντιδραστήρα στην εικόνα 1, αλλά και τα βασικά γεωμετρικά χαρακτηριστικά του αντιδραστήρα, στον πίνακα 1.



Εικόνα 1: Σχηματική αναπαράσταση αντιδραστήρα ατμού πλάσματος.

LY		LZ	
LY1	0.0200	LZ1	0.0100
LY2	0.0920	LZ2	0.0120
LY3	0.1000	LZ3	0.0274
LY4	0,1020	LZ4	0.0294
LY5	0.1035	LZ5	0.0346
LY6	0.1055	LZ6	0.0554
LY7	0.1070	LZ7	0.0654
LY8	0.1100		
LY9	0.1300		
LY10	0.1570		
LY11	0.1610		
LY12	0.1630		
Total length	0.163 m	Total length	0.0654 m

Πίνακας 1: Γεωμετρικά χαρακτηριστικά αντιδραστήρα ατμού πλάσματος.

Μαθηματικό Μοντέλο

Το μαθηματικό μοντέλο στο οποίο στηρίζεται η ανάλυση της παρούσας εργασίας είναι οι διαφορικές εξισώσεις των φαινομένων μεταφοράς, οι οποίες αναπαριστούν τους νόμους διατήρησης της μάζας, της ενέργειας και της ορμής. Επίσης, για την επίλυση του προβλήματος χρησιμοποιούνται οι συνοριακές, αρχικές και ασυμπτωτικές συνθήκες καθώς και καταστατικές εξισώσεις. Οι συνθήκες λειτουργίας του αντιδραστήρα και τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του λειτουργούν ως παράμετροι του μοντέλου. Οι συνθήκες λειτουργίας αφορούν τη θερμοκρασία, την πίεση, την παροχή εισόδου και τη συγκέντρωση των χημικών συστατικών στο αέριο μίγμα και έχουν καθοριστική επίδραση στο τελικό αποτέλεσμα της διεργασίας.

Εξισώσεις φαινομένων μεταφοράς και διατήρησης μεγεθών

Όπως αναφέρθηκε και ανωτέρω, η ανάλυση στηρίζεται στις θεμελιώδεις αρχές των φαινομένων μεταφοράς. Σε μακροσκοπικό επίπεδο, στην παρούσα εργασία η ροή στο εσωτερικό του αντιδραστήρα μπορεί να θεωρηθεί στρωτή, ασυμπιεστή και μόνιμη και ότι το ρευστό συμπεριφέρεται ως συνεχές μέσο. Με αυτές τις παραδοχές, παρακάτω παρουσιάζονται οι σχετικές εξισώσεις.

Εξίσωση διατήρησης της μάζας

$$\nabla \cdot \vec{u} = 0 \quad (1)$$

Εξίσωση διατήρησης της ορμής

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla P + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \left[\mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right] \quad (2)$$

Εξίσωση διατήρησης της ενέργειας

$$\begin{aligned} c_p \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{T}) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \sum_{i=1}^N (\mathbf{j}_i^C + \mathbf{j}_i^T) \cdot \frac{\nabla H_i}{M_i} \\ - \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K H_i \gamma_{ik} R_k^g \end{aligned} \quad (3)$$

,όπου ο όρος $\mathbf{j}_i^C + \mathbf{j}_i^T$ στο δεξί μέλος της εξίσωσης (3) 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.

Εξίσωση μεταφοράς συστατικών

—

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \omega_i) = -\nabla \cdot (\mathbf{j}_i^C + \mathbf{j}_i^T) + M_i \sum_{k=1}^K \gamma_{ik} R_k^g \quad (4)$$

, όπου ο δεύτερος όρος στο δεξί μέλος της εξίσωσης (4) αντιστοιχεί στην παραγωγή ή την κατανάλωση του συστατικού i στις αντιδράσεις αέριας φάσης.

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

$$\sum_{i=1}^N \omega_i = 1 \quad (5)$$

Αυτό πρακτικά σημαίνει πως η επίλυση της εξίσωσης (4) γίνεται για $N-1$ συστατικά, ενώ το μοριακό κλάσμα του φέροντος αερίου υπολογίζεται από την εξίσωση (5). Εξαιτίας των μεγάλων βαθμίδων θερμοκρασίας που παρατηρούνται στο εσωτερικό του εργαστηριακού αντιδραστήρα ΧΑΑ (ιδιαίτερα στην περιοχή πάνω από το θερμαινόμενο υπόστρωμα), οι δυνάμεις άνωσης, $\rho \mathbf{g}$, δεν περιγράφονται από την προσέγγιση Boussinesq [Incropera and Dewitt, 1996] αλλά από την ακόλουθη σχέση:

$$\rho = \rho_0 + (\rho - \rho_0) \quad (6)$$

Η πυκνότητα αναφοράς, ρ_0 , αντιστοιχεί στη θερμοκρασία αναφοράς, T_0 . Ο όρος $\rho_0 \mathbf{g}$ που προκύπτει στις εξισώσεις (2) απορροφάται στον όρο της βαθμίδας της πίεσης [2].

Συνοριακές Συνθήκες

Τα τοιχώματα του αντιδραστήρα στην παρούσα εργασία θεωρούνται στερεά και ως εκ τούτου ισχύει η συνθήκη της μη ολίσθησης και μη διείσδυσης. Επομένως ισχύει ότι:

$$\mathbf{u} = 0$$

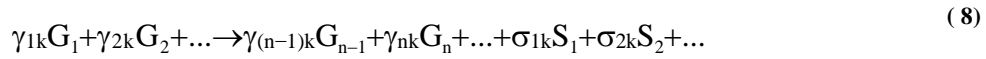
Επίσης ο αντιδραστήρας είναι ψυχρών τοιχωμάτων, επομένως θεωρούμε τη θερμοκρασία στα τοιχώματα σταθερή και ίση με:

$$T_{wall} = 300 \text{ K}$$

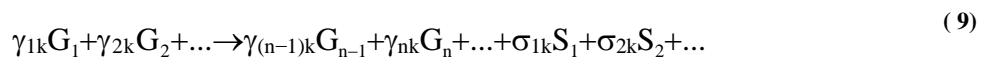
Η συνολική ροή όλων των συστατικών του αερίου μίγματος θεωρείται μηδενική:

$$\mathbf{n} \cdot (\mathbf{j}_i^C + \mathbf{j}_i^T) = 0 \quad (7)$$

Επιφάνεια απόθεσης: Λόγω 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:



Χάρη σ' αυτές τις επιφανειακές αντιδράσεις, υπάρχει ένας καθαρός ρυθμός παραγωγής ή κατανάλωσης της μάζας του συστατικού i , MF_i , στην επιφάνεια απόθεσης:



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

$$MF_i = M_i \sum_{k=1}^{KS} \gamma_{ik} R_k^S \quad (10)$$

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

$$MF = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^{KS} M_i \gamma_{ik} R_k^S \quad (11)$$

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

$$u_s = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^{KS} M_i \gamma_{ik} R_k^S \quad (12)$$

Η ταχύτητα αυτή είναι μικρή στην περίπτωση πολύ αραιών μιγμάτων ($\omega_i < 1$), οπότε, σε κάποιες περιπτώσεις η παραπάνω οριακή συνθήκη μπορεί να αντικατασταθεί με τη συνθήκη της μη ολίσθησης στη στερεή επιφάνεια απόθεσης (4).

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

κατανάλωσης:

$$\mathbf{n} \cdot (\rho \mathbf{u} \omega_i + \mathbf{j}_i^C + \mathbf{j}_i^T) = M_i \sum_{k=1}^{KS} \gamma_{ik} R_k^S \quad (13)$$

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

$$T = T_{wafer}$$

Είσοδος: στην είσοδο καθορίζονται οι τιμές για όλες τις μεταβλητές επίλυσης:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_{inlet}$$

$$T = T_{inlet}$$

$$\omega_i = \omega_{i,inlet}$$

Εξοδος: η ροή θεωρείται πλήρως ανεπτυγμένη:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} = 0 \quad \mathbf{n} \cdot \nabla T = 0 \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \omega_i = 0$$

Θερμοφυσικές Ιδιότητες Συστατικών και Μίγματος

Η επίλυση της εξίσωσης διατήρησης της ενέργειας (εξίσωση 3) 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 (5)

$$\frac{C_{pi}(T)}{R} = \alpha_{1i} + \alpha_{2i}T + \alpha_{3i}T^2 + \alpha_{4i}T^3 + \alpha_{5i}T^4 \quad (14)$$

$$\frac{H_i(T)}{RT} = \alpha_{1i} + \frac{\alpha_{2i}}{2}T + \frac{\alpha_{3i}}{3}T^2 + \frac{\alpha_{4i}}{4}T^3 + \frac{\alpha_{5i}}{5}T^4 + \frac{\alpha_{6i}}{T} \quad (15)$$

Οι πολυωνυμικοί συντελεστές λαμβάνονται από διαθέσιμα βιβλιογραφικά δεδομένα.

Η ειδική θερμότητα του μίγματος, C_p , υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\mu_i = 2.6693 \cdot 10^{-5} \frac{\sqrt{M_i T}}{\sigma_i^2 \Omega_{\mu,i}} \quad (18)$$

$$C_p = \sum_{i=1}^N \omega_i C_{pi} \quad (16)$$

Ιδιότητες Μεταφοράς των Συστατικών και του Μίγματος

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

$$\rho = \frac{PM}{RT} \quad (17)$$

Το δυναμικό ιξώδες του συστατικού i , μ_i , μπορεί να υπολογισθεί από τη σχέση [14]:

Η αδιάστατη παράμετρος (collision integral), $\Omega_{\mu,i}$, υπολογίζεται ανάλογα με την παράμετρο $\Omega_{D,ij}$ μέσω της εμπειρικής σχέσης [15]:

$$\Omega_{\mu,ij} = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)} \quad (19)$$

όπου,

$$\begin{aligned} A &= 1.16145, & B &= 0.14874, C = 0.52487, & D &= 0.77320, \\ E &= 2.16178, & F &= 2.43787, G = 0.00000, & H &= 0.00000 \end{aligned}$$

Η θερμική αγωγιμότητα του συστατικού i , λ_i , για μονοατομικά αέρια υπολογίζεται από τη σχέση [14]

$$\lambda_i = \frac{15}{4} \frac{R}{M_i} \mu_i \quad (20)$$

ενώ για πολυατομικά αέρια χρησιμοποιείται η διόρθωση Eucken (6)

$$\lambda_i = \left(\frac{15}{4} + 1.32 \left(\frac{C_p}{R} - \frac{5}{2} \right) \right) \frac{R}{M_i} \mu_i \quad (21)$$

Για τον υπολογισμό του δυναμικού ιξώδους του μίγματος, μ , χρησιμοποιείται η εμπειρική σχέση που προτάθηκε από τον Wilke [13] :

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^N x_i \mu_i}{\left(\sum_j x_j \Phi_{ij} \right)} \quad (22)$$

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

$$\mu \Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \left(1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right)^2 \quad (23)$$

Η θερμική αγωγιμότητα του μίγματος, λ , υπολογίζεται από ανάλογη εμπειρική σχέση.
[Ρυθμός Απόθεσης](#)

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

$$R_{Di} = \frac{1}{M_i} \frac{(\rho D_i \omega_i)_1}{d_{1s}} \quad (25)$$

θερμοκρασίας και της συγκέντρωσης των συστατικών του μίγματος, το μοντέλο προσομοίωσης της λειτουργίας αντιδραστήρων χημικής απόθεσης από ατμό που αναπτύχθηκε υπολογίζει το ρυθμό απόθεσης πάνω στην επιφάνεια του υποστρώματος. Για τον υπολογισμό του θεωρούμε ένα μηχανισμό 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 πάνω στο θερμαινόμενο υπόστρωμα καθορίζεται από το πιο αργό στάδιο μέσω της σχέσης [2]:

$$\mu \frac{1}{R_k^d} = \frac{1}{R_k^s} + \sum_{i=1}^{NR} \frac{\gamma_{ik}}{R_{Di}} \quad (24)$$

Ο ρυθμός της επιφανειακής αντίδρασης, R^s , υπολογίζεται μέσω της εξίσωσης που περιγράφει την κινητική της αντίδρασης, ενώ για τον υπολογισμό της μέγιστης ροής διάχυσης του συστατικού i , R_{Di} , στην επιφάνεια απόθεσης χρησιμοποιείται η σχέση:

Ο δείκτης 1 δηλώνει τις τιμές των μεγεθών στο πρώτο πλεγματικό σημείο από την επιφάνεια απόθεσης. Η απόσταση d_{1s} 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:

$$D_i = -\frac{j_i^c}{\rho \nabla \omega_i} \quad (26)$$

Η σχέση (25) 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 $D_i^T \rightarrow 0$ για , η εξίσωση (25) περιλαμβάνει μόνο τον όρο της συνήθους διάχυσης και όχι την επίδραση της θερμικής διάχυσης (4). Για τη μετατροπή του ρυθμού απόθεσης, R_k^d [mol/m² s] στο συνολικό ρυθμό ανάπτυξης πάνω στο δισκίο απόθεσης, G [Å/min], που μετράται πειραματικά,

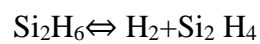
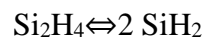
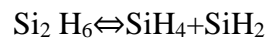
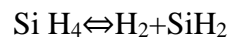
χρησιμοποιείται η σχέση :

$$G = 6 \cdot 10^{-11} \cdot \frac{M_s}{\rho_s} \sum_{k=1}^{KS} \sigma_{sk} R_k^d \quad (27)$$

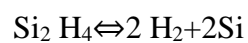
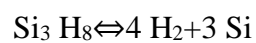
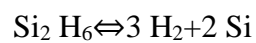
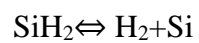
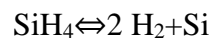
Χημικές αντιδράσεις

Οι αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα κατά τη σύνθεση του πολυκρυσταλλικού πυριτίου από αέριο σιλάνιο ακολουθεί παρατίθενται κάτωθι:

Αντιδράσεις στην αέρια φάση



Επιφανειακές αντιδράσεις



2. ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ

Μέθοδος πεπερασμένων όγκων ελέγχου

Στο μέθοδο πεπερασμένων όγκων ελέγχου, το πρώτο βήμα είναι να διαιρεθεί ο υπολογιστικός τομέας σε έναν πεπερασμένο αριθμό όγκων ή κελιών ελέγχου. Αυτοί οι όγκοι ελέγχου μπορούν να θεωρηθούν ως μικρές, μη επικαλυπτόμενες υποπεριοχές του τομέα. Τα όρια αυτών των όγκων ελέγχου αναφέρονται συνήθως ως όψεις ή όψεις κελιών. Η μέθοδος αυτή είναι ιδιαίτερα κατάλληλη για προβλήματα που διέπονται από νόμους διατήρησης, όπου μια ποσότητα (π.χ. μάζα, ενέργεια, ορμή) διατηρείται σε κάθε όγκο ελέγχου. Αυτοί οι νόμοι διατήρησης περιγράφονται με μερικές διαφορικές εξισώσεις. Το επόμενο βήμα περιλαμβάνει την ενσωμάτωση των κυβερνώντων εξισώσεων σε κάθε όγκο ελέγχου. Αυτή η ολοκλήρωση μετατρέπει τις συνεχείς εξισώσεις σε διακριτές εξισώσεις που μπορούν να λυθούν αριθμητικά. Αυτή η διαδικασία οδηγεί σε ένα σύνολο αλγεβρικών εξισώσεων που συσχετίζουν τις τιμές της διατηρημένης ποσότητας στα κέντρα των κελιών με τις ροές στις όψεις των κελιών. Για τον προσδιορισμό των ροών στις όψεις των κελιών, η μέθοδος υπολογίζει τη ροή της διατηρημένης ποσότητας από το ένα κελί στο άλλο. Αυτό γίνεται συνήθως χρησιμοποιώντας μια προσέγγιση, όπως η διακριτοποίηση όρων κλίσης χρησιμοποιώντας σχήματα διαφορών όπως πεπερασμένες διαφορές ή μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων. Το αποτέλεσμα αυτής της διακριτοποίησης είναι ένα σύστημα γραμμικών εξισώσεων, όπου οι άγνωστοι είναι οι τιμές της διατηρημένης ποσότητας στα κέντρα των κελιών. Αυτό το σύστημα εξισώσεων μπορεί να λυθεί χρησιμοποιώντας αριθμητικές τεχνικές, όπως επαναληπτικούς λύτες ή άμεσους λύτες. Οι οριακές συνθήκες εφαρμόζονται στις όψεις των κελιών κοντά στα όρια του τομέα για να αναπαραστήσουν τις φυσικές συνθήκες στα όρια. Αυτές οι συνθήκες διασφαλίζουν ότι η αριθμητική λύση σέβεται τους φυσικούς περιορισμούς του προβλήματος. Ειδικότερα, σε προβλήματα που εξαρτώνται από το χρόνο, συνδυάζεται με μεθόδους χρονικής βηματοδότησης (π.χ. ρητά ή άρρητα σχήματα) για την έγκαιρη προώθηση της λύσης. Αυτό επιτρέπει την προσομοίωση μεταβατικών διεργασιών. Σε πολλές περιπτώσεις, περιλαμβάνει μια επαναληπτική διαδικασία, όπου η λύση ενημερώνεται μέχρι να συγκλίνει σε μια σταθερή λύση. Αυτή η επαναληπτική προσέγγιση χρησιμοποιείται συχνά για μη γραμμικά προβλήματα. Αφού ληφθούν οι τιμές της διατηρημένης ποσότητας σε κάθε κέντρο κυψέλης, μπορούν να εφαρμοστούν τεχνικές μετα-επεξεργασίας για την εξαγωγή σχετικών πληροφοριών, όπως μοτίβα

ροής, κατανομές θερμοκρασίας ή άλλες ποσότητες ενδιαφέροντος.

Η μέθοδος πεπερασμένου όγκου είναι εξαιρετικά ευέλικτη και εφαρμόζεται σε ένα ευρύ φάσμα φυσικών φαινομένων. Είναι ιδιαίτερα κατάλληλη για προβλήματα που αφορούν νόμους διατήρησης και χρησιμοποιείται ευρέως σε μηχανικές και επιστημονικές προσομοιώσεις για την ανάλυση και την πρόβλεψη της συμπεριφοράς πολύπλοκων συστημάτων. Η ικανότητά της μεθόδου να χειρίζεται ακανόνιστες γεωμετρίες και αρχές διατήρησης την καθιστά πολύτιμο εργαλείο για διάφορους τομείς, όπως η δυναμική των ρευστών, η μεταφορά θερμότητας και οι προσομοιώσεις μεταφοράς μάζας.

Το σύστημα των μερικών διαφορικών εξισώσεων (1-4) που παρουσιάστηκε παραπάνω και με τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματος διακριτοποιείται με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου. Το πεδίο επίλυσης διαιρείται σε κελιά που δεν επικαλύπτονται και οι διαφορικές εξισώσεις ολοκληρώνονται σε ένα στοιχειώδη όγκο ελέγχου, το οποίο περιλαμβάνει κάθε κόμβο του πλέγματος.

Η ολοκλήρωση σε ένα στοιχειώδη όγκο ελέγχου εκφράζεται σύμφωνα με το θεώρημα Gauss, ενώ το επιφανειακό ολοκλήρωμα προσεγγίζεται από το θεώρημα μέσης τιμής στο μέσο κάθε έδρας. Εφαρμόζοντας στη συνέχεια, ένα σχήμα διαφορών για τον υπολογισμό των επιφανειακών ροών, η αρχική διαφορική εξίσωση μετατρέπεται στην ακόλουθη (7):

$$(A_p - S_p)\Phi_p = A_E\Phi_E + A_W\Phi_W + A_N\Phi_N + A_S\Phi_S + S_u \quad (28)$$

, όπου $A_p = A_E + A_W + A_N + A_S$

Οι συντελεστές A_i της γενικής εξίσωσης μεταφοράς περιέχουν τους όρους μεταφοράς και διάχυσης της εξαρτημένης μεταβλητής φ . Στη γενική περίπτωση ο όρος πηγής S_φ είναι συνάρτηση της εξαρτημένης μεταβλητής φ . Έτσι, για το χειρισμό του, στην προηγούμενη εξίσωση ήταν απαραίτητη η γραμμικοποίηση του, σύμφωνα με τη σχέση:

$$S_{\Phi} = S_U + S_P \Phi_P \quad (29)$$

Επαναλαμβάνοντας τη διαδικασία αυτή για όλους τους όγκους ελέγχου, προκύπτει ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων με αγνώστους τις τιμές της εξαρτημένης μεταβλητής στους βασικούς κόμβους του πλέγματος. Για την επίλυση του χρησιμοποιείται η μέθοδος Jacobi για τις συνιστώσες της ταχύτητας u , v και w και η μέθοδος του τριδιαγώνιου πίνακα (TDMA) για όλες τις άλλες μεταβλητές.

Σχήμα διαφόρισης

Ο τρόπος με τον οποίο προσεγγίζονται αριθμητικά οι συντελεστές A_i της εξίσωσης διαφορικής εξίσωσης (28) αντιστοιχεί στο σχήμα διαφορών που χρησιμοποιείται (ανάτη, κατάτη, κεντρική διαφόριση κλπ). Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται το ανάτη σχήμα διαφόρισης πρώτης τάξης (First Order Upwind – FOU). Σύμφωνα με αυτό, η τιμή της μεταβλητής ϕ στο όριο ισούται με την τιμή του ανάτη κόμβου:

$$\Phi_e = \begin{cases} \Phi_P, u_e > 0 \\ \Phi_E, u_e < 0 \end{cases} \quad (30)$$

Το σχήμα των ανάντη διαφορών έχει επικριθεί αλλά είναι μόνο η πύκνωση του ίδιου του πλέγματος που μπορεί να εντοπίσει την ψευδή διάχυση η οποία μπορεί να σχετίζεται από τα διάφορα σχήματα (8). Για το λόγο αυτό δόθηκε ιδιαίτερη προσοχή στην ανεξαρτησία της λύσης από το πλέγμα, όπως περιγράφεται αναλυτικά στο αντίστοιχο κεφάλαιο για την ανεξαρτησία του πλέγματος.

Λογισμικό Επίλυσης

Για την επίλυση του προβλήματος που παρουσιάστηκε στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας υπολογιστικής ρευστοδυναμικής PHOENICS. Η περιγραφή της γεωμετρίας του αντιδραστήρα χημικής απόθεσης ατμού πλάσματος πραγματοποιείται με δισδιάστατο πλέγμα πολλαπλών υποχωρίων σε καρτεσιανές συντεταγμένες.

Αρχικά για την περιγραφή του προβλήματος εισάγεται στο λογισμικό, ένα αρχείο q1.txt. Κατόπιν ο κώδικας SATELLITE, μετά την επεξεργασία των δεδομένων που έχουν εισαχθεί, αποδίδει το αρχείο δεδομένων EARDAT (pre-processing) το οποίο διαβάζεται από τον κώδικα EARTH. Στη συνέχεια, το πρόγραμμα EARTH (Solving) πραγματοποιεί τους υπολογισμούς και παράγει ένα αρχείο εξόδου (result), το οποίο μπορεί να διαβάσει ο χρήστης. Δημιουργείται ακόμα ένα αρχείο αποτελεσμάτων PHI, το οποίο διαβάζεται από τον κώδικα PHOTON, VRViewer και Autoplot (post-processing) ή τον EARTH όταν ξεκινά μία νέα σειρά υπολογισμών. Στο αρχείο PHI υπάρχουν όλες οι πληροφορίες που αφορούν τη γεωμετρία και τα αποτελέσματα των μεταβλητών.

Αλγόριθμοι SIMPLE και SIMPLEST

Για την εφαρμογή του αλγορίθμου SIMPLE των Patankar και Spalding (7), χρησιμοποιείται η ιδέα του μετατοπισμένου πλέγματος, στο οποίο διαφέρουν οι υπολογιστικοί όγκοι για τις συνιστώσες της ταχύτητας u , v και w και για την πίεση. Συγκεκριμένα, θεωρείται ότι οι αντίστοιχοι όγκοι για τις u, v και w προκύπτουν από τα μέσα των εδρών του πλέγματος.

Η επίλυση μίας ορισμένης μεταβλητής ϕ , απαιτεί μία εξίσωση όπου η ϕ να είναι η ανεξάρτητη μεταβλητή. Οι u , v και w ικανοποιούν αυτήν την απαίτηση μέσω των εξισώσεων ορμής. Για την πίεση όμως δεν υπάρχει τέτοια εξίσωση.

Υπάρχει μία επιπλέον εξίσωση, η εξίσωση συνεχειάς, στην οποία όμως η πίεση δεν εμφανίζεται (9). Για το λόγο αυτό χρησιμοποιείται ο αλγόριθμος SIMPLEST, ο οποίος στηρίζεται στην εκτίμηση ενός πεδίου πίεσης P^* και στη διόρθωση αυτού μέχρι οι ταχύτητες που προκύπτουν να ικανοποιούν την εξίσωση συνεχειάς και τις εξισώσεις ορμής.

Τα **βήματα** του αλγορίθμου είναι:

1. Εκτίμηση πεδίου πίεσης P^*
2. Επίλυση εξισώσεων ορμής για (u^*, v^* και w^*)
3. Επίλυση εξίσωσης διορθωμένης πίεσης
4. Υπολογισμός νέου πεδίου πίεσης από $P = P^* + P'$
5. Διόρθωση ταχυτήτων από τη σχέση: $uw = u'w + DU(P'w - P'P)$
6. Επίλυση της εξίσωσης θερμότητας και λοιπών βαθμωτών μεγεθών (όσα έχουν επιλεγεί ότι μας ενδιαφέρουν για την μελέτη του εκάστοτε φαινομένου – εδώ π.χ. δεν επιλύεται η εξίσωση θερμότητας)
7. Επιστροφή στο Βήμα 1, θέτει $P^* = P$ και επανέλαβε μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση.

Ο αλγόριθμος SIMPLEST ακολουθείται για τις εξισώσεις ορμής. Η σημαντικότερη διαφορά μεταξύ αυτού και του ευρέως διαδεδομένου αλγορίθμου SIMPLE είναι ότι στον πρώτο οι συντελεστές της ορμής στο πεπερασμένο χωρίο περιλαμβάνουν μόνο συνεισφορές διάχυσης, οι όροι μεταφοράς προσθέτονται στο γραμμικοποιημένο όρο πηγής των εξισώσεων. Αυτό συνεπάγεται ότι απουσία διάχυσης, οι εξισώσεις ορμής επιλύονται με τη μέθοδο Jacobi σημείο προς σημείο, αντίθετα με τις δημοφιλείς μεθόδους ταυτόχρονης επίλυσης γραμμή προς γραμμή. Αυτή η ανάμικτη πρακτική (χρήση επίλυσης Jacobi για τους όρους μεταφοράς και χρήση επίλυσης γραμμή προς γραμμή για τους όρους διάχυσης) έχει βρεθεί ότι επιταχύνει σημαντικά τη σύγκλιση (8).

Υποχαλάρωση και κριτήρια σύγκλισης

Η υποχαλάρωση είναι μια αριθμητική τεχνική που χρησιμοποιείται για τον έλεγχο της σύγκλισης και της σταθερότητας των επαναληπτικών επιλυτών. Περιλαμβάνει τη μείωση του ρυθμού αλλαγής των μεταβλητών λύσης κατά τη διάρκεια κάθε επανάληψης πολλαπλασιάζοντάς τες με έναν παράγοντα υποχαλάρωσης. Αυτή η τεχνική είναι πολύτιμη για την επίτευξη σταθερών και αξιόπιστων λύσεων σε

πολύπλοκες και παροδικές προσομοιώσεις. Αυτή η διαδικασία εξασφαλίζει τη σύγκλιση με την εφαρμογή των συντελεστών υποχαλάρωσης, που είναι απαραίτητοι λόγω της μη γραμμικότητας των εξισώσεων μεταφοράς, που οδηγεί συχνά σε απόκλιση της επαναληπτικής διαδικασίας, όταν οι αρχικές υποθετικές τιμές των μεταβλητών απέχουν σημαντικά από την τελική λύση.

Η υποχαλάρωση περιγράφεται τυπικά χρησιμοποιώντας την ακόλουθη εξίσωση:

$$X^{(n+1)} = (1-\omega) X^{(n)} + \omega X^*$$

Σε αυτή την εξίσωση, το $X^{(n+1)}$ αντιπροσωπεύει την τιμή της μεταβλητής στην επόμενη επανάληψη, το $X^{(n)}$ την τιμή της μεταβλητής στην τρέχουσα επανάληψη και το X^* , την "προβλεπόμενη" τιμή της μεταβλητής λύσης που θα λαμβανόταν χωρίς υποχαλάρωση. Το ω είναι ο παράγοντας υποχαλάρωσης, ο οποίος είναι μια παράμετρος που ορίζεται από το χρήστη μεταξύ 0 και 1. Ελέγχει τον βαθμό στον οποίο η μεταβλητή λύση ενημερώνεται σε κάθε επανάληψη. Η εξίσωση δείχνει πώς η μεταβλητή στην επόμενη επανάληψη υπολογίζεται συνδυάζοντας την τρέχουσα τιμή με ένα κλάσμα της "προβλεπόμενης" τιμής, με βάση τον παράγοντα υποχαλάρωσης. Επιλέγοντας μια κατάλληλη τιμή για την παράμετρο ω , μπορούμε να ελέγξουμε τη σύγκλιση και τη σταθερότητα του επαναληπτικού λύτη. Ένα μικρότερο ω οδηγεί σε πιο σημαντική υποχαλάρωση και πιο αργή σύγκλιση, ενώ σε μεγαλύτερα ω επιτρέπεται η ταχύτερη σύγκλιση αλλά μπορεί να τεθεί σε κίνδυνο τη σταθερότητα.

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκαν οι συντελεστές υποχαλάρωσης που παρουσιάζονται στον πίνακα που ακολουθεί.

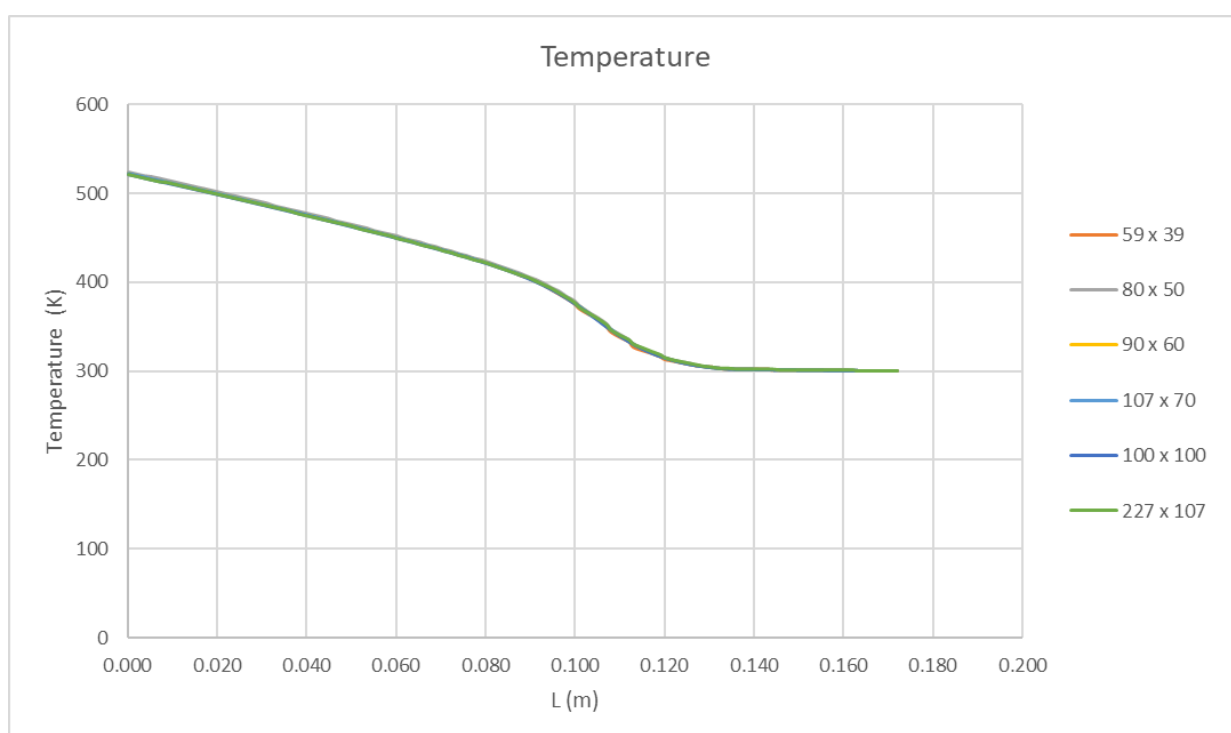
Μεταβλητή	Συντελεστής Υποχαλάρωσης	Συντελεστής Υποχαλάρωσης
P	3.0E-01	3.0E-01
V	1.0E+00	1.0E-02
W	1.0E+00	1.0E-02
S140	1.0E+00	1.0E+00
S142	1.0E+00	1.0E-02
S145	1.0E+00	1.0E-02
S158	1.0E+00	1.0E-02
S80	1.0E+00	1.0E-02
T	3.0E-01	3.0E-01

Πίνακας 2: Συντελεστές υποχαλάρωσης για τις διάφορες μεταβλητές.

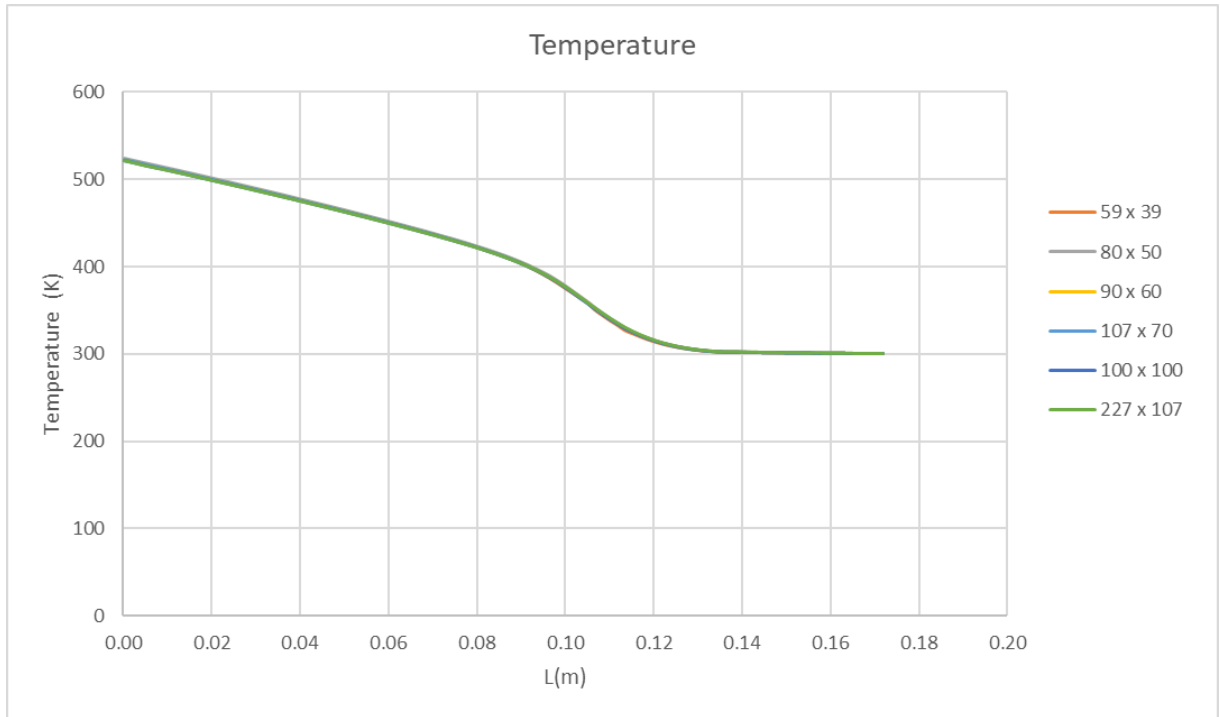
Υπολογιστικό Μέρος Ανεξαρτησία πλέγματος

Για να είναι η λύση του ροϊκού πεδίου ανεξάρτητη από το πλέγμα, είναι απαραίτητη η μελέτη ανεξαρτησίας πλέγματος. Σ' αυτή τη διαδικασία μελετήθηκαν οι παράμετροι έξι διαφορετικών πλεγμάτων και υπολογίστηκε το μεταξύ τους σφάλμα, ώστε να καταλήξουμε στη βέλτιστη επιλογή.

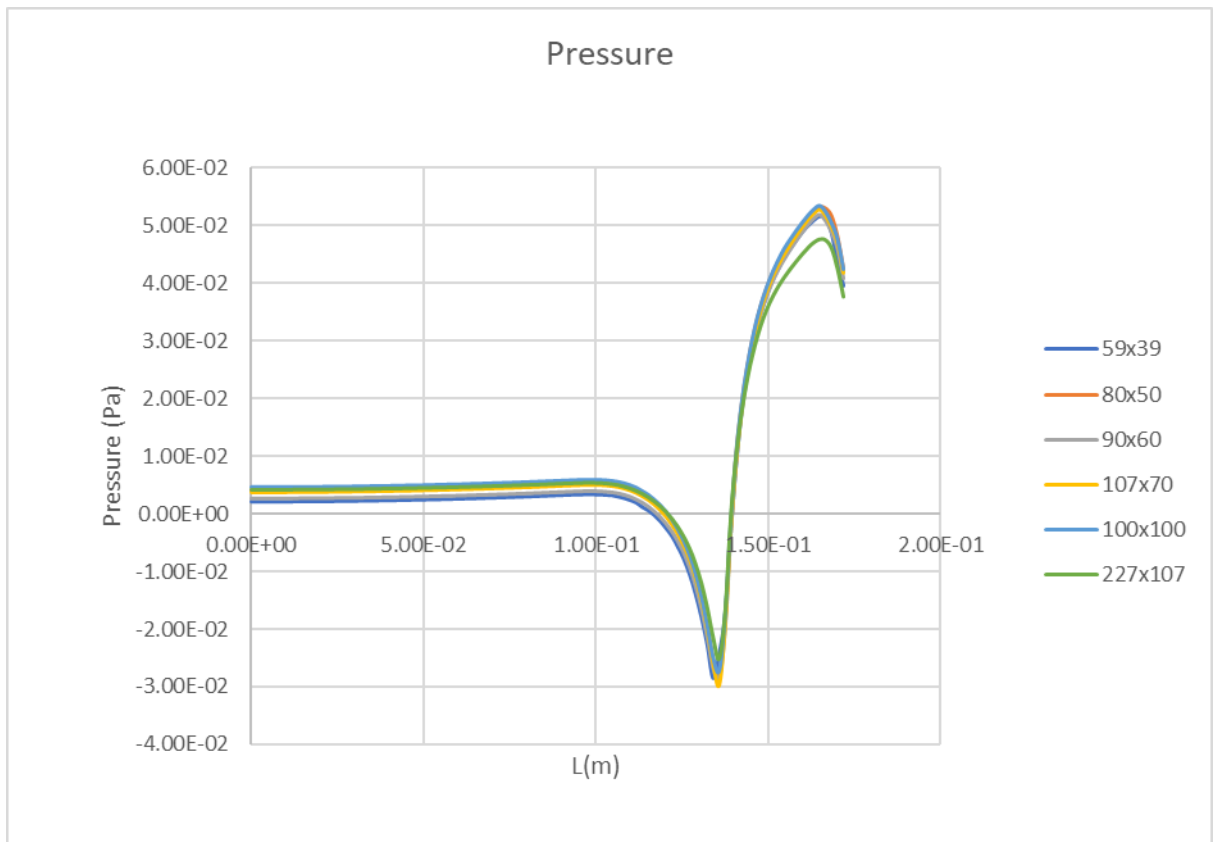
Παρακάτω παρατίθεται τα διαγράμματα των μεταβλητών της Θερμοκρασίας, Πίεσης, Ταχύτητας κατά τον άξονα Y και Z καθώς και του αντιδρώντος στοιχείου του σιλανίου SiH_4 .



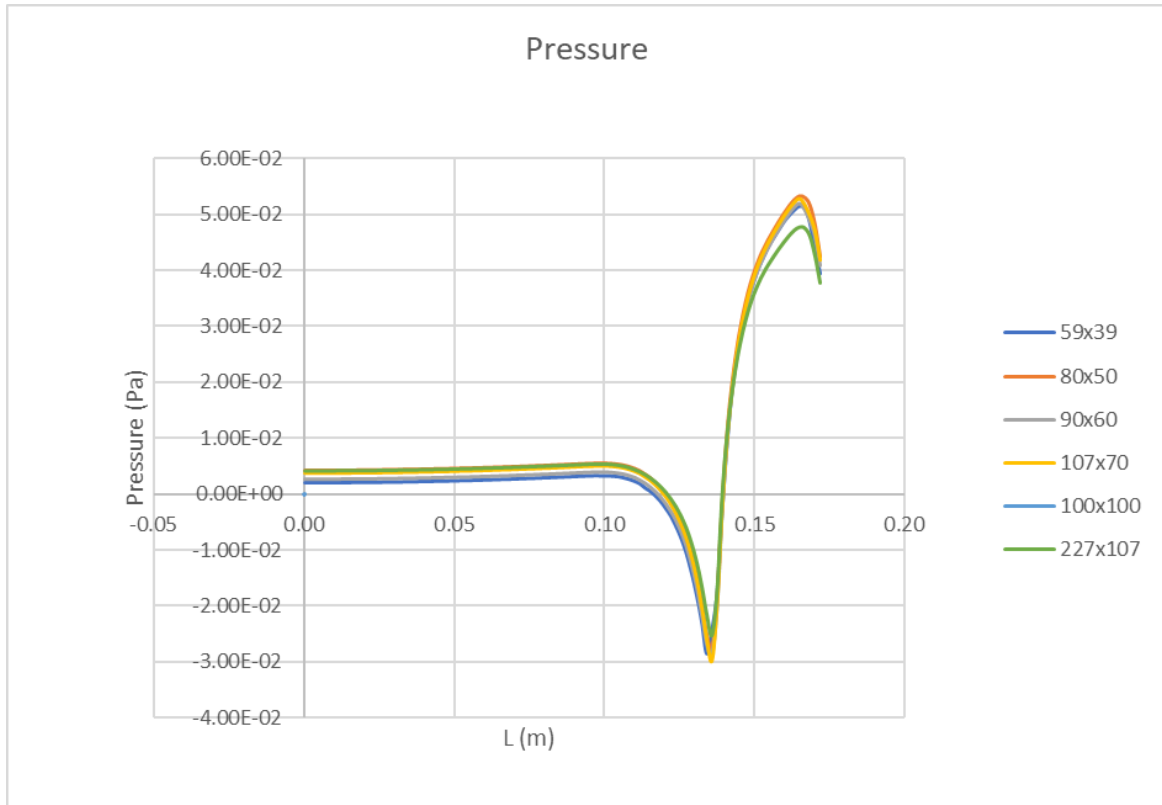
Σχήμα 1 Κατανομή Θερμοκρασίας για τα έξι διαφορετικά πλέγματα κάνοντας χρήση των συντελεστών χαλάρωσης της πρώτης στήλης του Πίνακα 2



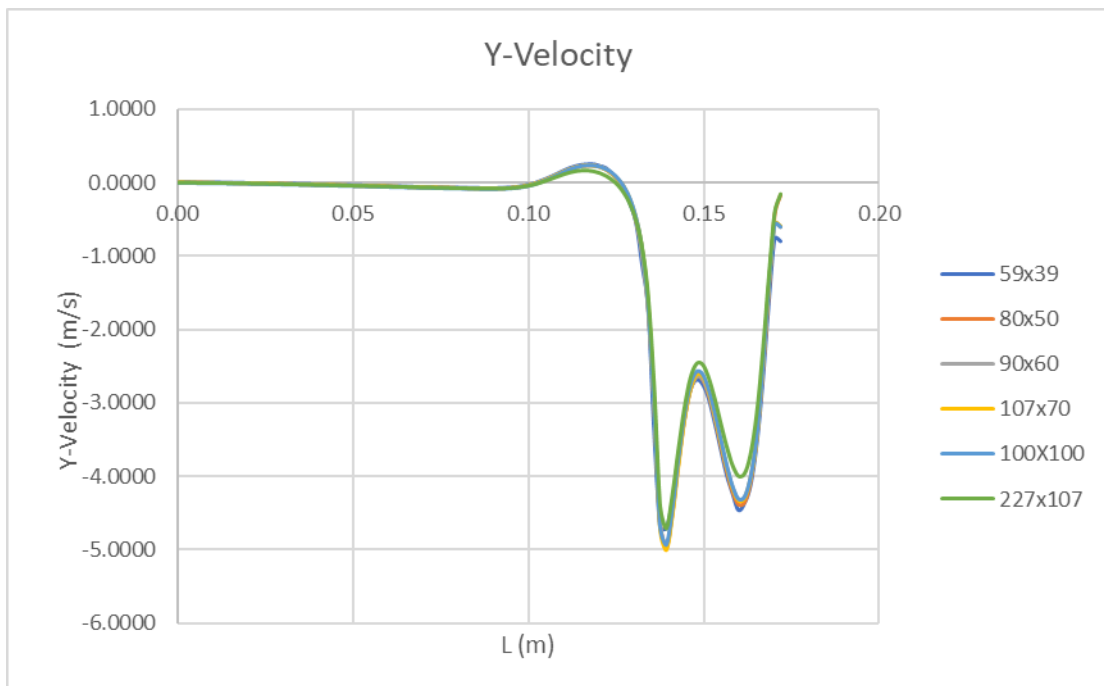
Σχήμα 2 Κατανομή Θερμοκρασίας για τα έξι διαφορετικά πλέγματα κάνοντας χρήση των συντελεστών χαλάρωσης της δεύτερης στήλης του Πίνακα 2



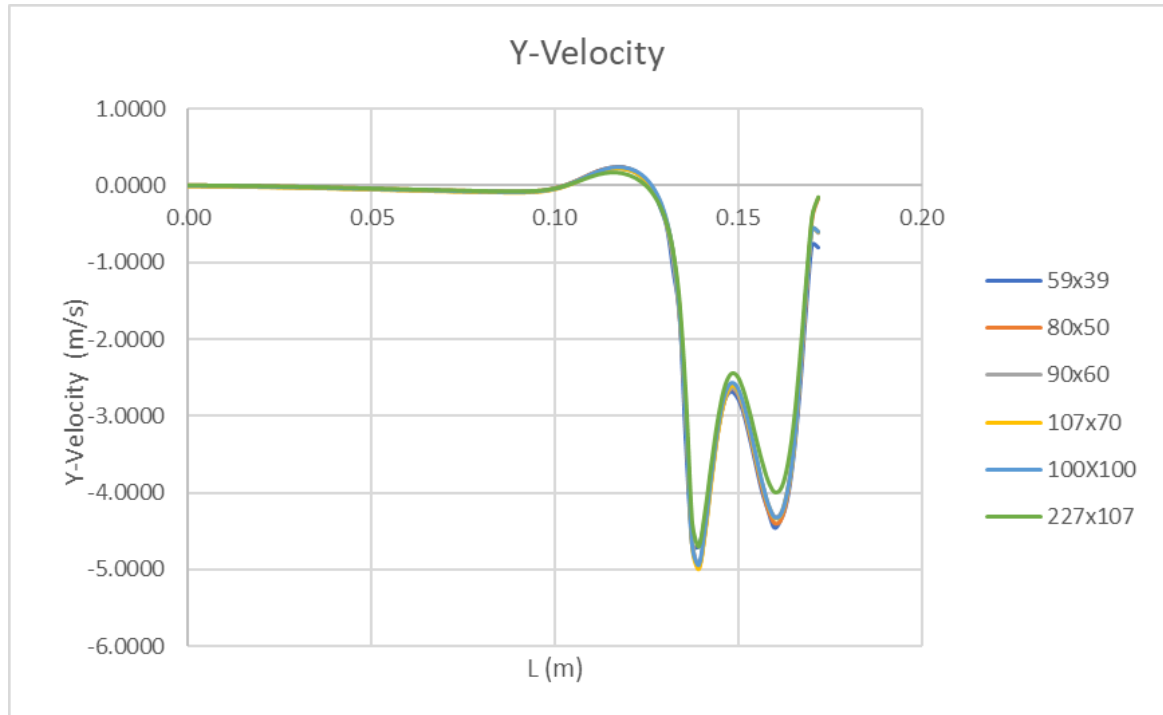
Σχήμα 3 Κατανομή Πίεσης για τα έξι διαφορετικά πλέγματα κάνοντας χρήση των συντελεστών χαλάρωσης της πρώτης στήλης του Πίνακα 2



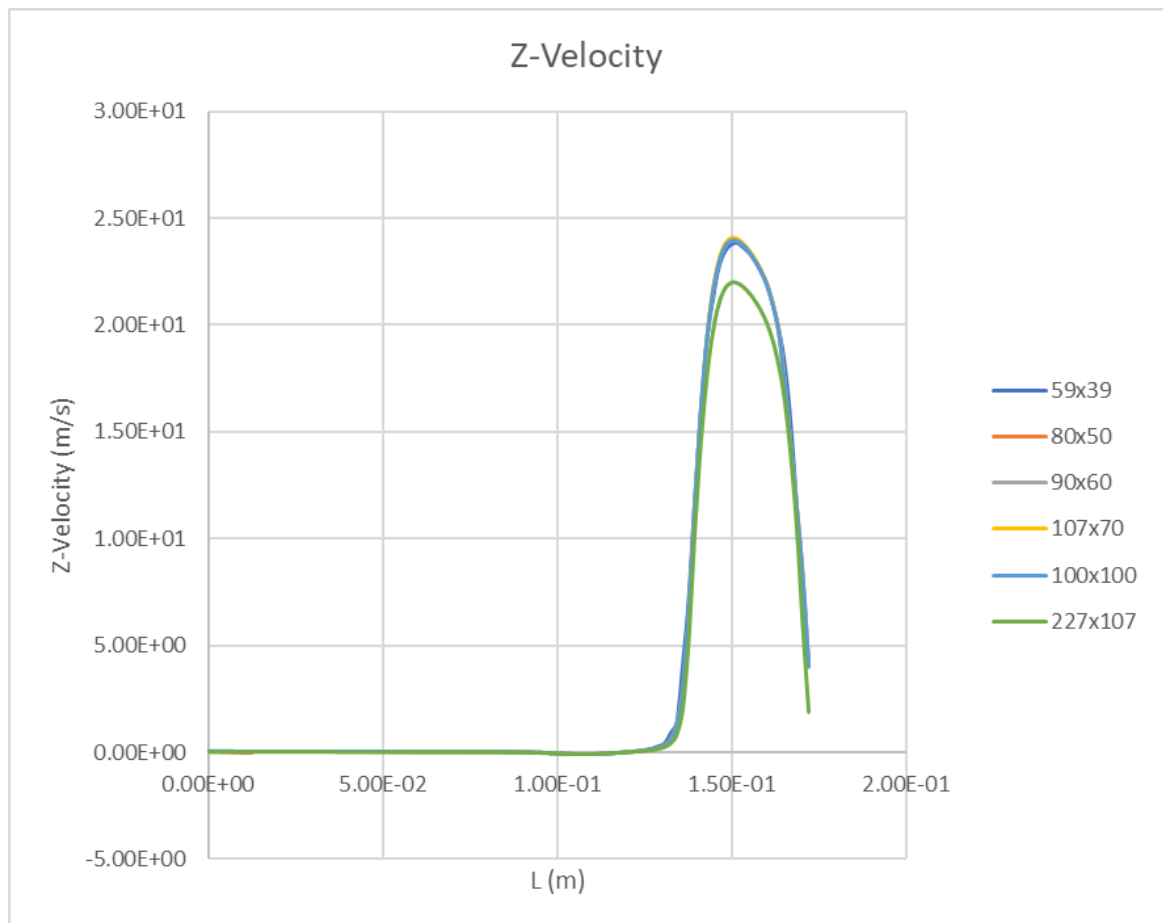
Σχήμα 4 Κατανομή Πίεσης για τα έξι διαφορετικά πλέγματα κάνοντας χρήση των συντελεστών χαλάρωσης της δεύτερης στήλης του Πίνακα 2



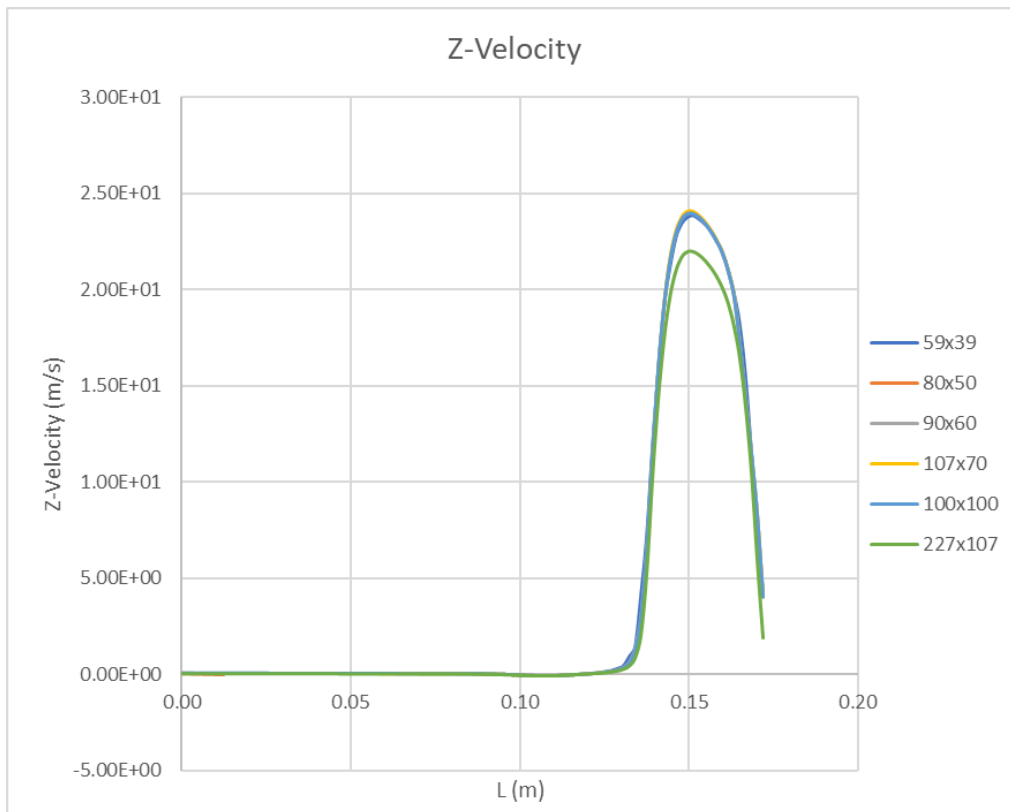
Σχήμα 5 Κατανομή Ταχύτητας στην Y διεύθυνση για τα έξι διαφορετικά πλέγματα κάνοντας χρήση της πρώτης στήλης του Πίνακα 2



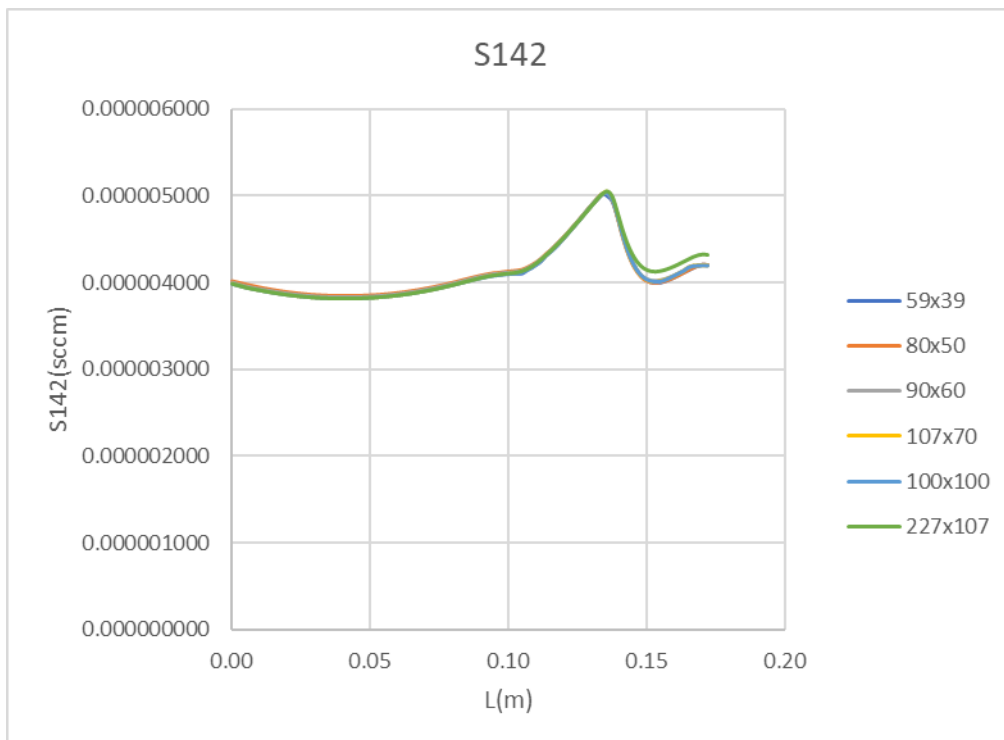
Σχήμα 6 Κατανομή Ταχύτητας στην Y διεύθυνση για τα έξι διαφορετικά πλέγματα κάνοντας χρήση των συντελεστών χαλάρωσης της δεύτερης στήλης του Πίνακα 2



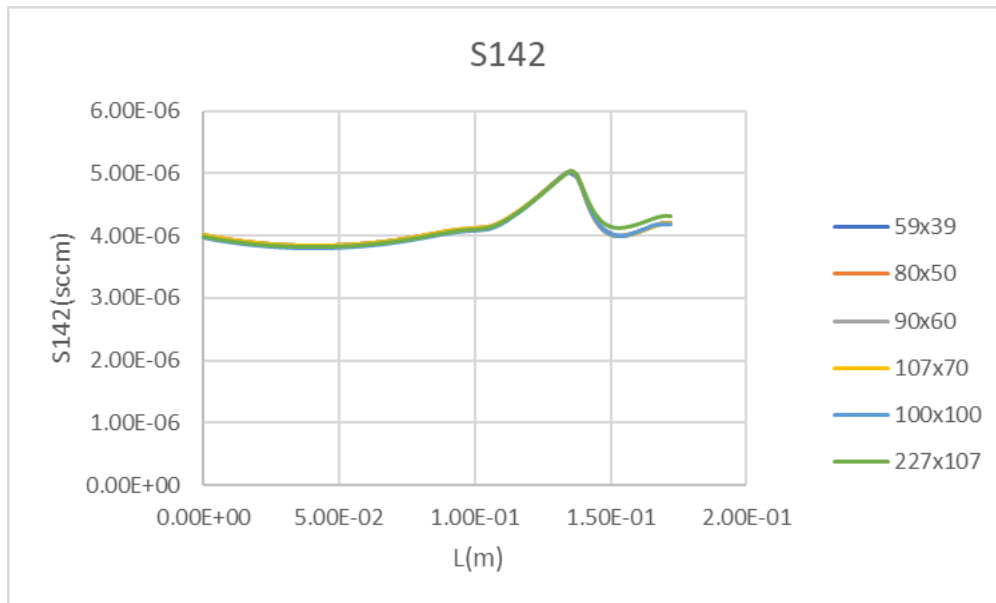
Σχήμα 7 Κατανομή Ταχύτητας στην Z διεύθυνση για τα έξι διαφορετικά πλέγματα κάνοντας χρήση της πρώτης στήλης του Πίνακα 2



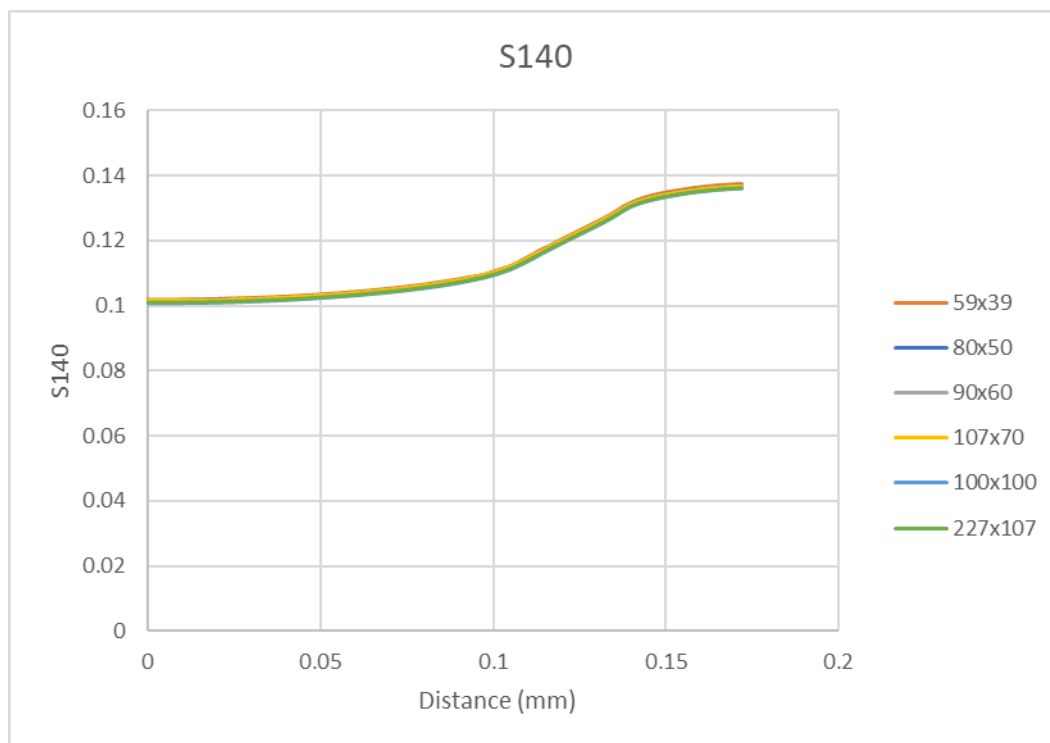
Σχήμα 8 Κατανομή Ταχύτητας στην Z διεύθυνση για τα έξι διαφορετικά πλέγματα κάνοντας χρήση της δεύτερης στήλης του Πίνακα 2



Σχήμα 9 Κατανομή στοιχείου του αντιδρώντος S142 για τα έξι διαφορετικά πλέγματα κάνοντας χρήση της πρώτης στήλης του Πίνακα 2



Σχήμα 10 Κατανομή στοιχείου του αντιδρώντος S142 για τα έξι διαφορετικά πλέγματα κάνοντας χρήση της δεύτερης στήλης του Πίνακα 2



F	Παράγοντας πύκνωσης	Αριθμός Πλεγματικών Κελιών			Σχετικό Σφάλμα %
		Ny	Nz	Nx	$\frac{F_{i+1} - F_i}{F_{i+1}} 100\%$
1	1 ^ο τρέξιμο	59	39	1	0.696
	2 ^ο τρέξιμο	59	39	1	0,696
2	1 ^ο τρέξιμο	80	50	1	2,354
	2 ^ο τρέξιμο	80	50	1	2,357

3	1° τρέξιμο	90	60	1	2,873
	2° τρέξιμο	90	60	1	2,869
4	1° τρέξιμο	107	70	1	1,903
	2° τρέξιμο	107	70	1	1,911
5	1° τρέξιμο	100	100	1	1,599
	2° τρέξιμο	100	100	1	1,604
6	1° τρέξιμο	227	107	1	-
	2° τρέξιμο	227	107	1	-

Ακολουθεί ο πίνακας που απεικονίζει τους χρόνους προσομοίωσης για το κάθε πλέγμα κάνοντας χρήση και των δύο περιπτώσεων συντελεστών υποχαλάρωσης του Πίνακα 2.

Πλέγμα	Αριθμός κελιών κατά y	Αριθμός κελιών κατά z	Σύνολο κελιών	Cpu Time 1 st run	Cpu Time 2 nd run
1	50	39	1950	596 s	600 s
2	80	50	4000	900 s	992 s
3	90	60	5400	2343 s	2453 s
4	107	70	7490	3364 s	3437 s
5	100	100	10000	4399 s	6313 s
6	227	107	24289	10612 s	11203 s

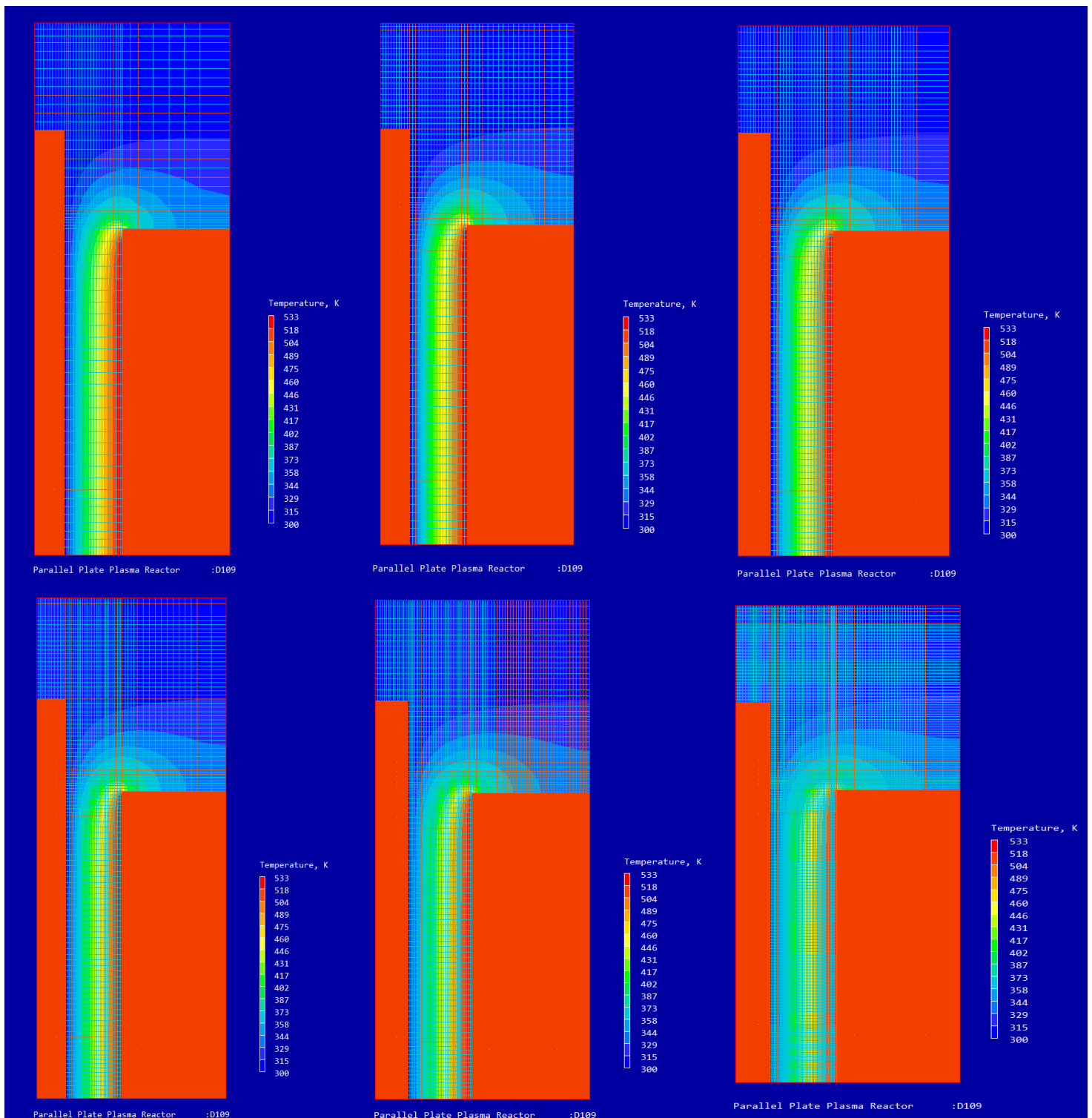
Πίνακας 4 Αποτελέσματα χρόνων σύγκλισης του κάθε πλέγματος κάνοντας χρήση των συντελεστών υποχαλάρωσης του Πίνακα 2

Από τα παραπάνω συγκριτικά διαγράμματα καθώς και από τους Πίνακες 3 και 4, φαίνεται ότι το πλέγμα 107x70 είναι το πλέον ανεξάρτητο πλέγμα εφόσον το σφάλμα του από το προηγούμενο είναι 2,8 % ενώ η διαφορά αυτού από το αμέσως πιο πυκνό είναι 1,9 %. Επομένως, για οικονομία υπολογιστικού κόστους επιλέγουμε το προαναφερθέν πλέγμα. Επίσης, ως συντελεστές χαλάρωσης θα χρησιμοποιήσουμε αυτούς της στήλης 1 του Πίνακα 2. Εφόσον η επίλυση γίνεται σε πιο σύντομο χρόνο (βλ. Πίνακα 4), ενώ το σφάλμα από πλέγμα σε πλέγμα παραμένει σχεδόν το ίδιο (βλ. Πίνακα 3).

Πίνακας 3 Τιμές απόκλισης από το πιο πυκνό πλέγμα στο πιο αραιό για τους συντελεστές χαλάρωσης του Πίνακα 2

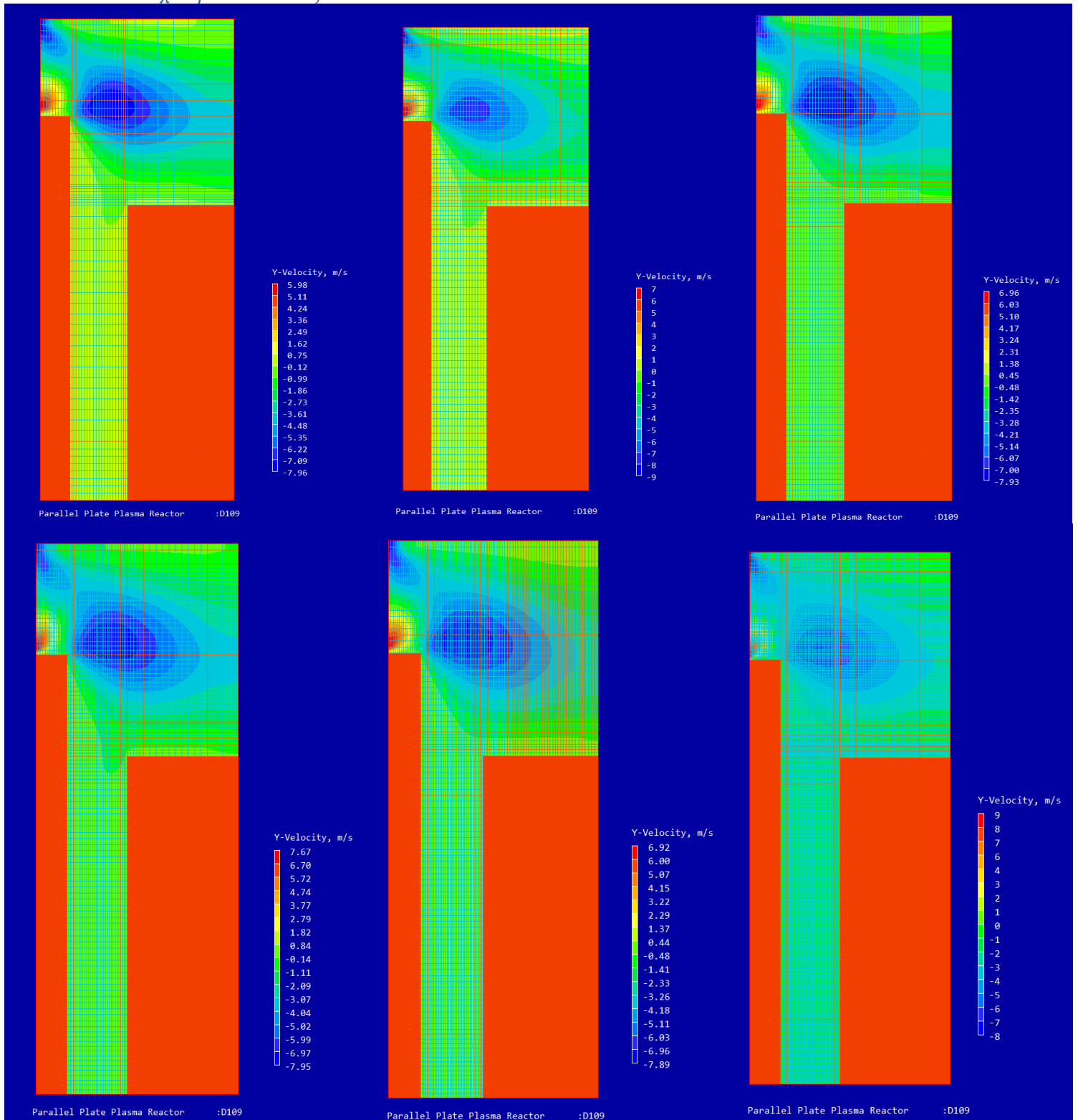
Παρακάτω παρουσιάζονται οι ισοϋψείς των μεταβλητών επίλυσης για τα διαφορετικά πλέγματα που εξετάστηκαν.

Ισοψείς καμπύλες για τα διάφορα πλέγματα Θερμοκρασία



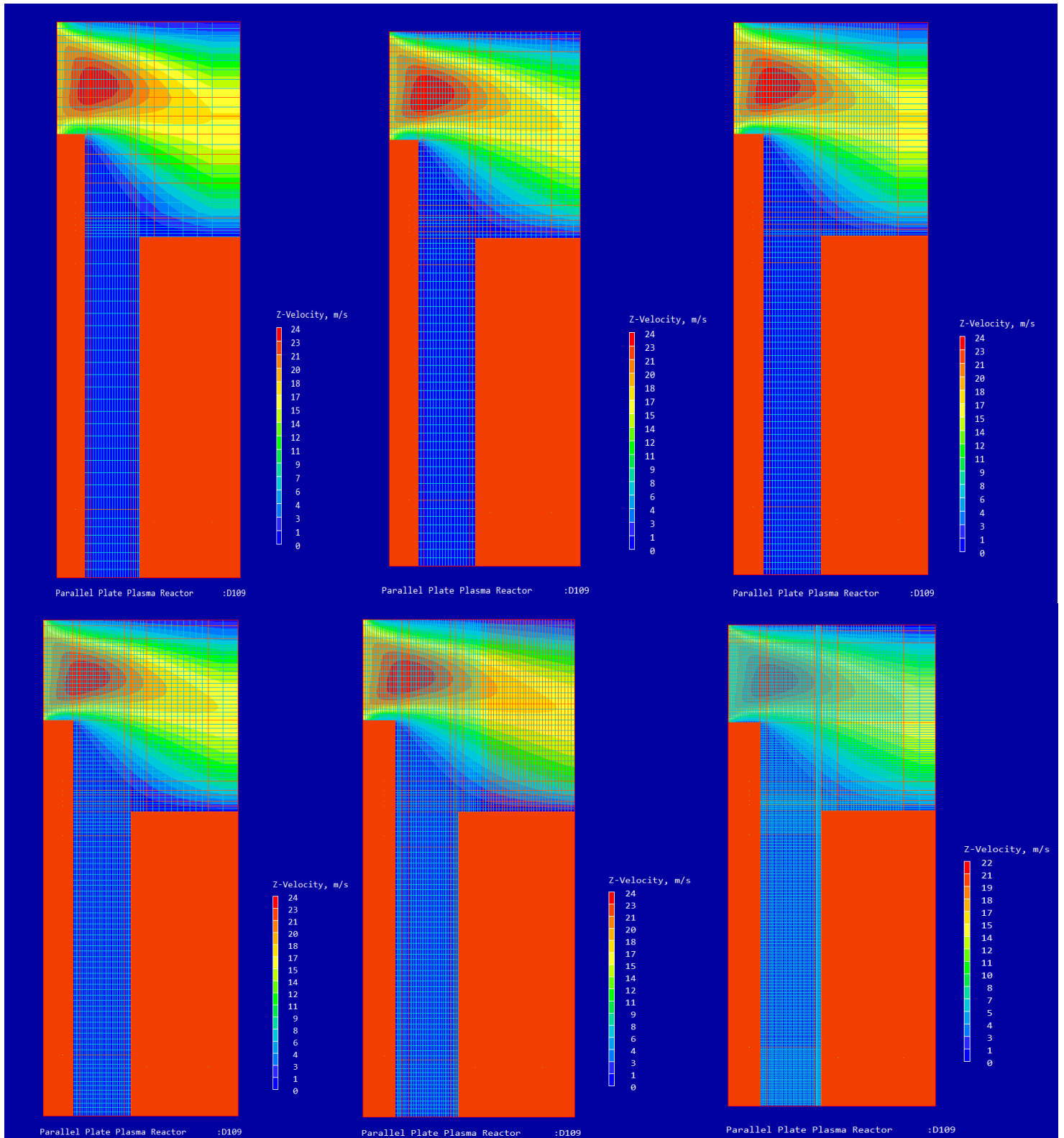
Εικόνα 2 Ισοψείς καμπύλες θερμοκρασίας για τα πλέγματα 59x39,80x50,90x60,107x70,100x100 & 227x107

Ταχύτητα στον Y- άξονα



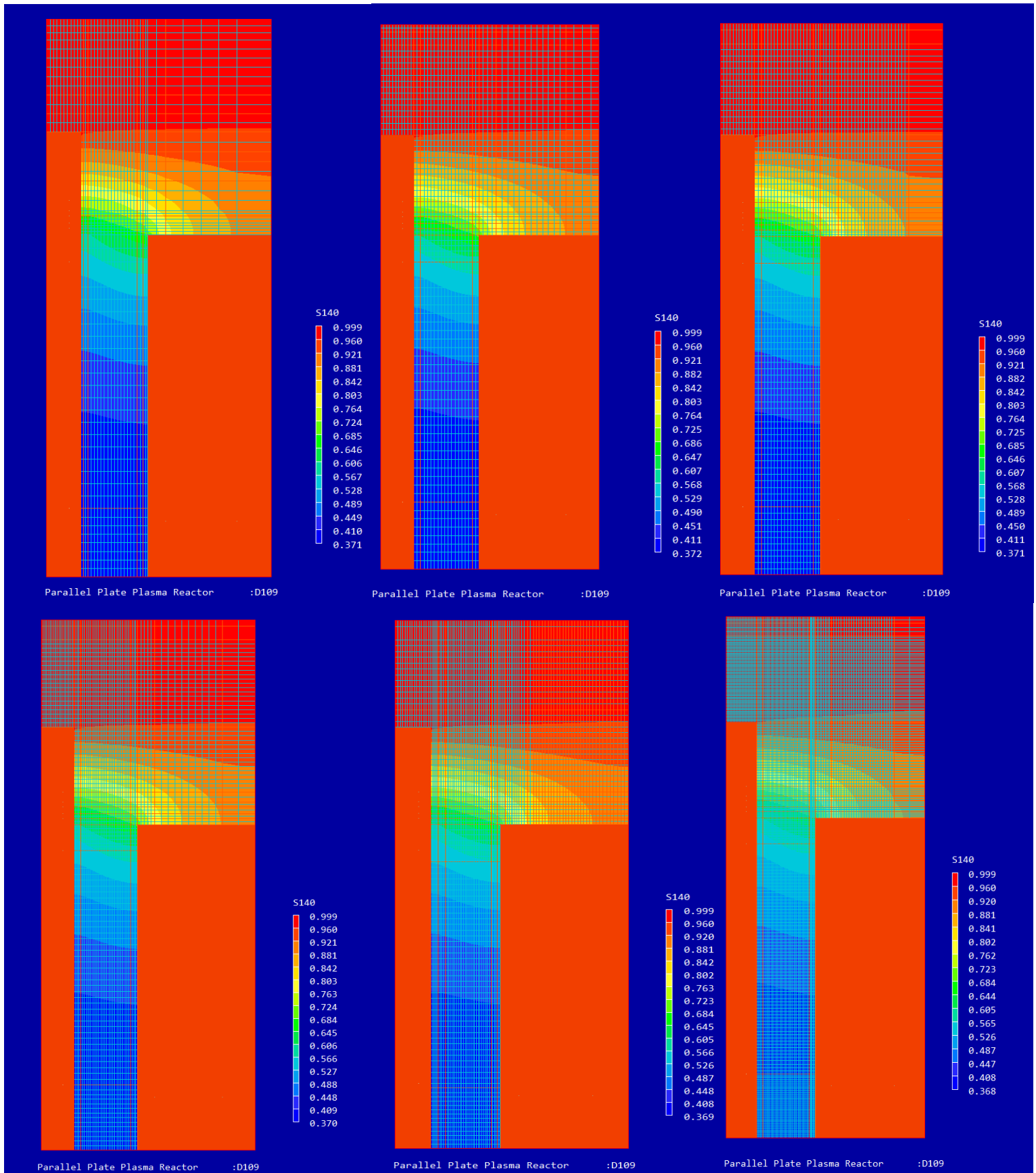
Εικόνα 3 Ισουφείς καμπύλες ταχύτητας στον Y άξονα για τα πλέγματα 59x39,80x50,90x60,107x70,100x100 & 227x107

Ταχύτητα στον Z άξονα



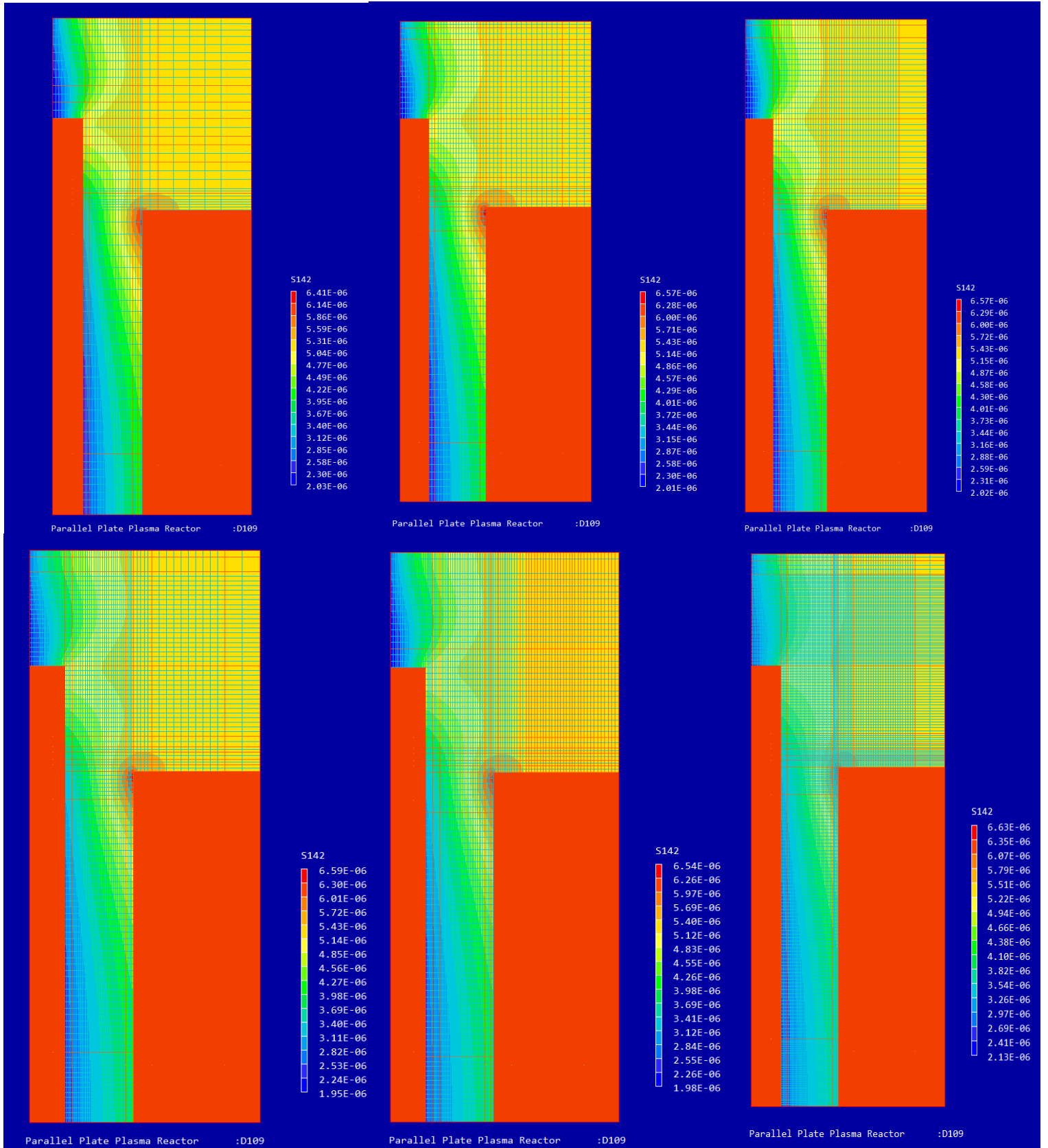
Εικόνα 4 Ισοψείς καμπύλες ταχύτητας στον Z άξονα για τα πλέγματα 59x39,80x50,90x60,107x70,100x100 & 227x107

Σιλάνιο S140



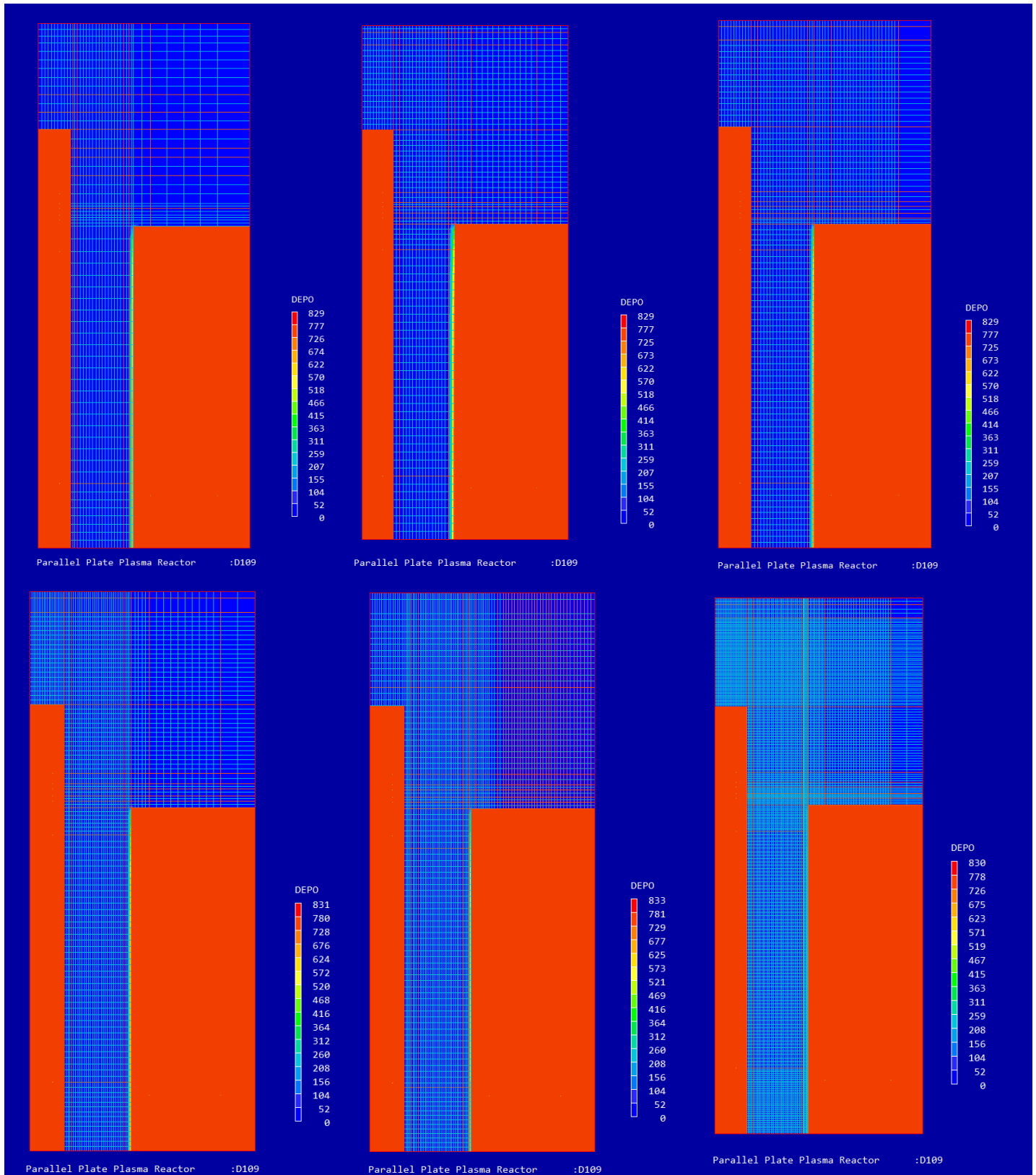
Εικόνα 5 Ισοψείς καμπύλες σιλανίου SiH_4 για τα πλέγματα $59 \times 39, 80 \times 50, 90 \times 60, 107 \times 70, 100 \times 100$ & 227×107

Αντιδρών S142



Εικόνα 6 Ισοψείς καμπύλες αντιδρώντος S142 για τα πλέγματα 59x39,80x50,90x60,107x70,100x100 & 227x107

Ρυθμός Απόθεσης Ατμού (DEPO)



Εικόνα 7 Ισομετρικοί ρυθμοί απόθεσης για τα πλέγματα 59x39,80x50,90x60,107x70,100x100 & 227x107

Τα ποιοτικά διαγράμματα των ισοϋψών καμπυλών δεν παρουσιάζουν ιδιαίτερες διαφορές στην κατανομή των μεταβλητών επίλυσης, δηλαδή της θερμοκρασίας, της οριζόντιας ταχύτητας Vz, της κατακόρυφης ταχύτητας Vy και των κλασμάτων μάζας των αντιδρώντων – σιλανίου SiH4. Οι διαφορές στις τιμές των μεταβλητών για τα διαφορετικά πλέγματα είναι περισσότερο εμφανείς στις ποσοτικές συγκριτικές καμπύλες οι οποίες παρατέθηκαν στην αρχή του κεφαλαίου (Βλ. Σχήμα 1-9).

Συνοψίζοντας, η παραμετροποίηση που θα ακολουθήσει θα γίνει για το ανεξάρτητο πλέγμα 107 x70 και θα έχει ως συντελεστές χαλάρωσης τους παρακάτω.

Μεταβλητή	Συντελεστής Χαλάρωσης
P	3.0E-01
V	1.0E+00
W	1.0E+00
S140	1.0E+00
S142	1.0E+00
S145	1.0E+00
S158	1.0E+00
S80	1.0E+00
T	3.0E-01

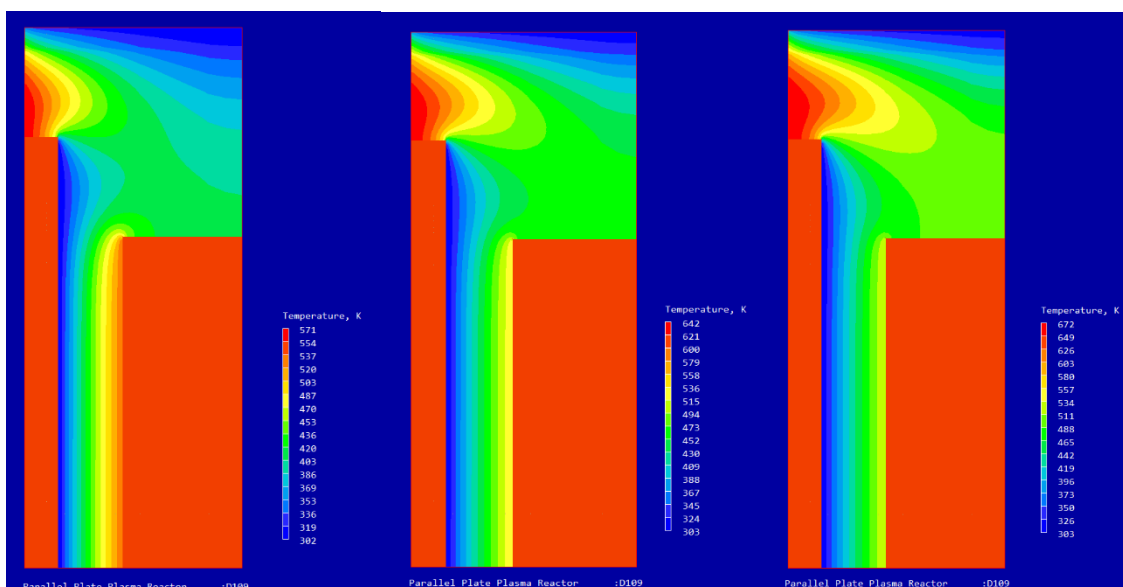
Παραμετροποίηση πλέγματος 107x70

Η παραμετροποίηση στον χημικό αντιδραστήρα πλάσματος θα γίνει στο ανεξάρτητο πλέγμα 107x70. Οι περιπτώσεις που εξετάστηκαν ήταν για θερμοκρασίες $T=700\text{ K}$, $T=800\text{ K}$ & $T=900\text{ K}$. Κάθε μία από αυτές τις θερμοκρασίες προσομοιώθηκε με ταχύτητες εισόδου $V_z=1.344\text{ m/s}$, $V_z=2.344$ & $V_z=3.344\text{ m/s}$.

Προσομοίωση	Θερμοκρασία T(K)	Ταχύτητα Vz(m/s)
1	700	1,344
2	700	2,344
3	700	3,344
4	800	1,344
5	800	2,344
6	800	3,344
7	900	1,344
8	900	2,344
9	900	3,344

Παρακάτω ακολουθούν τα διαγράμματα των ισοϋψών καμπύλων όπως προέκυψαν από τις προσομοιώσεις.

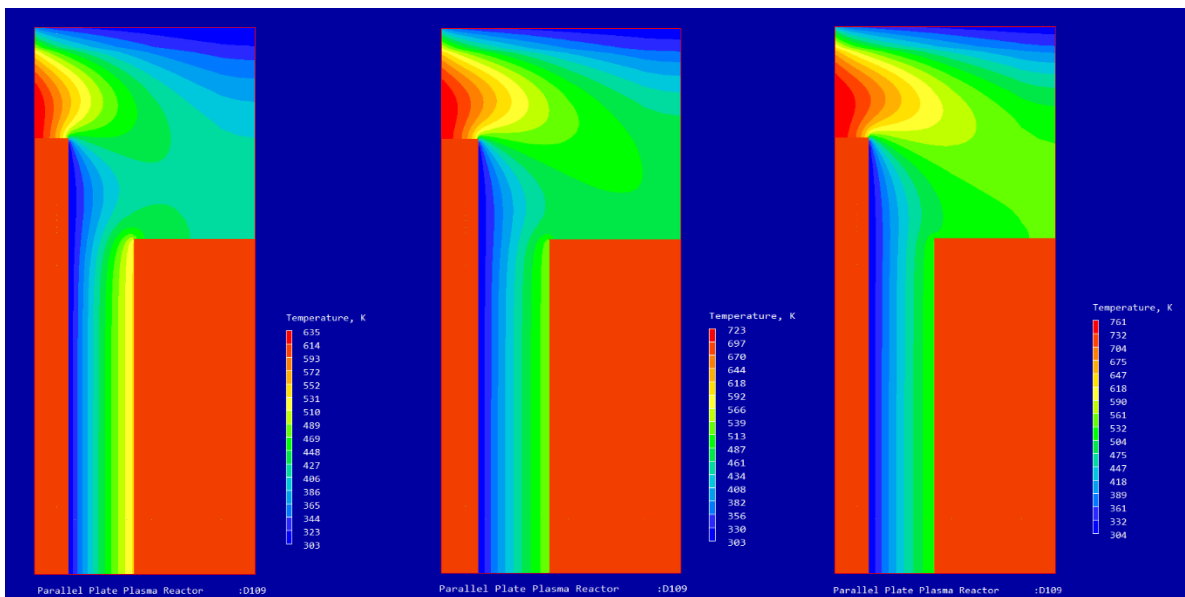
Θερμοκρασία



Εικόνα 9 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 1

Εικόνα 8 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 2

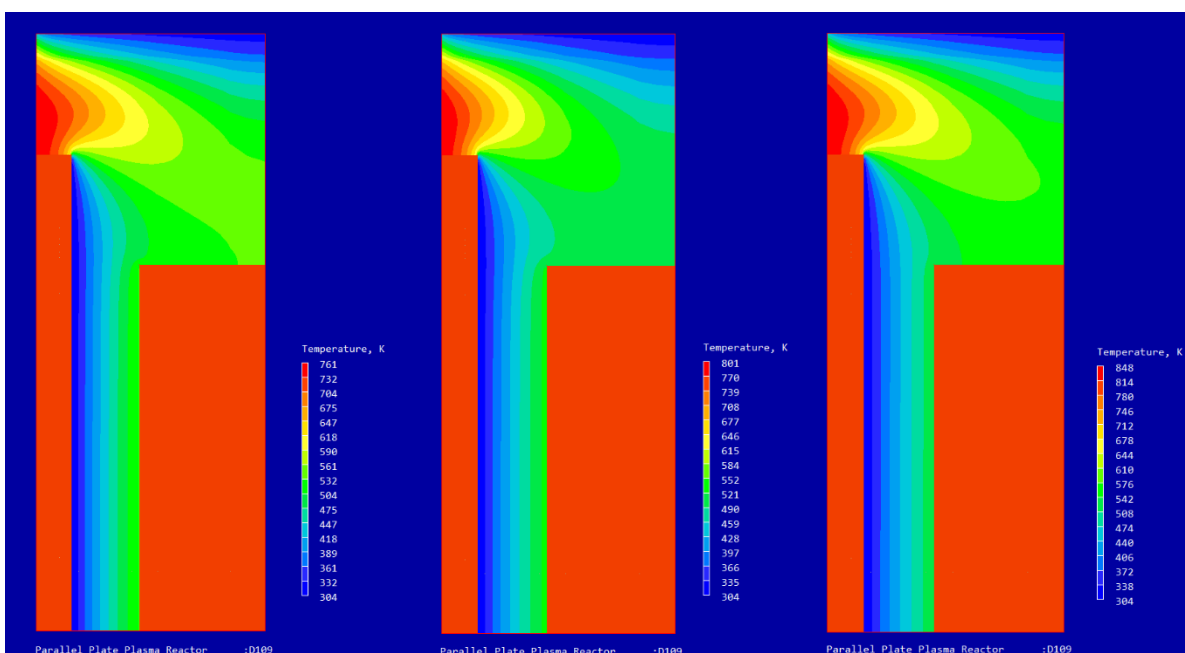
Εικόνα 10 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 3



Εικόνα 16 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 4

Εικόνα 14 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 5

Εικόνα 15 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 6

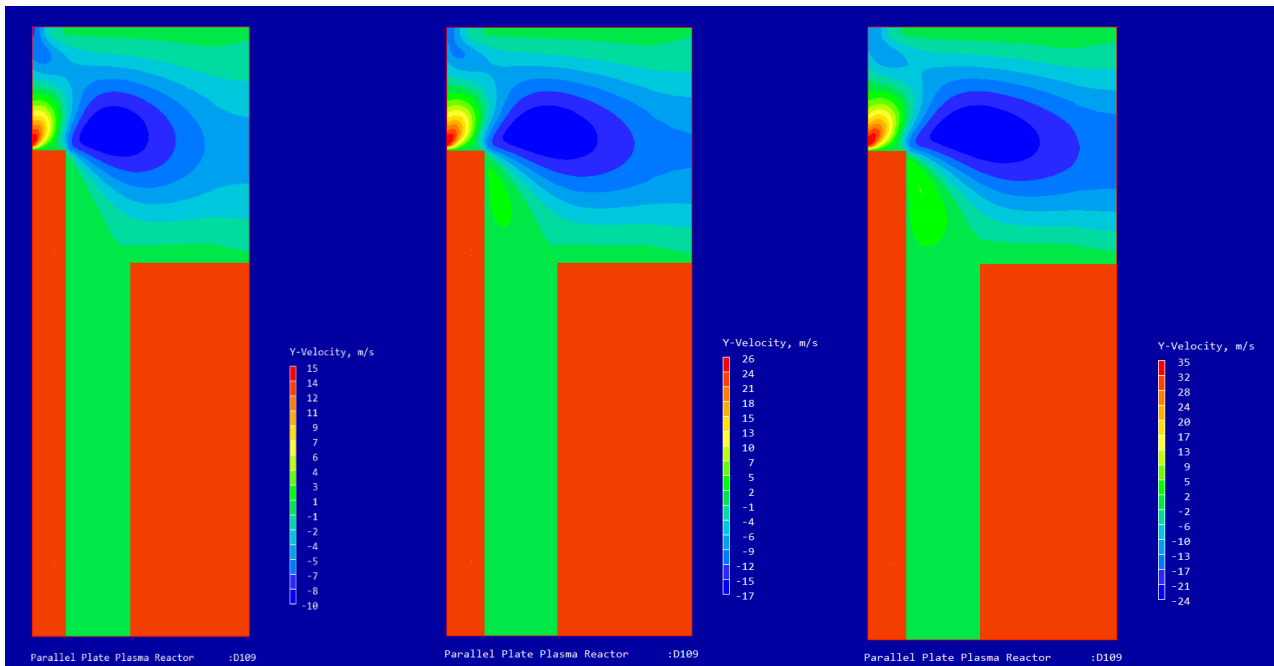


Εικόνα 13 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 7

Εικόνα 11 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 8

Εικόνα 12 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων θερμοκρασίας T για την περίπτωση 9

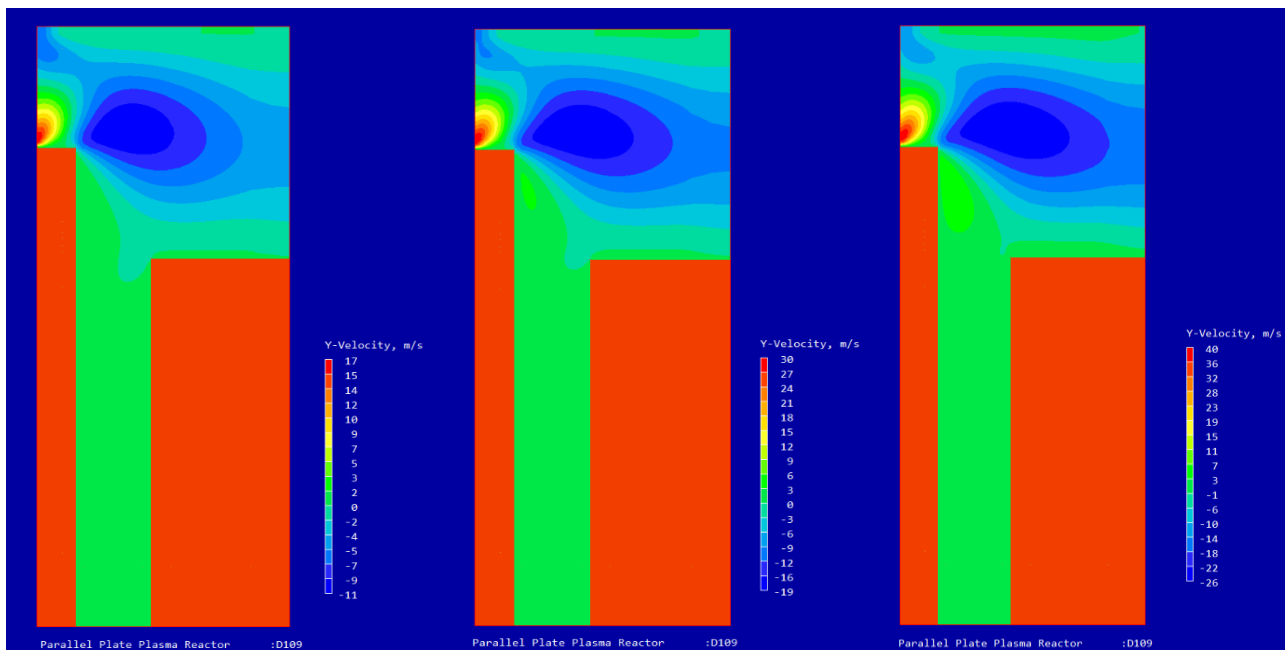
Ταχύτητα στον άξονα Y



Εικόνα 22 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας V_y για την περίπτωση 1

Εικόνα 21 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας V_y για την περίπτωση 2

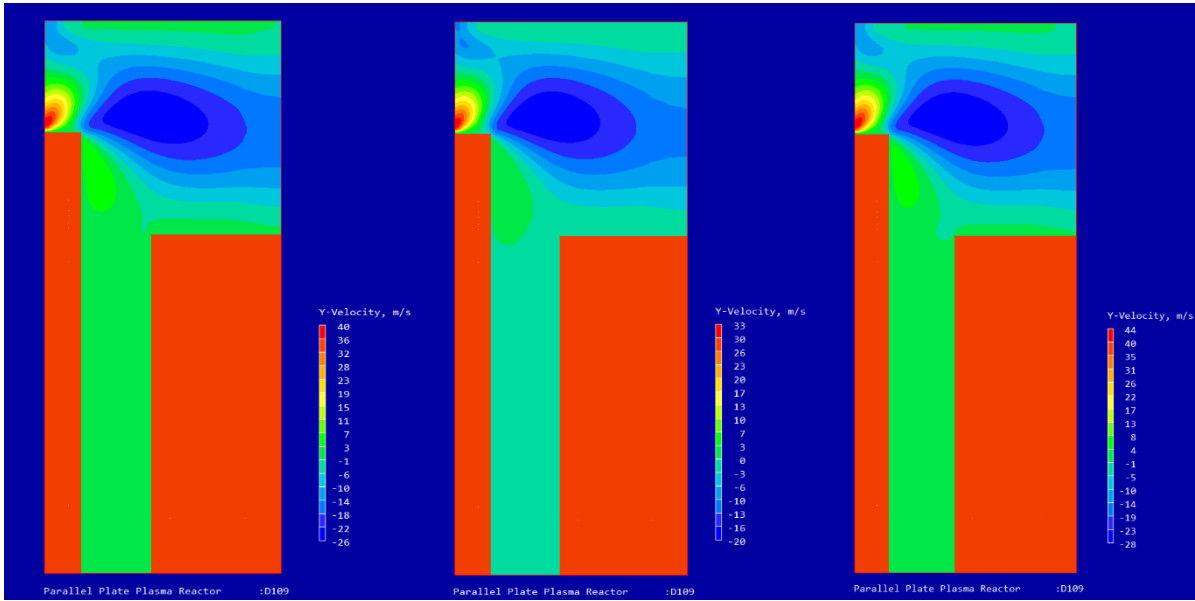
Εικόνα 20 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας V_y για την περίπτωση 3



Εικόνα 18 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας V_y για την περίπτωση 4

Εικόνα 17 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας V_y για την περίπτωση 5

Εικόνα 19 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας V_y για την περίπτωση 6

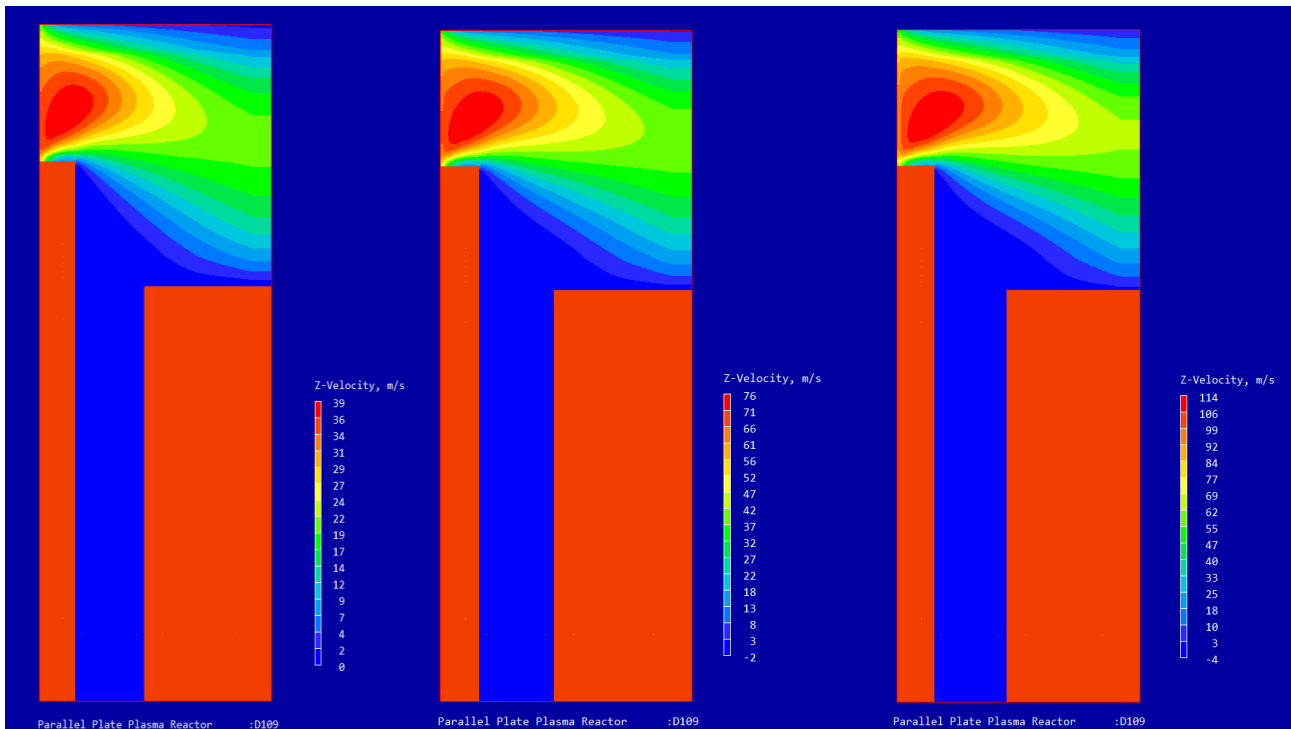


Εικόνα 23 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας V_y για την περίπτωση 7

Εικόνα 24 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας V_y για την περίπτωση 8

Εικόνα 25 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας V_y για την περίπτωση 9

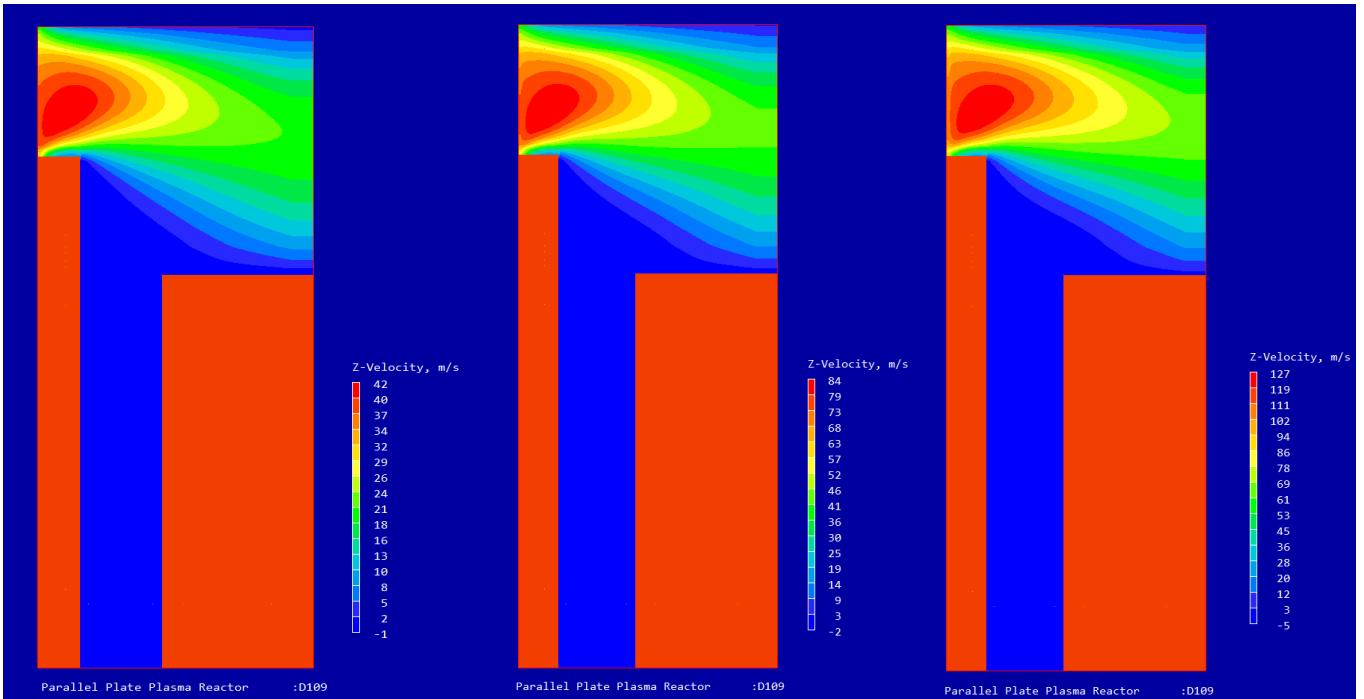
Ταχύτητα V_z



Εικόνα 26 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας V_z για την περίπτωση 1

Εικόνα 28 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας V_z για την περίπτωση 2

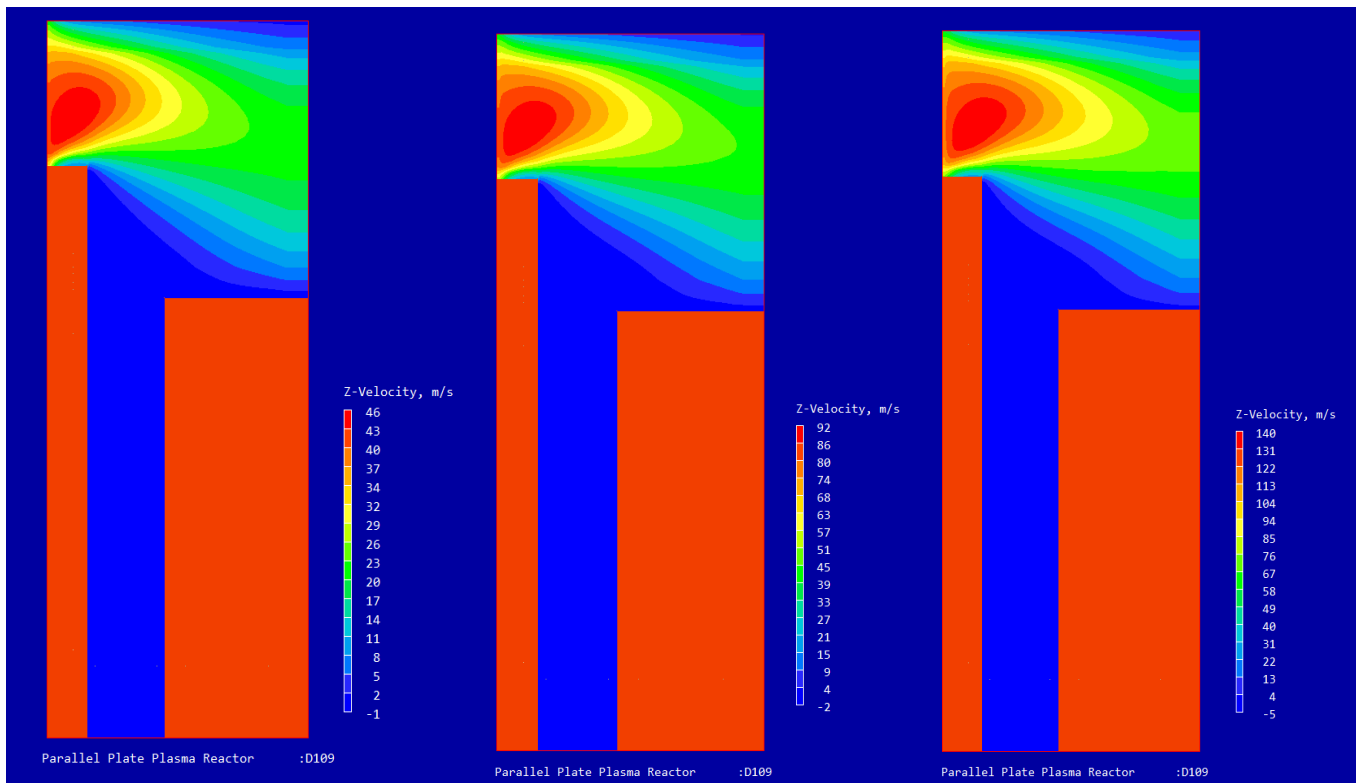
Εικόνα 27 Απεικόνιση ισοψών καμπύλων ταχύτητας V_z για την περίπτωση 3



Εικόνα 29 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας Vz για την περίπτωση 4

Εικόνα 31 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας Vz για την περίπτωση 5

Εικόνα 29 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας Vz για την περίπτωση 6

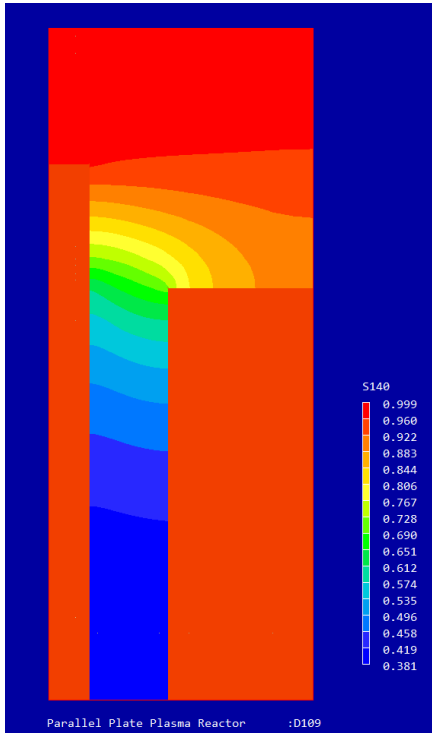


Εικόνα 32 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας Vz για την περίπτωση 7

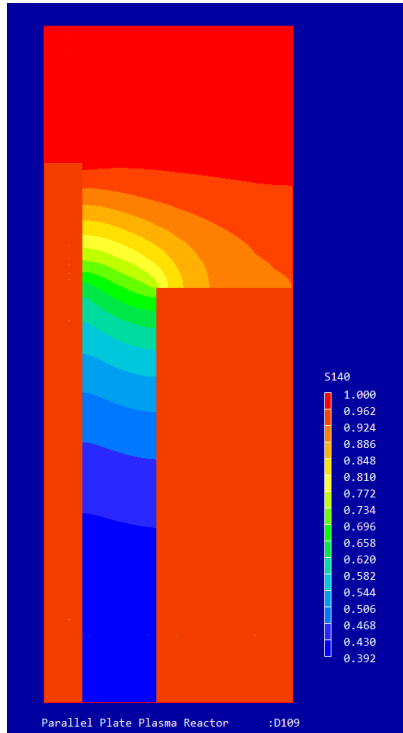
Εικόνα 33 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας Vz για την περίπτωση 8

Εικόνα 34 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων ταχύτητας Vz για την περίπτωση 9

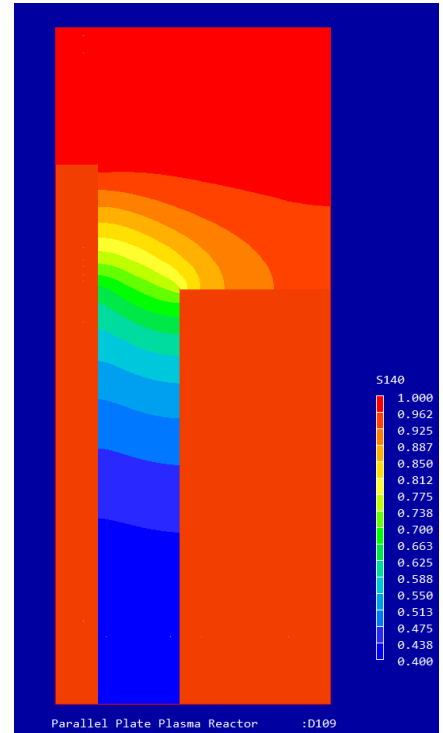
Σιλάνιο S140



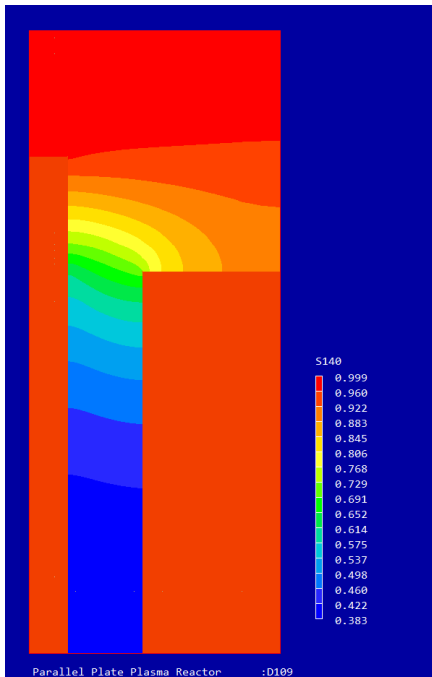
Εικόνα 35 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιλανίου S140 για την περίπτωση 1



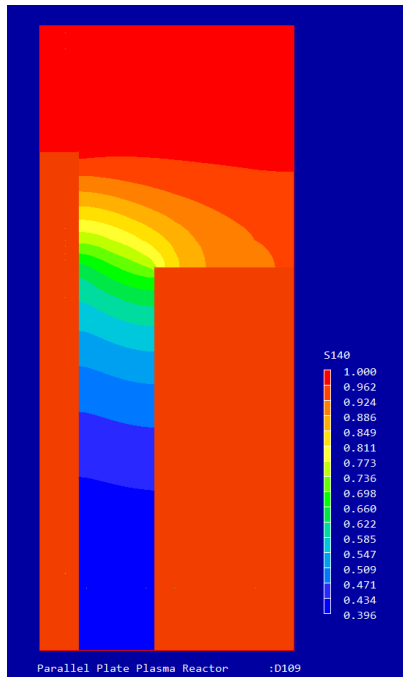
Εικόνα 36 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιλανίου S140 για την περίπτωση 2



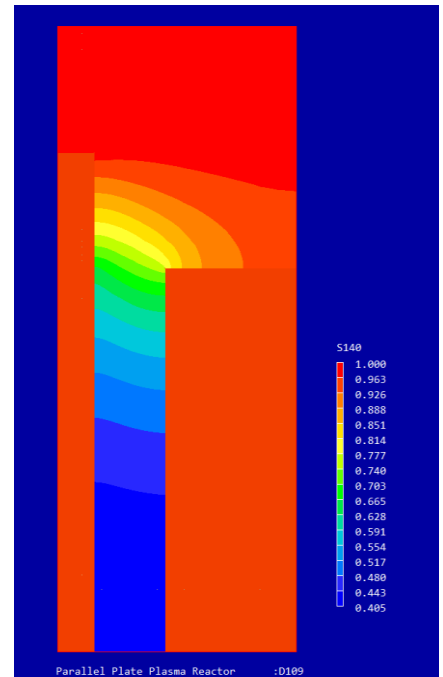
Εικόνα 37 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιλανίου S140 για την περίπτωση 3



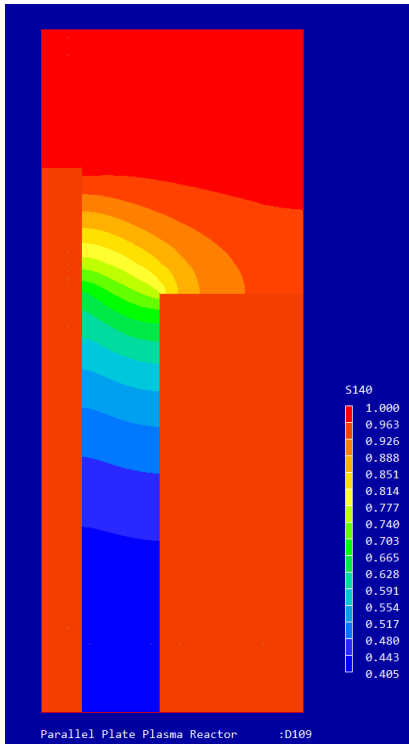
Εικόνα 38 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιλανίου S140 για την περίπτωση 4



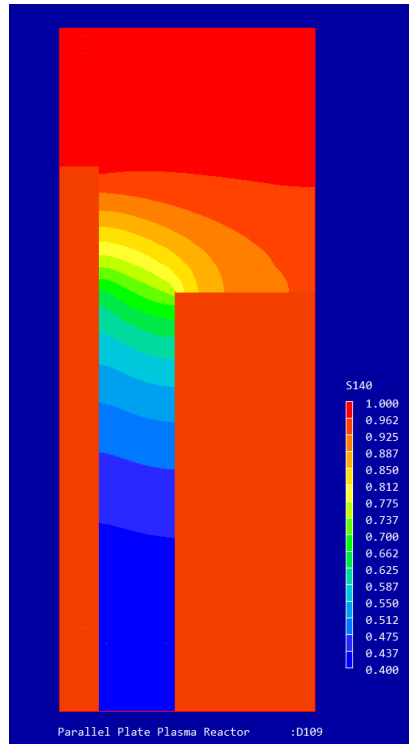
Εικόνα 39 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιλανίου S140 για την περίπτωση 5



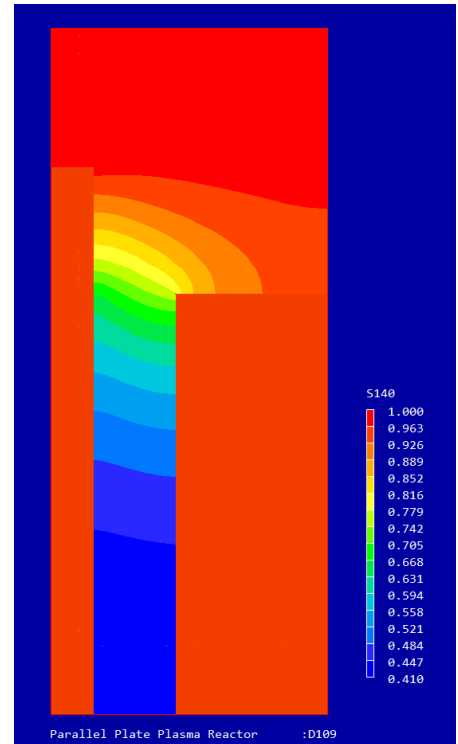
Εικόνα 40 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιλανίου S140 για την περίπτωση 6



Εικόνα 35 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιλανίου S140 για την περίπτωση 7

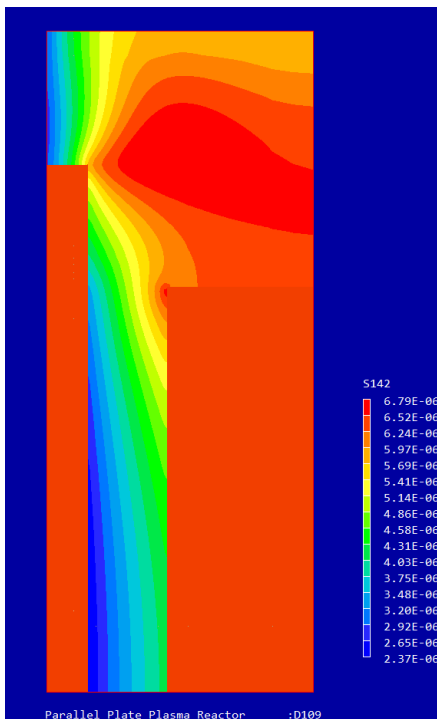


Εικόνα 36 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιλανίου S140 για την περίπτωση 8

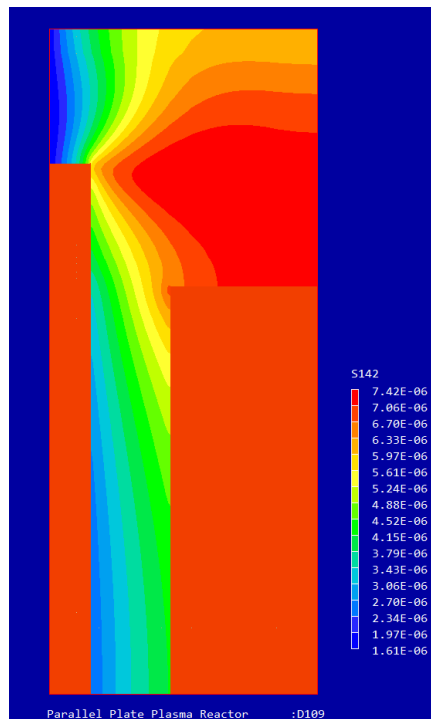


Εικόνα 37 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιλανίου S140 για την περίπτωση 9

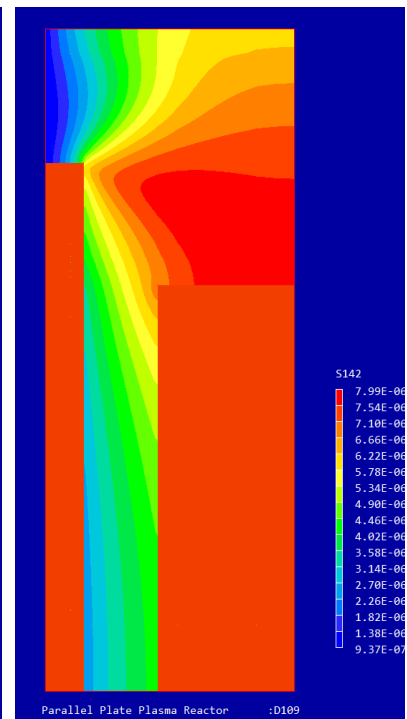
Αντιδρών S142



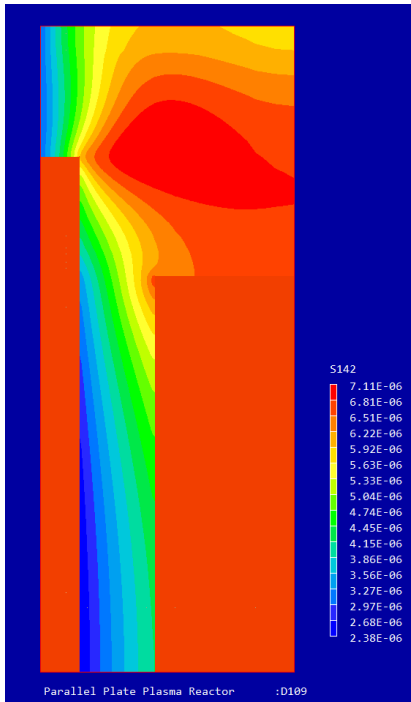
Εικόνα 38 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων αντιδρώντος S142 για την περίπτωση 1



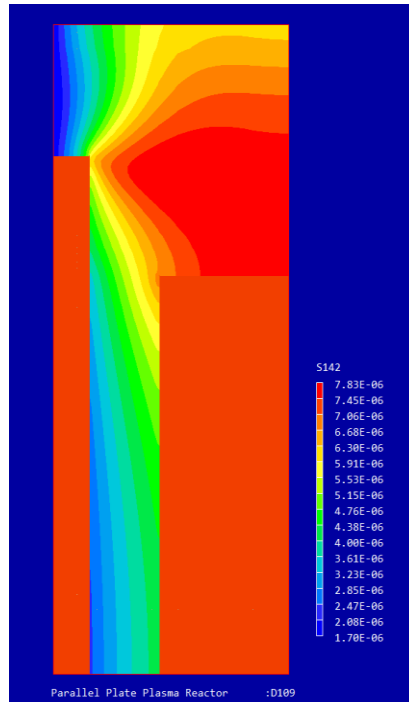
Εικόνα 39 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων αντιδρώντος S142 για την περίπτωση 8



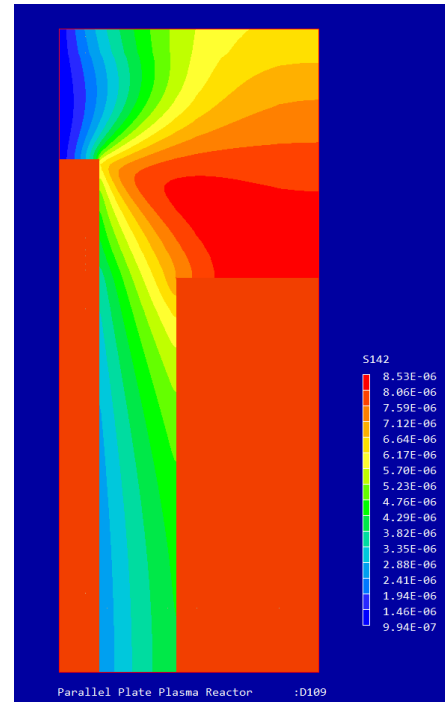
Εικόνα 40 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων αντιδρώντος S142 για την περίπτωση 9



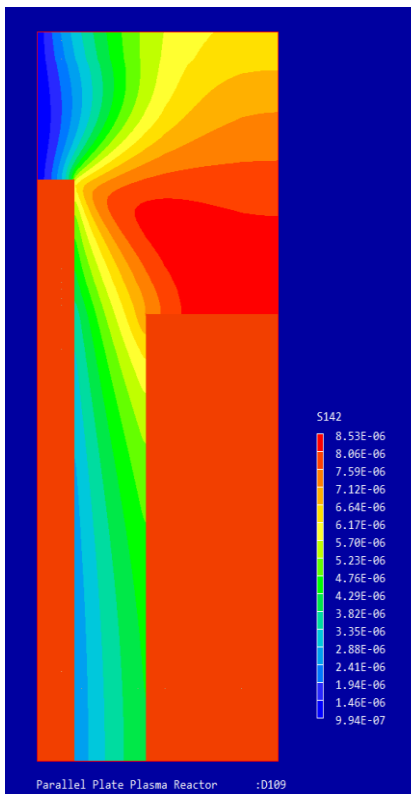
Εικόνα 41 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιτανίου S140 για την περίπτωση 1



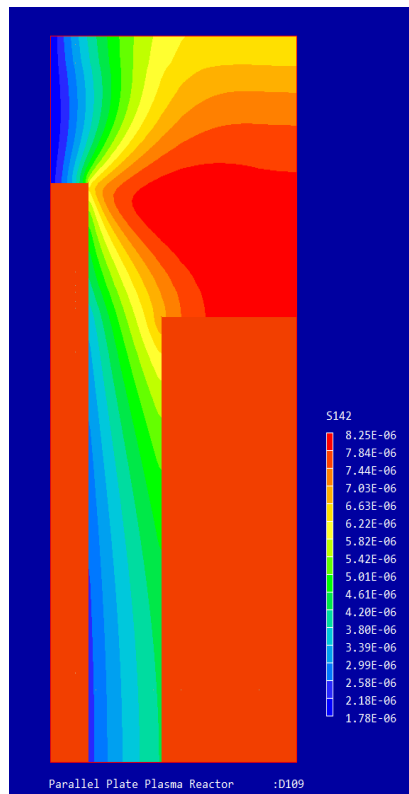
Εικόνα 42 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιτανίου S140 για την περίπτωση 2



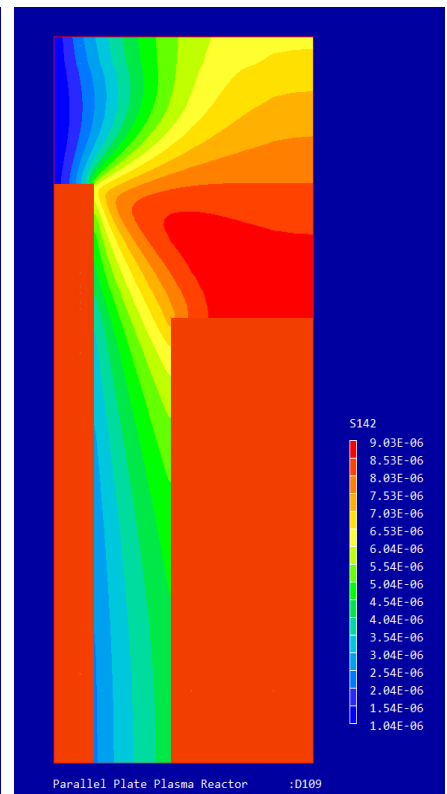
Εικόνα 43 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιτανίου S140 για την περίπτωση 3



Εικόνα 44 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιτανίου S140 για την περίπτωση 4

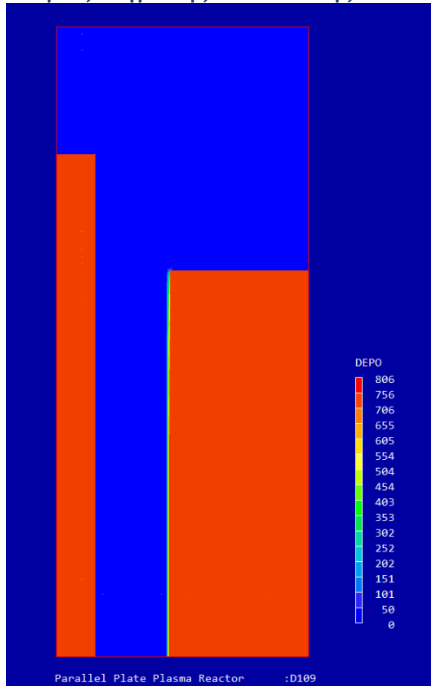


Εικόνα 45 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιτανίου S140 για την περίπτωση 5

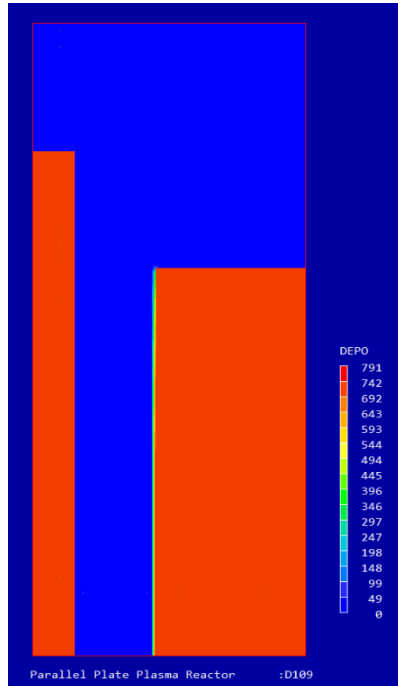


Εικόνα 46 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων σιτανίου S140 για την περίπτωση 6

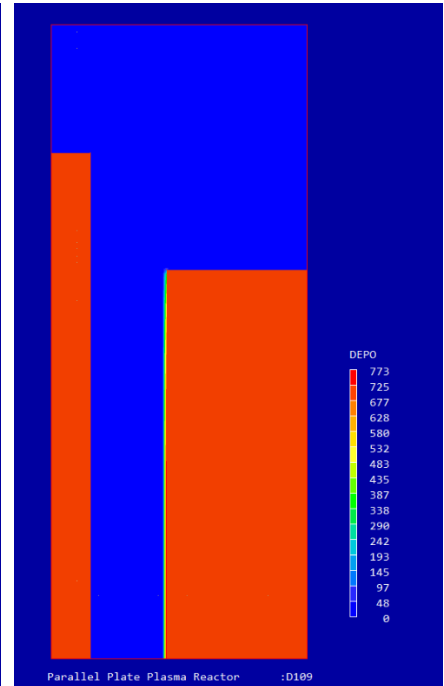
Ρυθμός Χημικής Απόθεσης



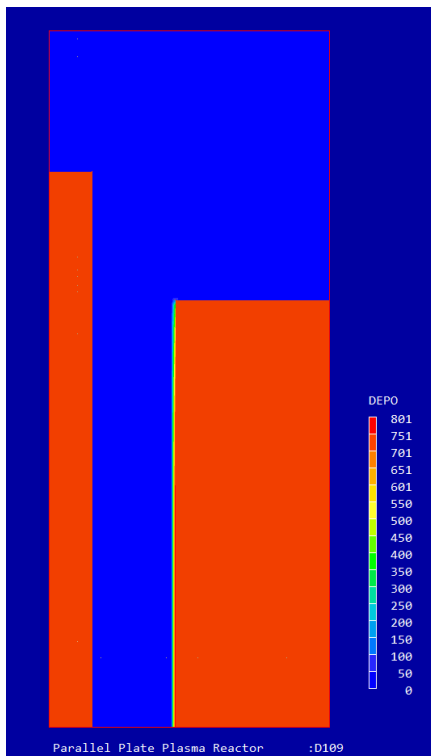
Εικόνα 47 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 1



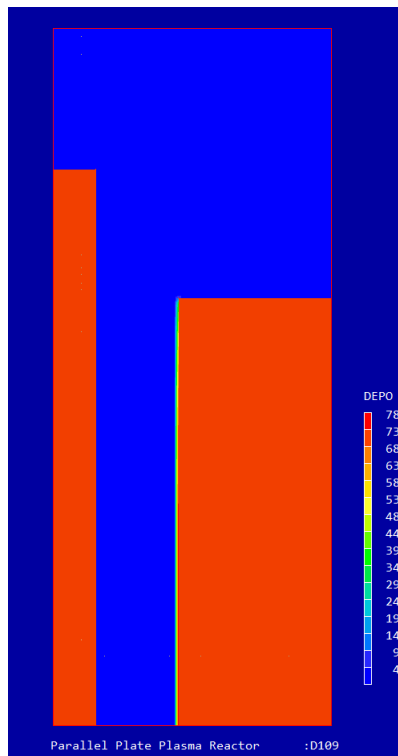
Εικόνα 48 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 2



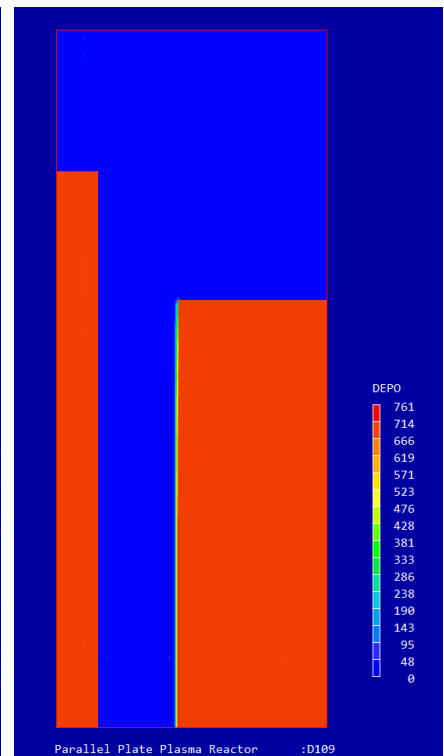
Εικόνα 49 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 3



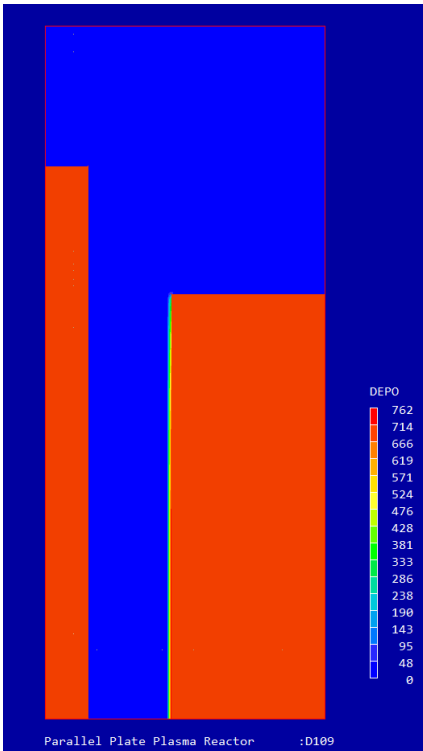
Εικόνα 50 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 4



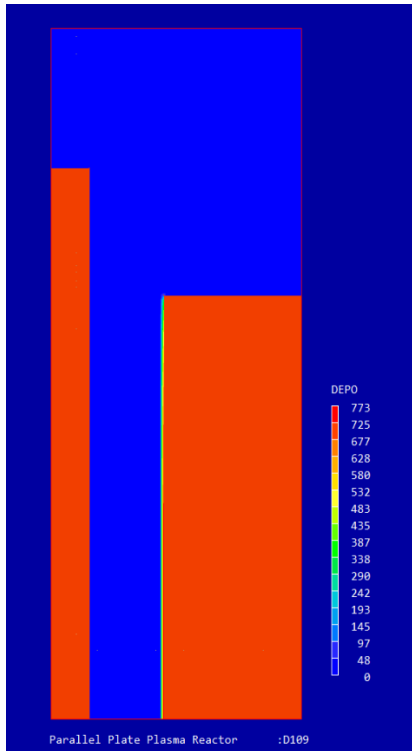
Εικόνα 51 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 5



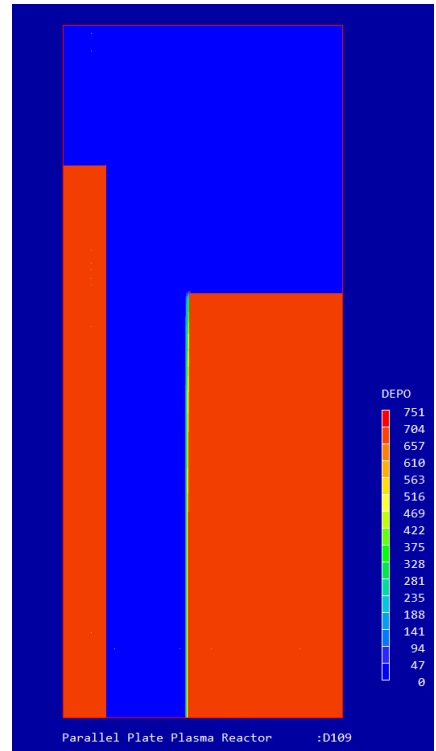
Εικόνα 52 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 6



Εικόνα 53 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 7

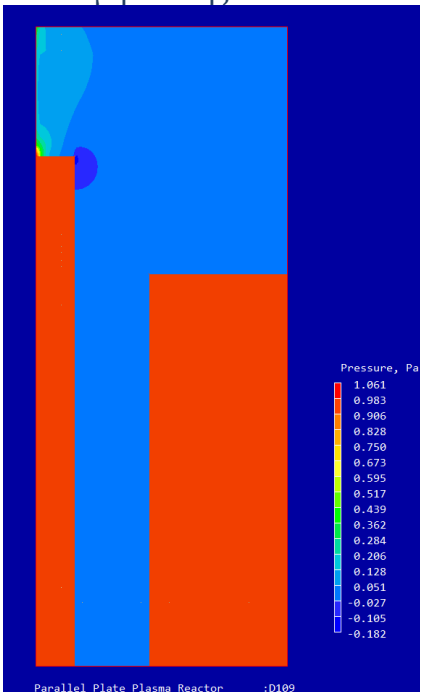


Εικόνα 54 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 8

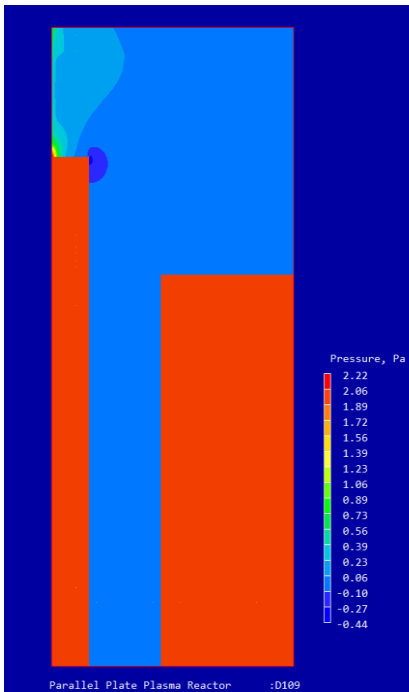


Εικόνα 55 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 9

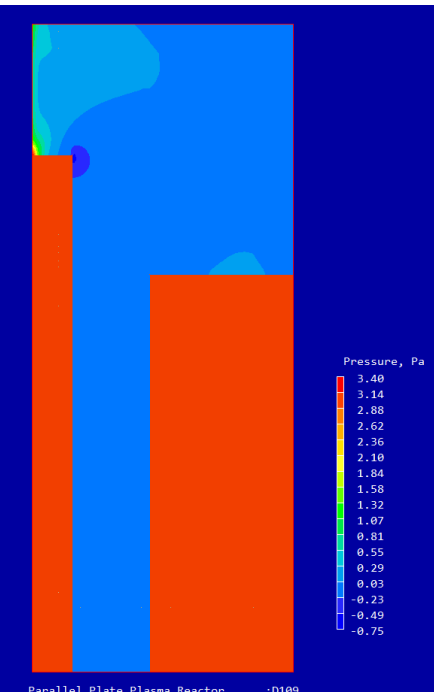
Κατανομή Πίεσης



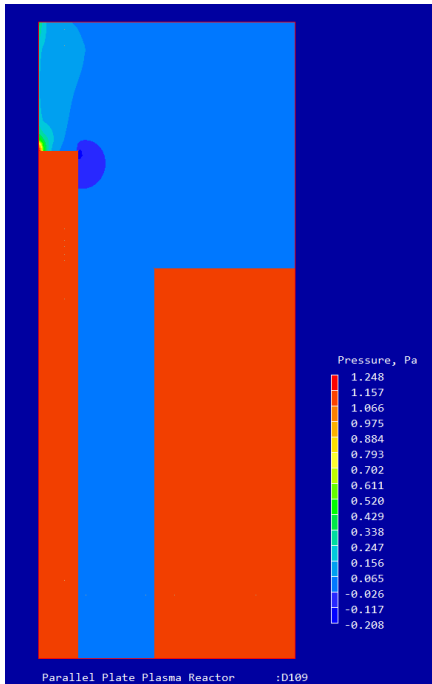
Εικόνα 56 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων πίεσης για την περίπτωση 7



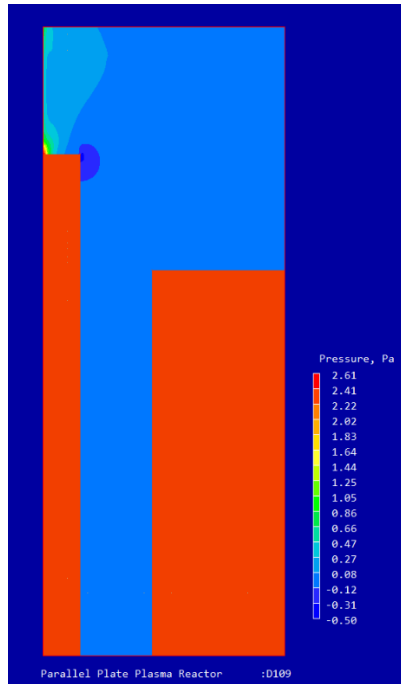
Εικόνα 57 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων πίεσης για την περίπτωση 8



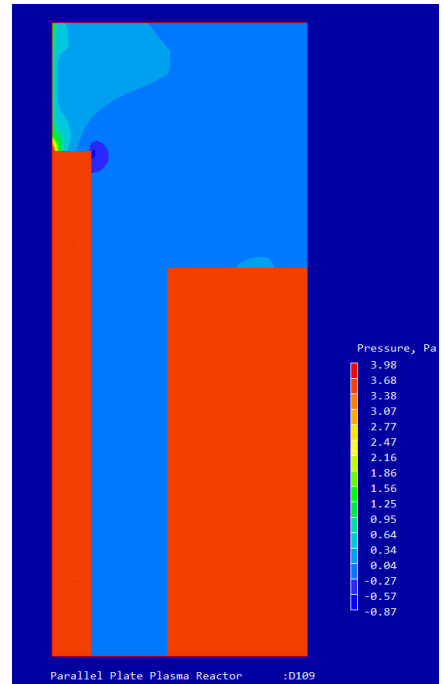
Εικόνα 58 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων πίεσης για την περίπτωση 9



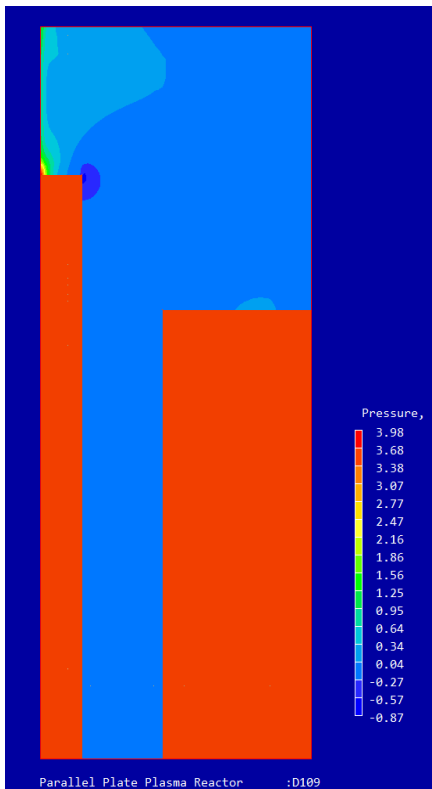
Εικόνα 59 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 1



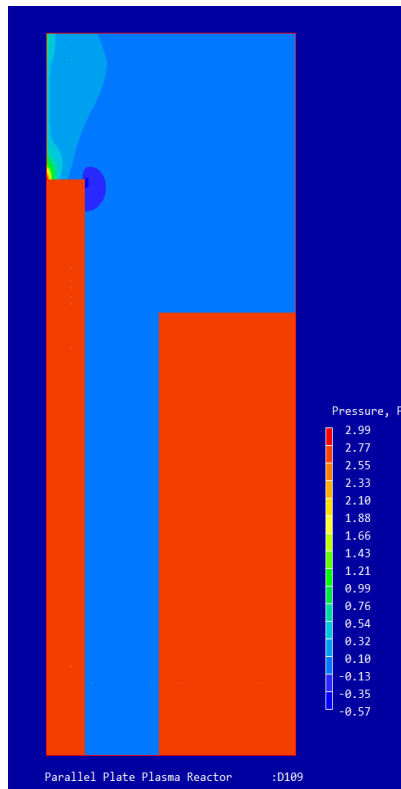
Εικόνα 60 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 2



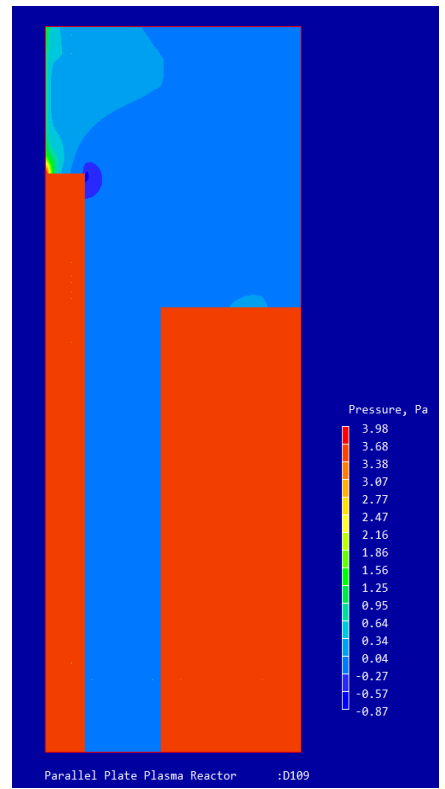
Εικόνα 61 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 3



Εικόνα 62 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 4

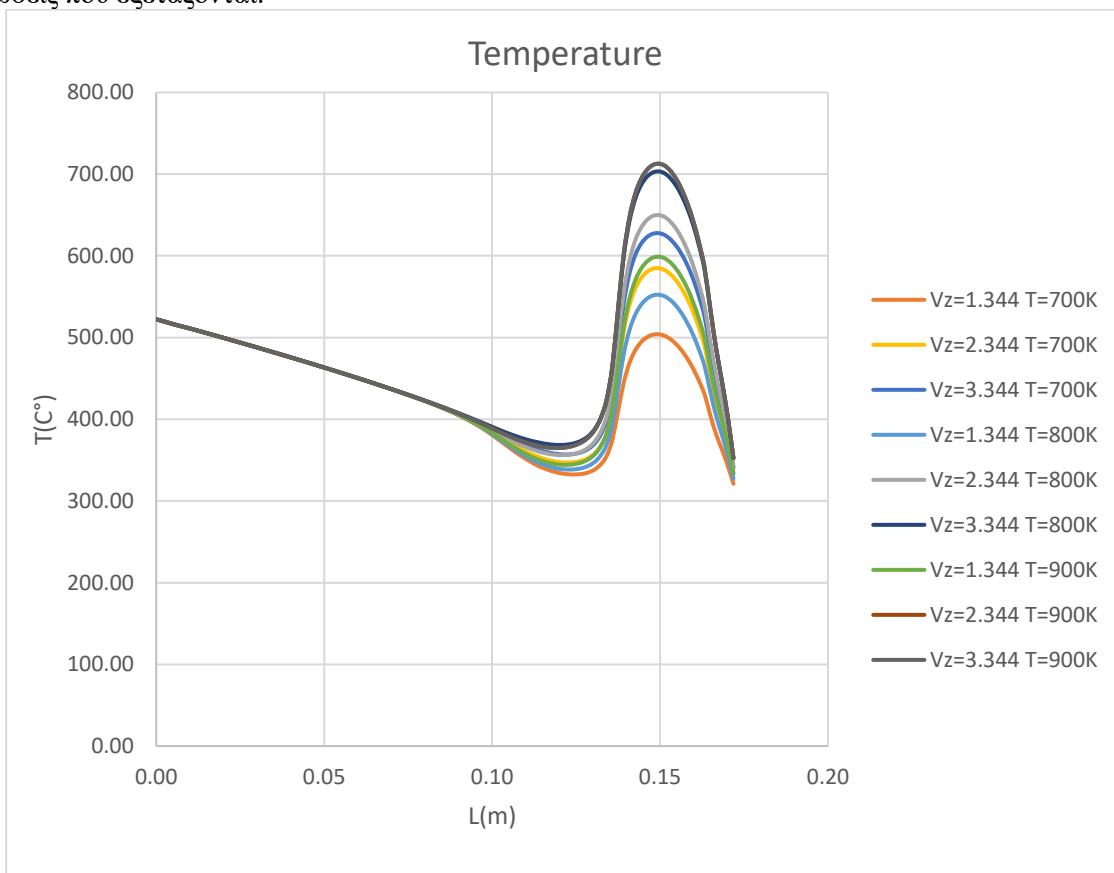


Εικόνα 63 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 5

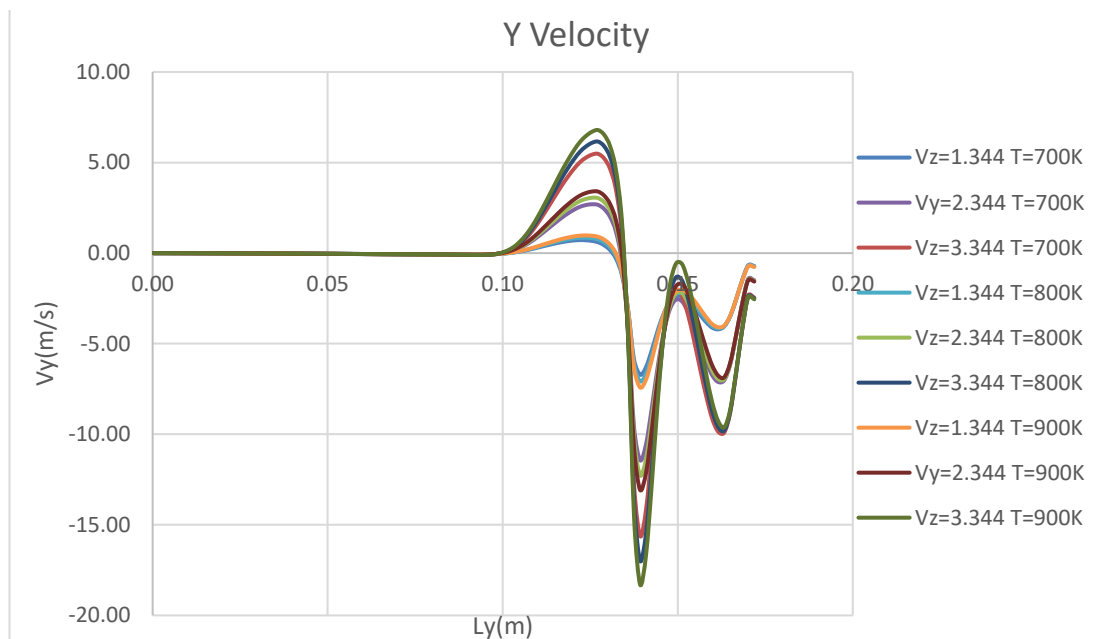


Εικόνα 64 Απεικόνιση ισοϋψών καμπύλων χημικής απόθεσης DEPO για την περίπτωση 6

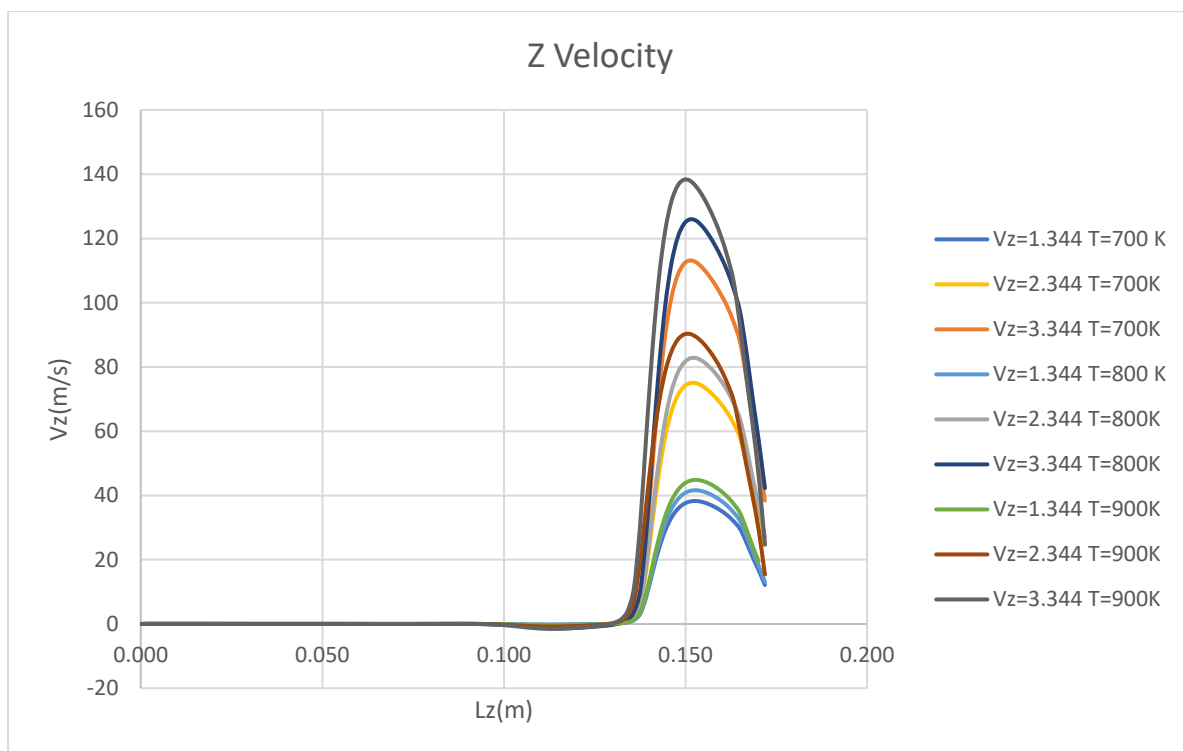
Παρακάτω, παρουσιάζονται ορισμένες συγκριτικές καμπύλες των μεταβλητών επίλυσης για τις διαφορετικές περιπτώσεις που εξετάζονται.



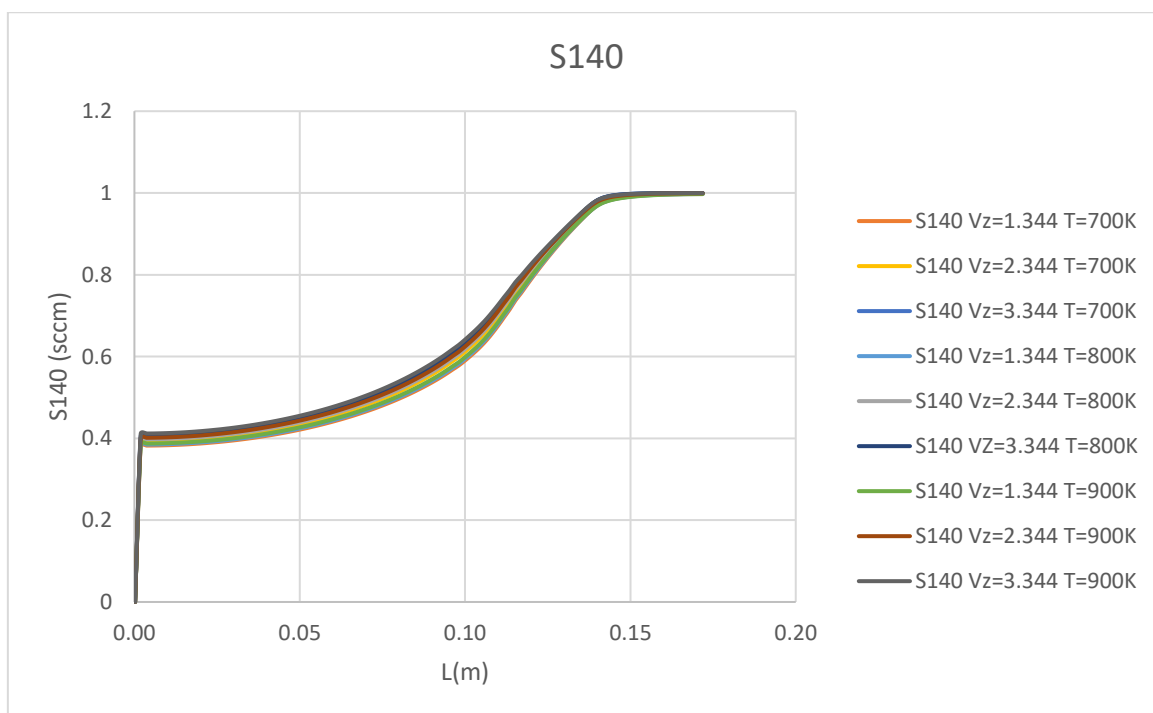
Σχήμα 11 Συγκριτικές καμπύλες κατανομής θερμοκρασίας για κάθε μια από τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν



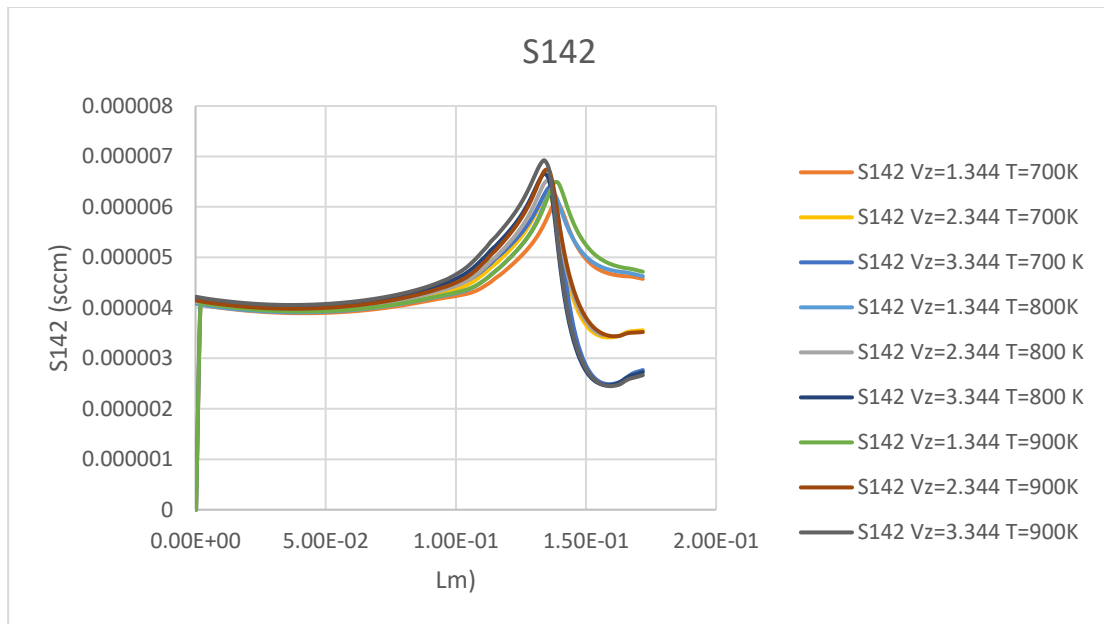
Σχήμα 12



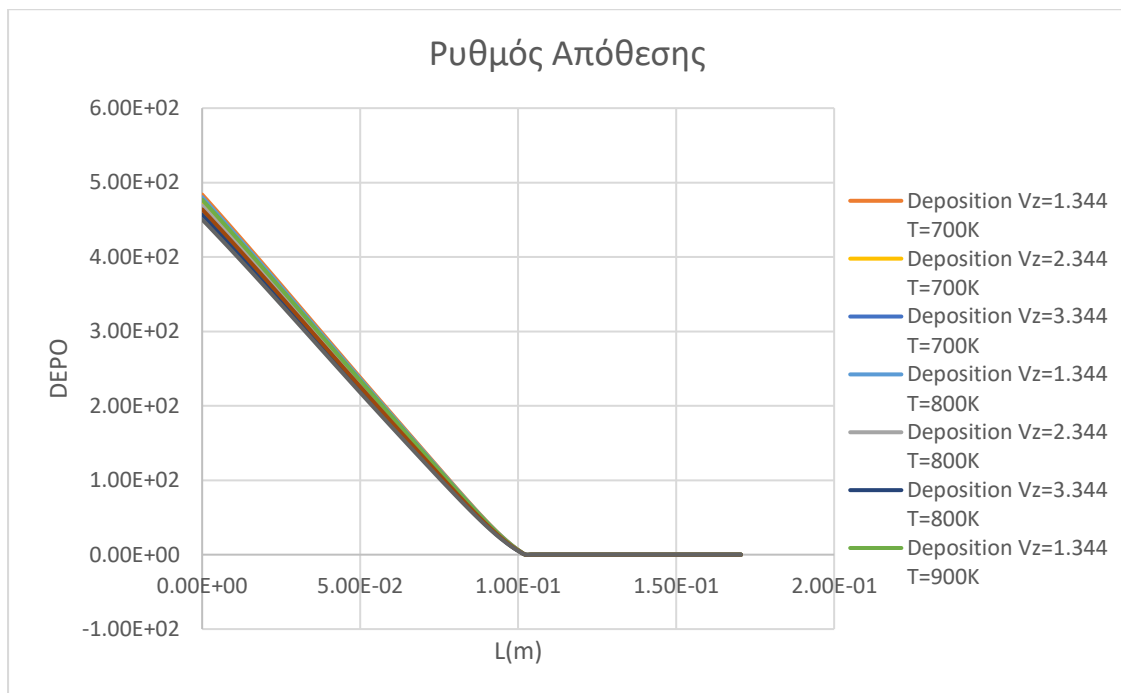
Σχήμα 13 Συγκριτικές καμπύλες κατανομής ταχύτητας στον άξονα z (Vz) για κάθε μια από τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν



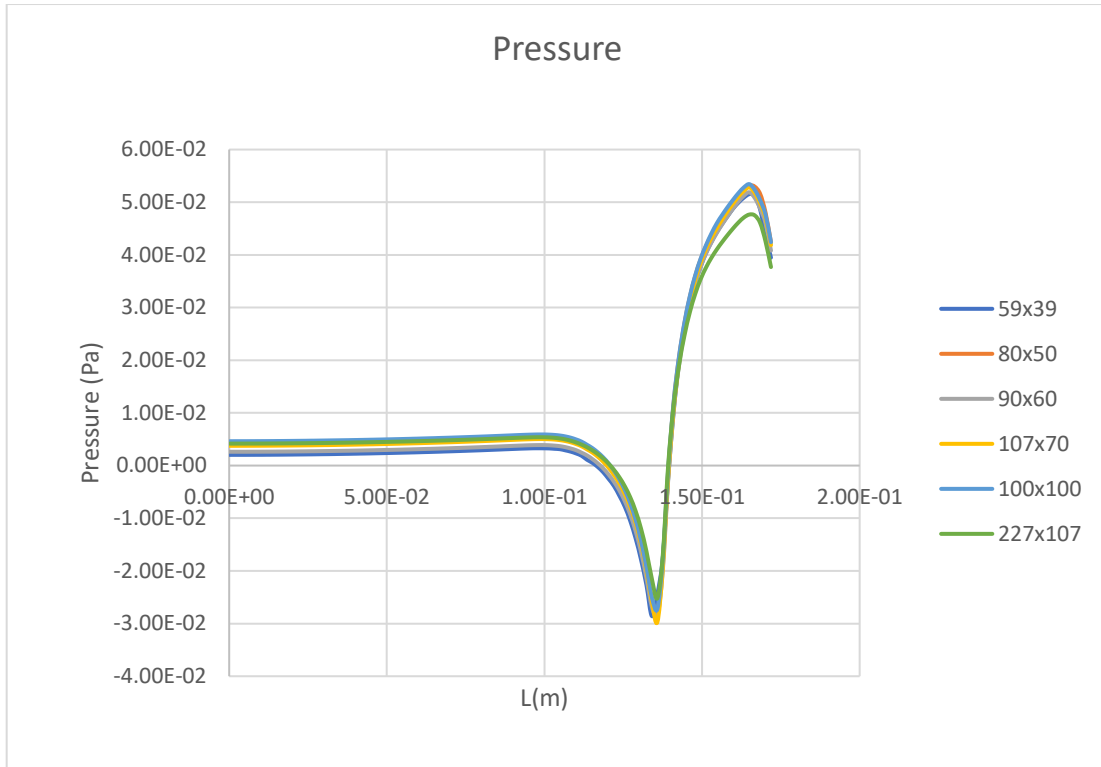
Σχήμα 14 Συγκριτικές καμπύλες κατανομής σιλανίου (SiH4) για κάθε μια από τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν



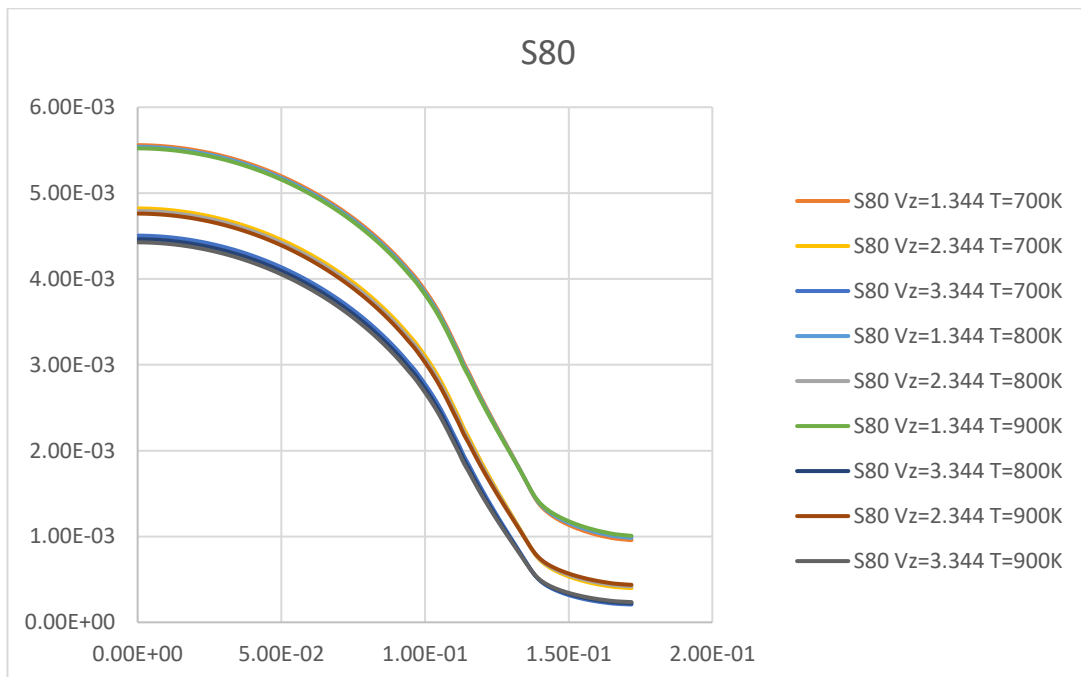
Σχήμα 15 Συγκριτικές καμπύλες κατανομής αντιδρώντος (S142) για κάθε μια από τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν



Σχήμα 16 Συγκριτικές καμπύλες κατανομής ρυθμού απόθεσης (DEPO) για κάθε μια από τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν



Σχήμα 17 Συγκριτικές καμπύλες κατανομής πίεσης για κάθε μια από τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν



Σχήμα 18 Συγκριτικές καμπύλες κατανομής αντιδρώντος υδρογόνου H2 για κάθε μια από τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν

Συμπεράσματα Παραμετρικής Ανάλυσης

- Από τα παραπάνω διαγράμματα παρατηρείται ότι με την αύξηση της θερμοκρασίας έχουμε παράλληλη αύξηση της πίεσης, της ταχύτητας του ρευστού και της κατανάλωσης του σιλανίου.
- Αυτό οδηγεί σε αύξηση παραγωγής του φιλμ πολυπυριτίου, διότι η αύξηση της κινητικής ενέργειας των μορίων συμβάλλει στη συμμετοχή τους στις χημικές αντιδράσεις που συντελούν στη διάσπαση του σιλανίου και κατ'επέκταση στη δημιουργία του υμενίου από πολυπυρίτιο.
- Η αύξηση ταχύτητας του ρευστού οδηγεί σε αύξηση της πίεσης στο πεδίο και ταυτόχρονα το ρευστό θερμαίνεται κοντά στο υπόστρωμα
- Από το διάγραμμα του ρυθμού απόθεσης φαίνεται ότι όσο η ταχύτητα εισόδου αυξάνει τόσο αυτός μειώνεται.
- Συνεπώς όσο αυξάνει η ταχύτητα τόσο μειώνεται ο διαθέσιμος χρόνος αντίδρασης και εναπόθεσης των μορίων στο υπόστρωμα, γεγονός που μπορεί να περιορίσει τον διαθέσιμο χρόνο αντίδρασης και εναπόθεσης των μορίων στο υπόστρωμα.
- Η πιο αποτελεσματική δημιουργία του κατάλληλου φιλμ πολυπυριτίου προκύπτει από την σωστή αναλογία θερμοκρασίας και ταχύτητας εισόδου. Η αποδοτικότερη απόθεση για τις περιπτώσεις που εξετάστηκαν, συμβαίνει με την εξής σειρά: Περίπτωση 1,4,7 > 2,5,8 > 3,6,9
- Όσο πιο υψηλή θερμοκρασία και πιο χαμηλή ταχύτητα τόσο πιο αποδοτικός είναι ο σχηματισμός του επιθυμητού φιλμ.
- Τέλος, η θερμοκρασία δεν μπορεί να αυξάνεται ανεξέλεγκτα, εφόσον αυτό ενδέχεται να οδηγήσει σε θερμικές καταπονήσεις του υποστρώματος και σε ρωγμές του προϊόντος. Επομένως η θερμοκρασία πρέπει να είναι τέτοια ώστε να εξισορροπηθεί ο ρυθμός εναπόθεσης για την καλύτερη ποιότητα του εναποτεθέντος φιλμ και τη συνολική απόδοση της διαδικασίας.

Βιβλιογραφία

1. **Wang, F., Wu, J.** Plasma-enhanced chemical vapor deposition. *Modern Ion Plating Technology*. 247–285, 2023.
2. **Yi, K., Liu, D., Chen, X., Yang, J., Wei, D., Liu, Y., Wei, D.** Plasma-enhanced chemical vapor deposition of two-dimensional materials for applications. *Accounts of Chemical Research*. 54(4), 1011–1022, 2021.
3. **Forsyth, B. R., Liu, B. Y.** Exhaust aerosol of a plasma enhanced CVD system: I. Size Distribution Measurements. *Aerosol Science and Technology*. 36(5), 515–525, 2002.
4. **Ξενίδου, Θ.Χ.** Σχεδιασμός αντιδραστήρων χημικής απόθεσης από ατμό: εφαρμογή στην εφαρμογή απόθεση οξειδίου του βολφραμίου και στην απόθεση οξειδίου του κασσιτέρου. Αθήνα : Διατριβή, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 2003.
5. **Kee R.J., F.M. Rupley and J.A. Miller.** *The CHEMKIN thermNational Laboratories Technical Report*. s.l. : SAND87-8215, 1987.
6. **Reid R.B., J.M. Prausnitz and B.E. Poling.** “*Properties of Gases and Liquids*”, 4th Ed. s.l. : McGraw-Hill, 1988.
7. **S.V., Patankar.** “*Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*”. McGraw-Hill : Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
8. **Pericleous, N. C. Markatos & K. A.** “*Laminar and turbulent natural convection in anenclosed cavity*”. s.l. : International Journal of Mass Transfer, Vol 27, No 5, (1984): 755-772.
9. **Ασημακόπουλος, Ν. Χ. Μαρκάτος & Δ.Α.** “*Υπολογιστική Ρευστοδυναμική*”. s.l. : Παπασωτηρίου, Αθήνα (1996).

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Αρχείο Q1 για το ανεξάρτητο πλέγμα

TALK=T;RUN(1, 1)

a

Q1 created by VDI menu, Version 2018, Date 20/09/18

CPVNAM=VDI; SPPNAM=CVD

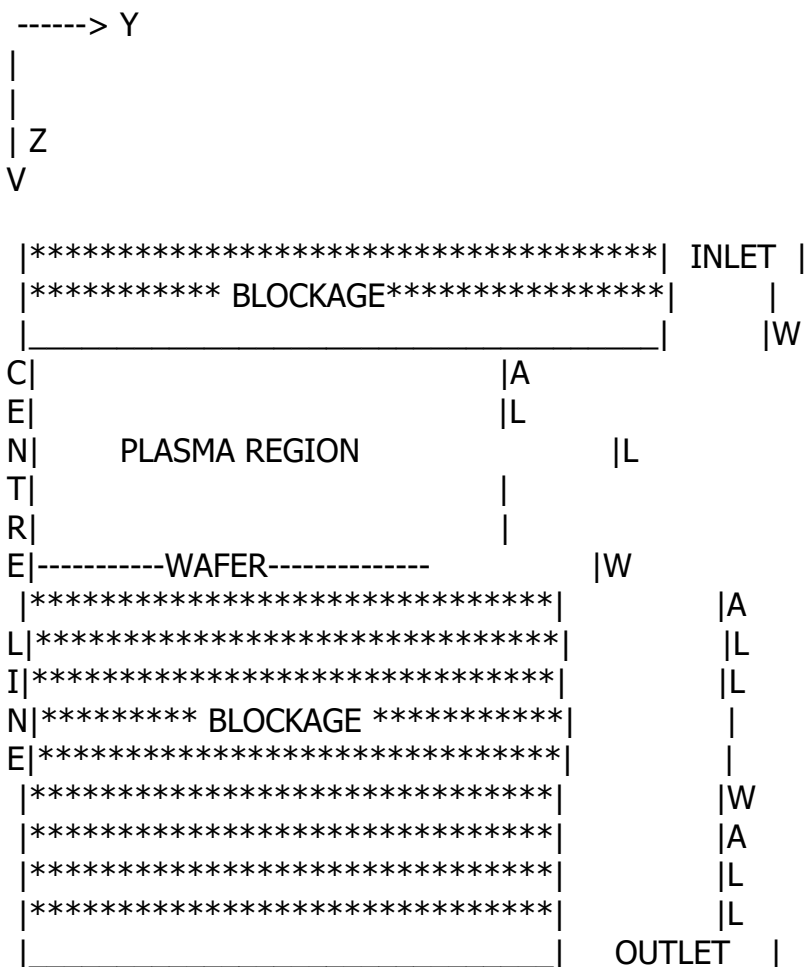
Echo DISPLAY / USE settings

DISPLAY

This case simulates a reactor using a plasma to enhance the gas phase chemistry. The reactor is axisymmetric, the geometry shown below.

Laminar, steady-state flow is assumed.

The susceptor temperature is 533K.



ENDDIS

IRUNN = 1 ;LIBREF = 109

Group 1. Run Title

TEXT(Parallel Plate Plasma Reactor :D109)

```

*****
Group 2. Transience
STEADY = T
*****

Groups 3, 4, 5 Grid Information
* Overall number of cells, RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)
RSET(M,1,108,70,1.0E-05)
* Cylindrical-polar grid
CARTES=F
*****

Group 6. Body-Fitted coordinates
*****

Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED
* Non-default variable names
NAME(16)=S80 ;NAME(17)=S140
NAME(18)=S142 ;NAME(19)=S145
NAME(20)=S158 ;NAME(136)=SPHT
NAME(137)=ENUL ;NAME(138)=BLOK
NAME(139)=PRPS ;NAME(140)=DEPO
NAME(141)=VPOR ;NAME(142)=RHO1
NAME(143)=GION ;NAME(144)=GAMM
NAME(145)=PHIT ;NAME(146)=T0
NAME(147)=NE ;NAME(148)=PHI2
NAME(149)=PHI1 ;NAME(150)=TEM1
* Solved variables list
SOLVE(P1,V1,W1,S80,S142,S145,S158,T0)
SOLVE(NE,PHI2,PHI1,TEM1)
* Stored variables list
STORE(PHIT,GAMM,GION,RHO1,VPOR,DEPO,PRPS,BLOK)
STORE(ENUL,SPHT,S140)
* Additional solver options
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,N)
SOLUTN(S80,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(S142,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(S145,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(S158,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(T0,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(NE,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(PHI2,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(PHI1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(TEM1,Y,Y,Y,N,N,Y)
IVARBK = -1 ;ISOLBK = 1
PRNITS= F ;OPTRLX= F ;NOSIP= F ;ALLVBC= F
DBSOLV= F ;IMPINI= F ;EARL1D= F

*****

Group 8. Terms & Devices
TERMS (T0 ,N,N,Y,Y,Y,N)

```

TERMS (NE ,N,N,Y,Y,Y,N)
TERMS (PHI2,N,N,Y,Y,Y,N)
TERMS (PHI1,N,N,Y,Y,Y,N)
DIFCUT =0.
ADDDIF = T
NEWRH1 = T
NEWENL = T
UDIFNE = T
USOURC = T
ISOLX = 0 ;ISOLY = 0 ;ISOLZ = 0

Group 9. Properties

PRESS0 =10.
* Domain material index is 70 signifying:
* CVD_GAS
SETPRPS(1, 70,Q1)
TMP1A =293.
ENUT =0.
DVO1DT =1.
PRNDTL(S80)=-GRND8 ;PRNDTL(S142)=-GRND8
PRNDTL(S145)=-GRND8 ;PRNDTL(S158)=-GRND8
PRNDTL(T0)=-GRND7 ;PRNDTL(NE)=-GRND7
PRNDTL(PHI2)=-GRND7 ;PRNDTL(PHI1)=-GRND7
PRNDTL(TEM1)=-GRND8
PRLH1A =0. ;PRLH1B =0. ;PRLH1C =0.
* List of user-defined materials to be read by EARTH
MATFLG=T;IMAT=1
* Name
*Ind. Dens. Viscos. Spec.heat Conduct. Expans. Compr.
* <CVD_GAS>
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

Group 11. Initialise Var/Porosity Fields

FIINIT(P1)=0. ;FIINIT(V1)=0.
FIINIT(W1)=0. ;FIINIT(S80)=1.
FIINIT(S140)=1.001E-10 ;FIINIT(S142)=1.001E-10
FIINIT(S145)=1.001E-10 ;FIINIT(S158)=1.001E-10
FIINIT(SPHT)=1.001E-10 ;FIINIT(ENUL)=1.001E-10

FIINIT(BLOK)=1. ;FIINIT(PRPS)=-1.
FIINIT(DEPO)=1.001E-10 ;FIINIT(VPOR)=1.
FIINIT(RHO1)=1.001E-10 ;FIINIT(GION)=1.001E-10
FIINIT(GAMM)=1.001E-10 ;FIINIT(PHIT)=1.001E-10
FIINIT(T0)=1.1E+04 ;FIINIT(NE)=1.0E-02
FIINIT(PHI2)=0. ;FIINIT(PHI1)=100.
FIINIT(TEM1)=300.

No PATCHes used for this Group

INIADD = F

Group 12. Convection and diffusion adjustments

No PATCHes used for this Group

Group 13. Boundary & Special Sources

This patch is attached to object ELE1BOT
PATCH(ELE1BOT, LOW, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)
COVAL(ELE1BOT, NE, GRND7, 0.)
COVAL(ELE1BOT, PHI2, FIXFLU, GRND7)
COVAL(ELE1BOT, PHI1, FIXFLU, GRND7)

This patch is attached to object ELRING
PATCH(ELRING, LOW, -1, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)
COVAL(ELRING, NE, GRND7, 0.)
COVAL(ELRING, PHI2, FIXFLU, GRND7)
COVAL(ELRING, PHI1, FIXFLU, GRND7)

PATCH(COOL, VOLUME, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)
COVAL(COOL, T0, GRND7, GRND7)
COVAL(COOL, NE, GRND7, GRND7)

PATCH(IONIZE, VOLUME, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)
COVAL(IONIZE, T0, GRND7, GRND7)
COVAL(IONIZE, NE, GRND7, GRND7)

PATCH(CHEM, VOLUME, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)
COVAL(CHEM, S80, GRND1, GRND1)
COVAL(CHEM, S140, GRND1, GRND1)
COVAL(CHEM, S142, GRND1, GRND1)
COVAL(CHEM, S145, GRND1, GRND1)
COVAL(CHEM, S158, GRND1, GRND1)
COVAL(CHEM, TEM1, GRND1, GRND1)

PATCH(RELT, PHASEM, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1)
COVAL(RELT, S80, GRND1, SAME)
COVAL(RELT, S140, GRND1, SAME)

COVAL(RELT, S142, GRND1, SAME)
COVAL(RELT, S145, GRND1, SAME)
COVAL(RELT, S158, GRND1, SAME)

EGWF = F

Group 14. Downstream Pressure For PARAB

Group 15. Terminate Sweeps

LSWEEP = 10000

RESFAC =1.0E-04

Group 16. Terminate Iterations

LITER(S140)=200 ;LITER(S142)=200

LITER(S145)=200 ;LITER(S158)=200

Group 17. Relaxation

RELAX(P1 ,LINRLX,0.3)

RELAX(S80 ,LINRLX,1.)

RELAX(S142,FALSDT,1.)

RELAX(S145,FALSDT,1.)

RELAX(S158,FALSDT,1.)

RELAX(T0 ,FALSDT,1.)

RELAX(NE ,FALSDT,1.)

RELAX(PHI2,FALSDT,1.)

RELAX(PHI1,FALSDT,1.)

RELAX(TEM1,LINRLX,0.3)

Group 18. Limits

VARMAX(P1)=1.0E+10 ;VARMIN(P1)=-8.

VARMAX(S80)=1. ;VARMIN(S80)=1.0E-20

VARMAX(S140)=1. ;VARMIN(S140)=1.0E-20

VARMAX(S142)=1. ;VARMIN(S142)=1.0E-20

VARMAX(S145)=1. ;VARMIN(S145)=1.0E-20

VARMAX(S158)=1. ;VARMIN(S158)=1.0E-20

VARMAX(TEM1)=2000. ;VARMIN(TEM1)=260.

Group 19. EARTH Calls To GROUND Station

NAMGRD =CVD

PARSOL = F

ISG62 = 1

CSG10 ='q1'

SPEDAT(SET,CVD,BINOPT,I,4)

SPEDAT(SET,CVD,CHMRLX,R,1.)

SPEDAT(SET,CVD,GREAC(1),I,18)

SPEDAT(SET,CVD,GREAC(3),I,22)

SPEDAT(SET,CVD,SREAC(1),I,19)

SPEDAT(SET,CVD,PHIPAR(1),R,2.)

SPEDAT(SET,CVD,PHIPAR(3),R,0.)
SPEDAT(SET,CVD,NEPAR(1),R,18.)
SPEDAT(SET,CVD,NEPAR(3),R,3.0E+05)
SPEDAT(SET,CVD,NEPAR(5),R,0.18)
SPEDAT(SET,CVD,TOPAR(1),R,3500.)
SPEDAT(SET,CVD,TOPAR(4),R,1.0E+04)
SPEDAT(SET,CVD,PLASMA,L,T)
SPEDAT(SET,CVD,VOLIN,L,F)
SPEDAT(SET,CVD,MCDOPT,I,2)
SPEDAT(SET,CVD,MCPROP,I,3)
SPEDAT(SET,CVD,NGREAC,I,3)
SPEDAT(SET,CVD,GREAC(2),I,21)
SPEDAT(SET,CVD,NSREAC,I,2)
SPEDAT(SET,CVD,SREAC(2),I,20)
SPEDAT(SET,CVD,PHIPAR(2),R,0.8)
SPEDAT(SET,CVD,PHIPAR(4),R,200.)
SPEDAT(SET,CVD,PHIPAR(5),R,0.)
SPEDAT(SET,CVD,PHIPAR(6),R,0.)
SPEDAT(SET,CVD,NEPAR(2),R,5.0E+05)
SPEDAT(SET,CVD,NEPAR(4),R,1.3E+05)
SPEDAT(SET,CVD,TOPAR(2),R,0.3)
SPEDAT(SET,CVD,TOPAR(3),R,6.0E+05)
SPEDAT(SET,CVD,LNELIM,L,F)
SPEDAT(SET,CVD,LDCPLS,L,F)
SPEDAT(SET,CVD,LACPLS,L,T)
SPEDAT(SET,GXMONI,PLOTALL,L,T)

Group 20. Preliminary Printout

Group 21. Print-out of Variables

Group 22. Monitor Print-Out

IXMON = 1 ;IYMON = 2 ;IZMON = 52

NPRMON = 100000

NPRMNT = 1

TSTSWP = -1

Group 23. Field Print-Out & Plot Control

NPRINT = 100000

YZPR = T

ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000

No PATCHes used for this Group

Group 24. Dumps For Restarts

GVIEW(P,-1.,0.,0.)

GVIEW(UP,0.,1.,0.)

GVIEW(WINDOW,MAX)

GVIEW(DEPTH,0.8)
GVIEW(VDIS,0.138011)
GVIEW(CENTRE,8.136424E-03,0.0815,0.0327)

> DOM, SIZE, 1.000000E-01, 1.630000E-01, 6.540000E-02
> DOM, MONIT, 0.000000E+00, 2.142857E-03, 2.865000E-02
> DOM, SCALE, 1.000000E+00, 1.000000E+00, 1.000000E+00
> DOM, INCREMENT, 1.000000E-02, 1.000000E-02, 1.000000E-02
> GRID, RSET_X_1, 1, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_1, 14, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_2, 40, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_3, 7, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_4, 2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_5, 2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_6, 2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_7, 2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_8, 2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_9, 15, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_10, 20, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_11, 1, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_12, 1, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Z_1, 20, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Z_2, 4, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Z_3, 25, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Z_4, 4, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Z_5, 5, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Z_6, 10, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Z_7, 2, 1.000000E+00
> DOM, T_AMBIENT, 0.000000E+00

> OBJ, NAME, Y1
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 2.000000E-02, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 0.000000E+00, 6.540000E-02
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

> OBJ, NAME, Y2
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 9.200001E-02, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 0.000000E+00, 6.540000E-02
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

> OBJ, NAME, Y4
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 1.020000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 0.000000E+00, 6.540000E-02
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

```

> OBJ, NAME, Y5
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 1.035000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 0.000000E+00, 6.540000E-02
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

> OBJ, NAME, Y6
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 1.055000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 0.000000E+00, 6.540000E-02
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

> OBJ, NAME, Y7
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 1.070000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 0.000000E+00, 6.540000E-02
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

> OBJ, NAME, Y8
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 1.100000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 0.000000E+00, 6.540000E-02
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

> OBJ, NAME, Y10
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 1.570000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 0.000000E+00, 6.540000E-02
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

> OBJ, NAME, Y11
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 1.610000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 0.000000E+00, 6.540000E-02
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

> OBJ, NAME, Z2
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 1.200000E-02
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 1.630000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

> OBJ, NAME, Z3
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 2.740000E-02
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 1.630000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

```


> OBJ, NAME, Z5
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 3.460000E-02
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 1.630000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

> OBJ, NAME, Z6
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 5.540000E-02
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 1.630000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, wirexyz
> OBJ, TYPE, NULL

> OBJ, NAME, CMP0
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 1.300000E-01, 9.999998E-03
> OBJ, GEOMETRY, polcu7
> OBJ, TYPE, BLOCKAGE
> OBJ, MATERIAL, 198,Solid with smooth-wall friction
> OBJ, SURF_TEMP_H, 0. ,300.

> OBJ, NAME, CMP1
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 2.940000E-02
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 1.000000E-01, 3.600000E-02
> OBJ, GEOMETRY, polcu7
> OBJ, TYPE, BLOCKAGE
> OBJ, MATERIAL, 198,Solid with smooth-wall friction
> OBJ, LINR_HEAT_L, FIXVAL ,533.
> OBJ, PLASMA-AC_N, EARTHED
> OBJ, SUF_REAC_L, YES
> OBJ, BATCH_F_L, 1.
> OBJ, PLASMA-AC_L, EARTHED

> OBJ, NAME, VIN1
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 1.300000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 3.300001E-02, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, polcu5t
> OBJ, TYPE, INLET
> OBJ, DENSITY, 1.753E-03
> OBJ, VELOCITY, 0. ,0. ,1.344
> OBJ, TEMPERATURE, 900.

> OBJ, NAME, OUTLET
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 1.000000E-01, 6.540000E-02
> OBJ, SIZE, 1.000000E-01, 6.300000E-02, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, polcubet
> OBJ, TYPE, OUTLET
> OBJ, PRESSURE, 0.
> OBJ, TEMPERATURE, SAME

```

> OBJ, COEFFICIENT, 1.
> OBJ, OUTLET_S142, SAME
> OBJ, OUTLET_S145, SAME
> OBJ, OUTLET_S158, SAME

> OBJ, NAME,      WALL0
> OBJ, POSITION,   0.000000E+00, 1.630000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, SIZE,     1.000000E-01, 0.000000E+00, 6.540000E-02
> OBJ, GEOMETRY, polcu2
> OBJ, TYPE,     PLATE
> OBJ, SURF_TEMP, 0. ,300.
> OBJ, PLASMA-AC, EARTHED

> OBJ, NAME,     ELE1BOT
> OBJ, POSITION,   0.000000E+00, 0.000000E+00, 9.999998E-03
> OBJ, SIZE,     1.000000E-01, 1.000000E-01, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, poldef
> OBJ, TYPE,     USER_DEFINED
> OBJ, PATCHES,  ELE1BOT

> OBJ, NAME,     ELRING
> OBJ, POSITION,   0.000000E+00, 1.000000E-01, 9.999998E-03
> OBJ, SIZE,     1.000000E-01, 2.999999E-02, 0.000000E+00
> OBJ, GEOMETRY, poldef
> OBJ, TYPE,     USER_DEFINED
> OBJ, PATCHES,  ELRING
*****
STOP

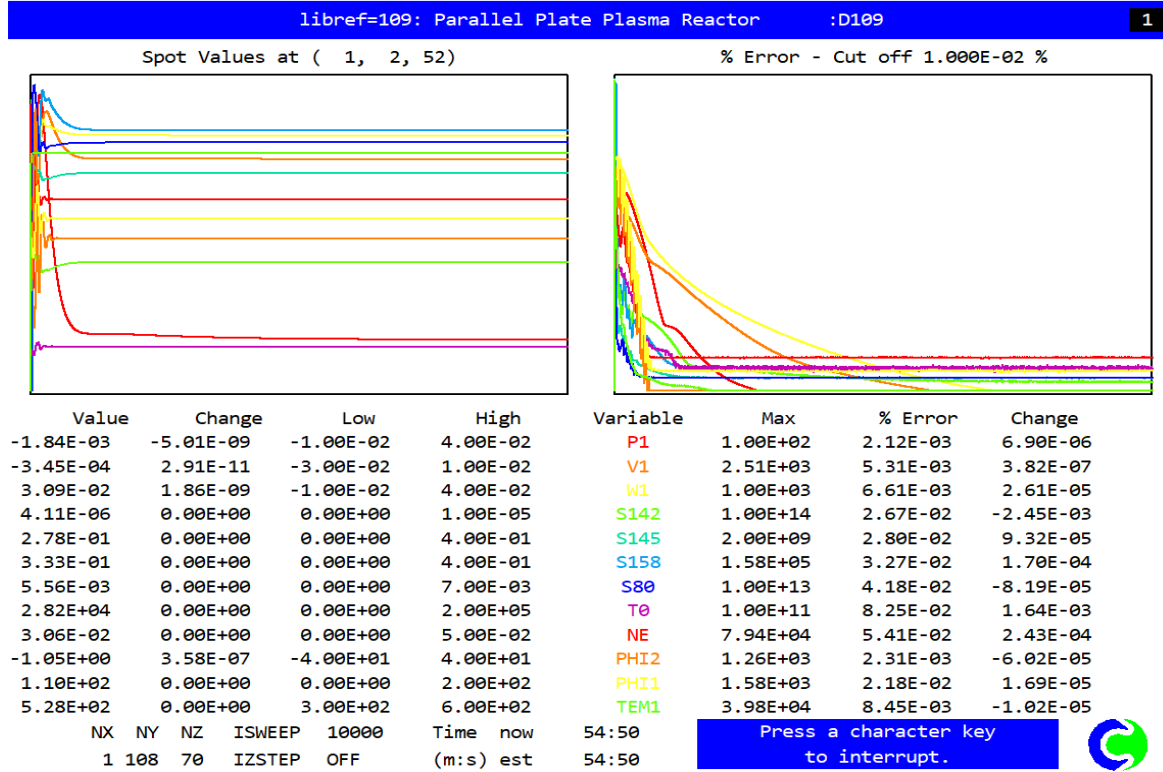
```

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β

Διαγράμματα σύγκλισης για τις 9 περιπτώσεις που εξετάστηκαν

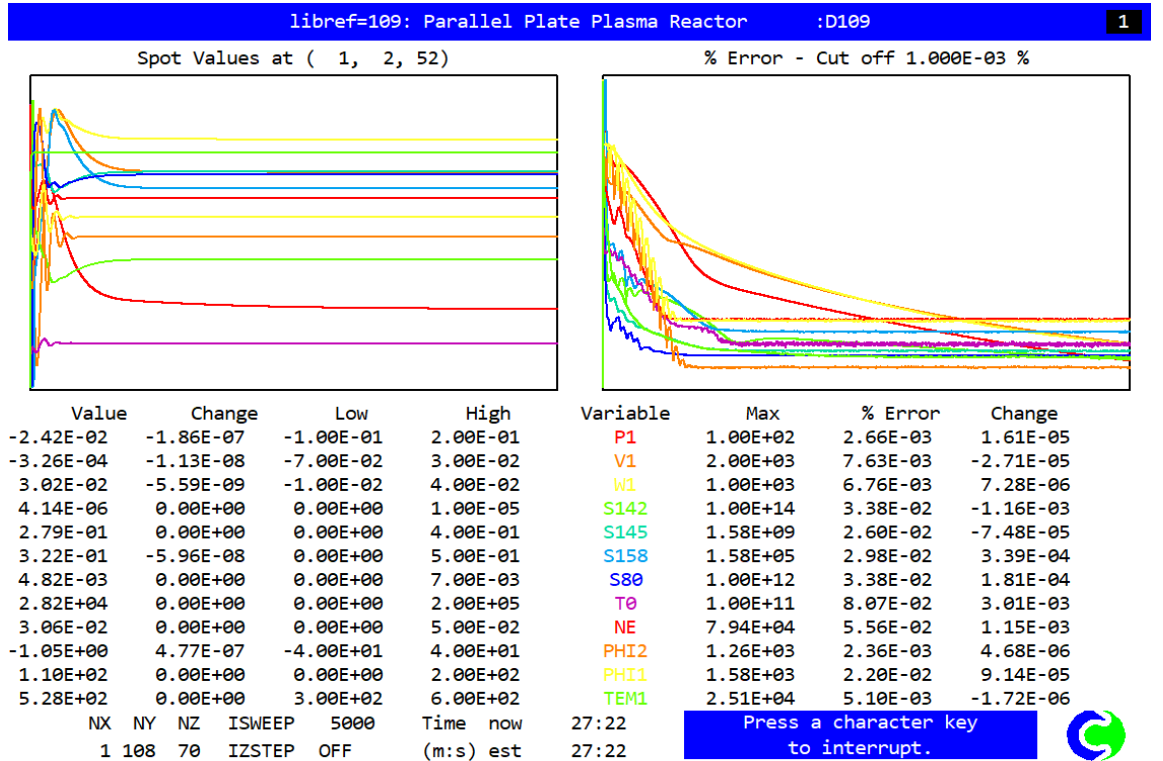
Περίπτωση 1^η

700K – 1,344 m/s

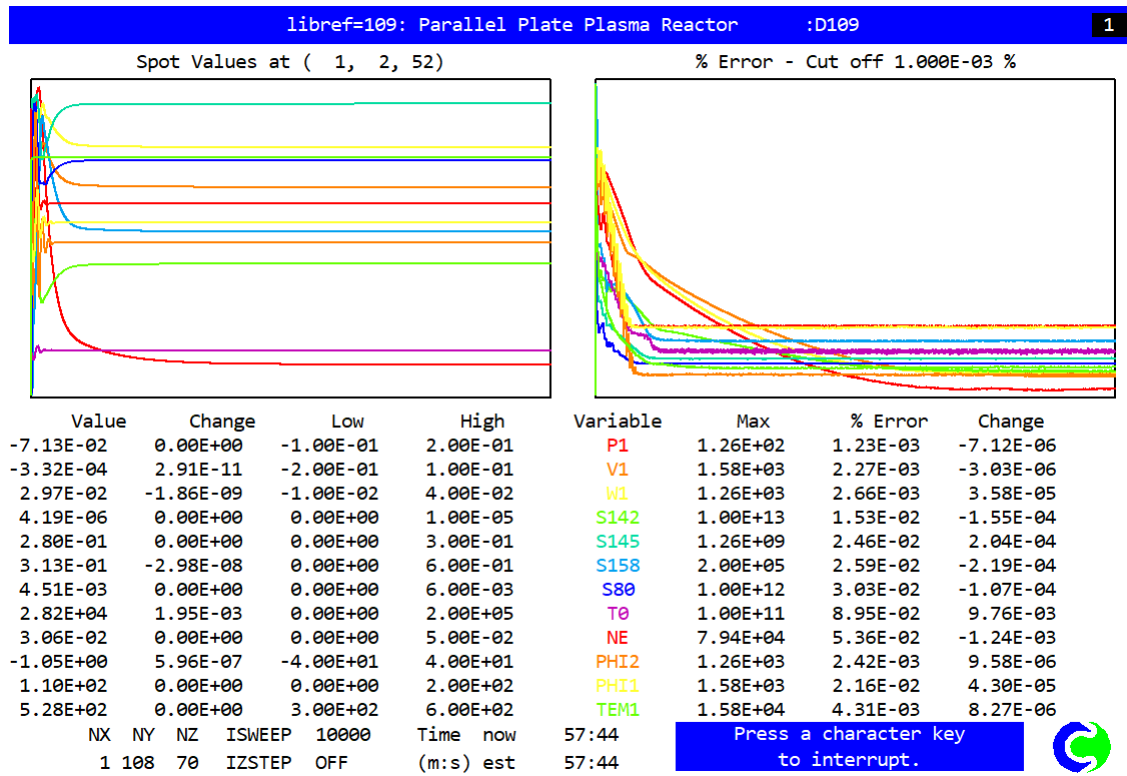


Περίπτωση 2^η

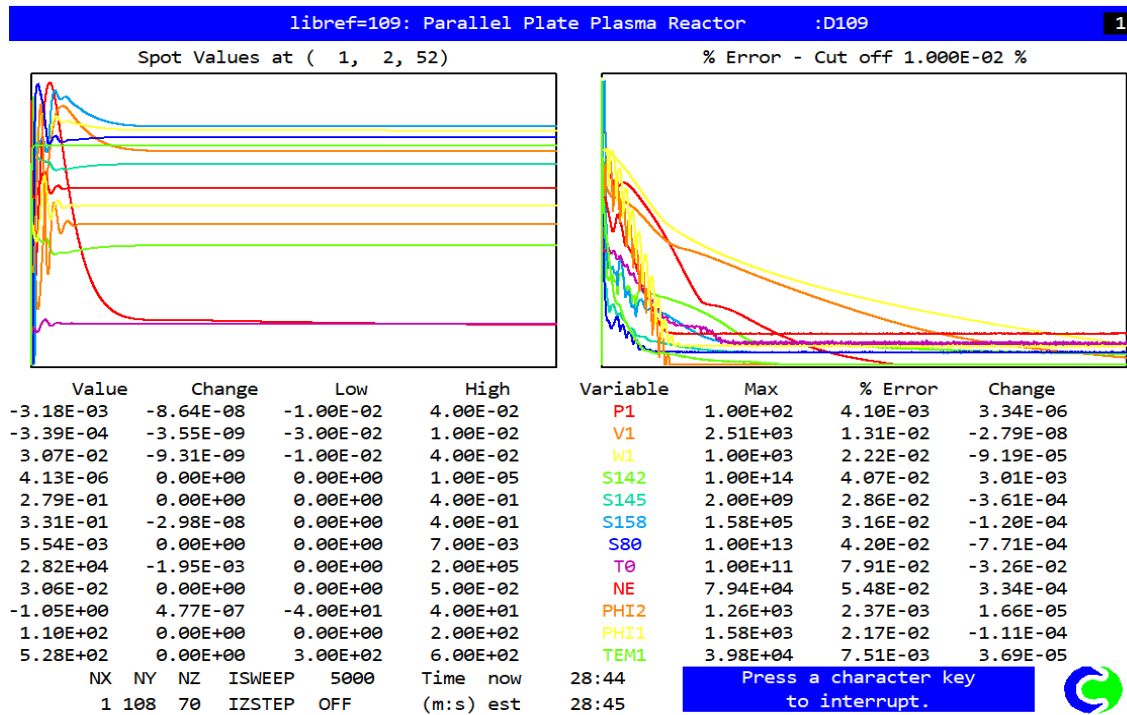
700K – 2,344 m/s



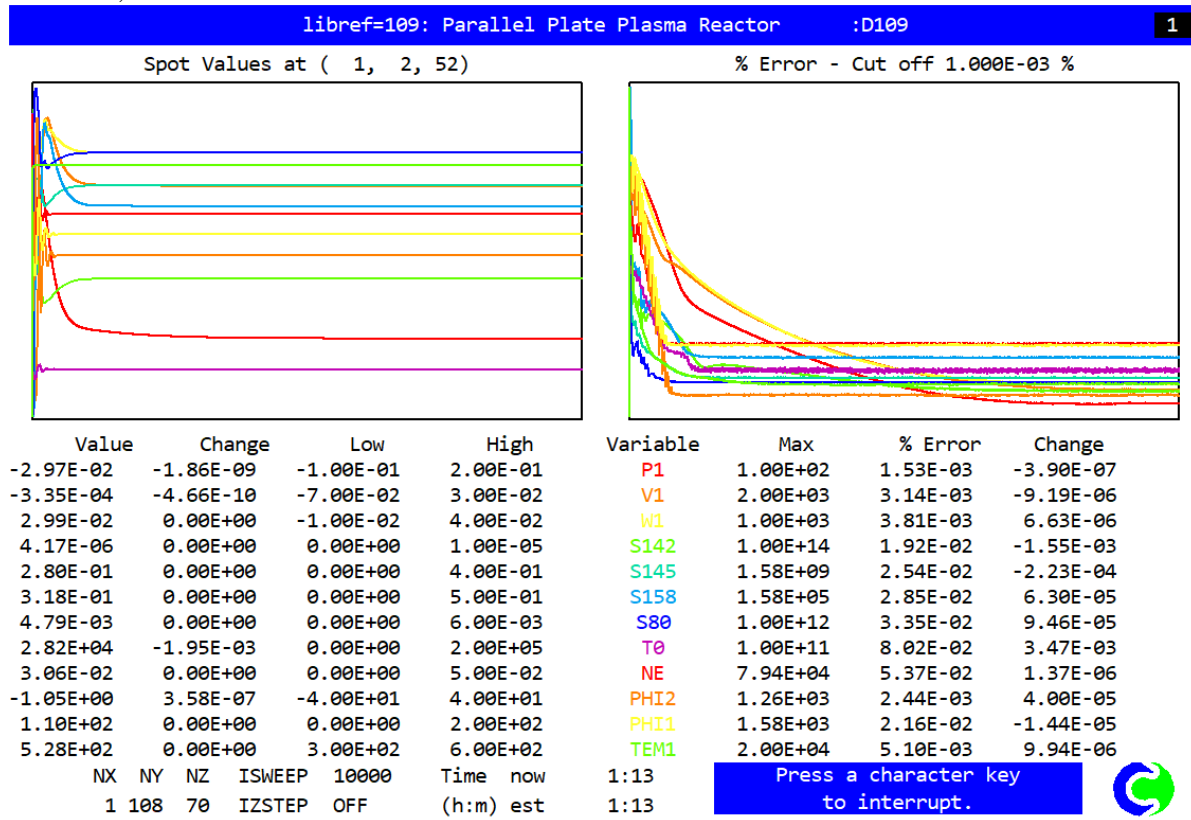
Περίπτωση 3^η
700K – 3,344 m/s



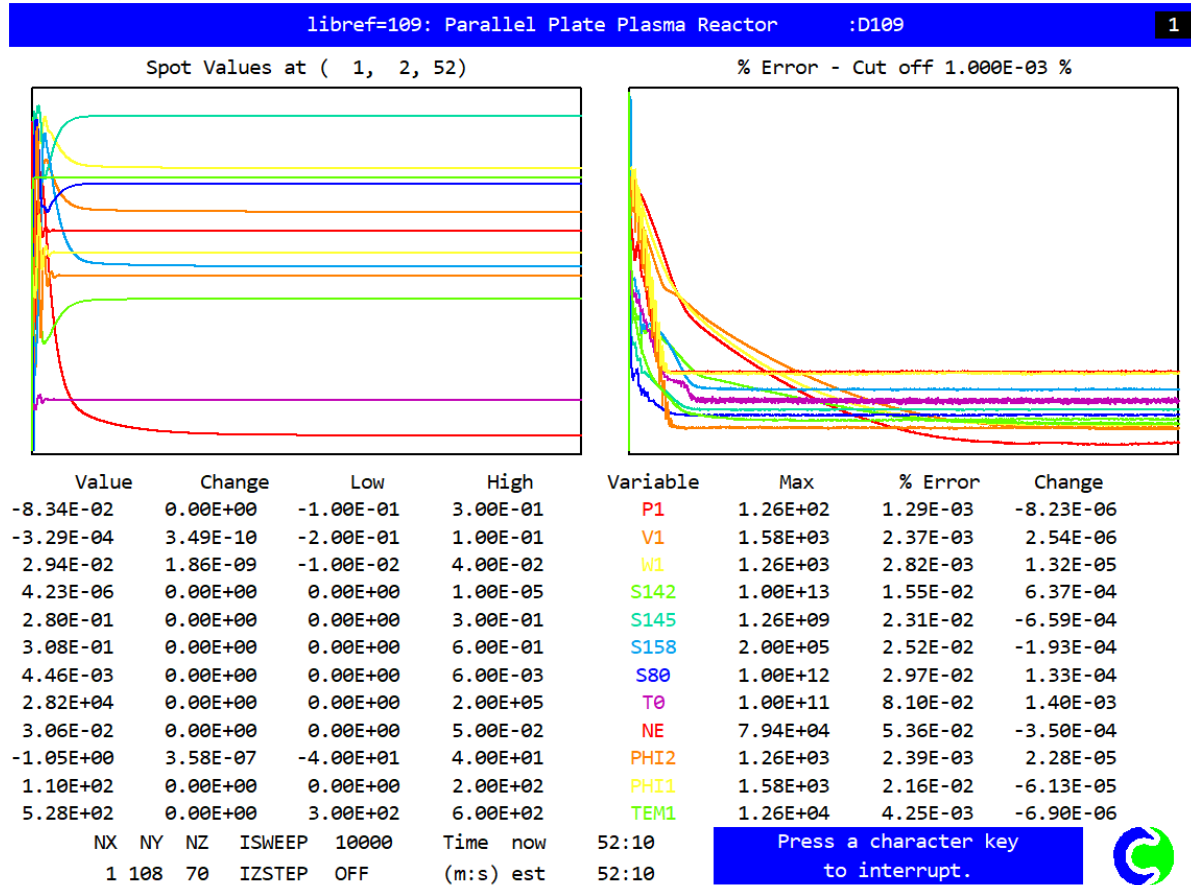
Περίπτωση 4^η
800K – 1,344 m/s



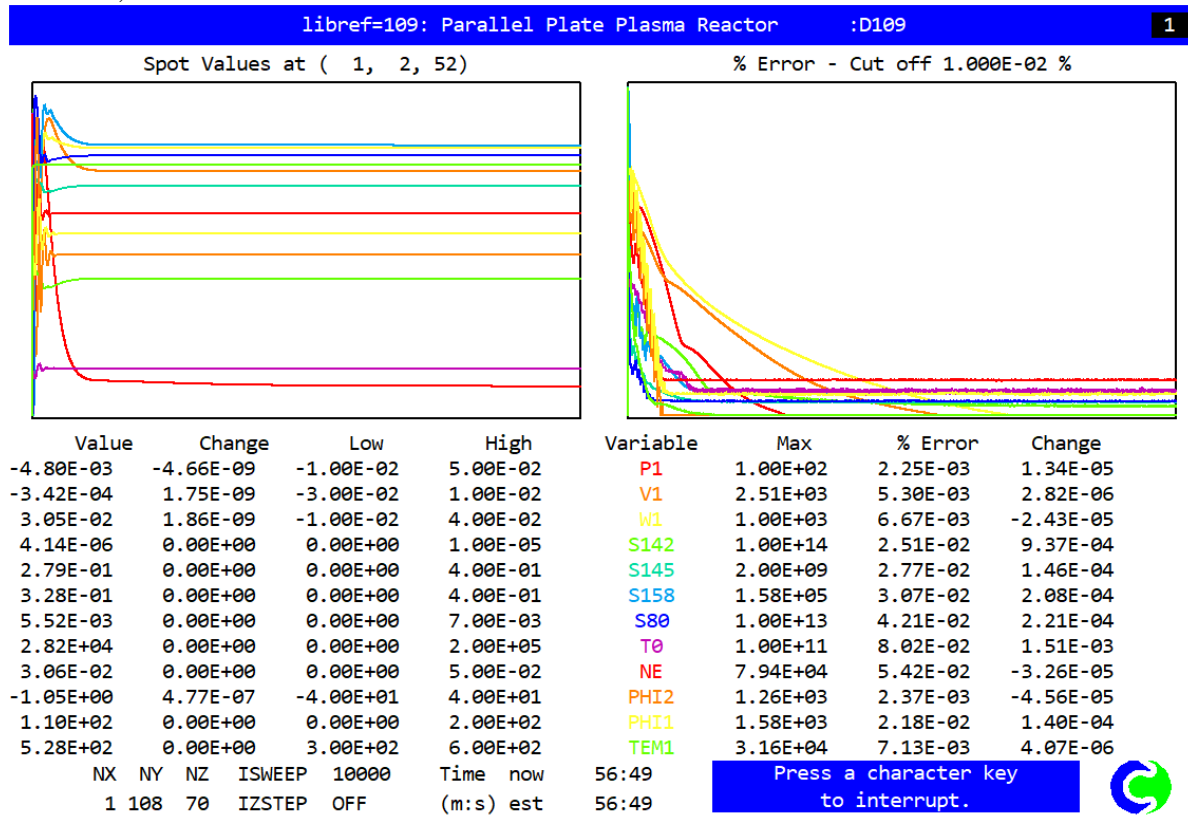
Περίπτωση 5^η
800K – 2,344 m/s



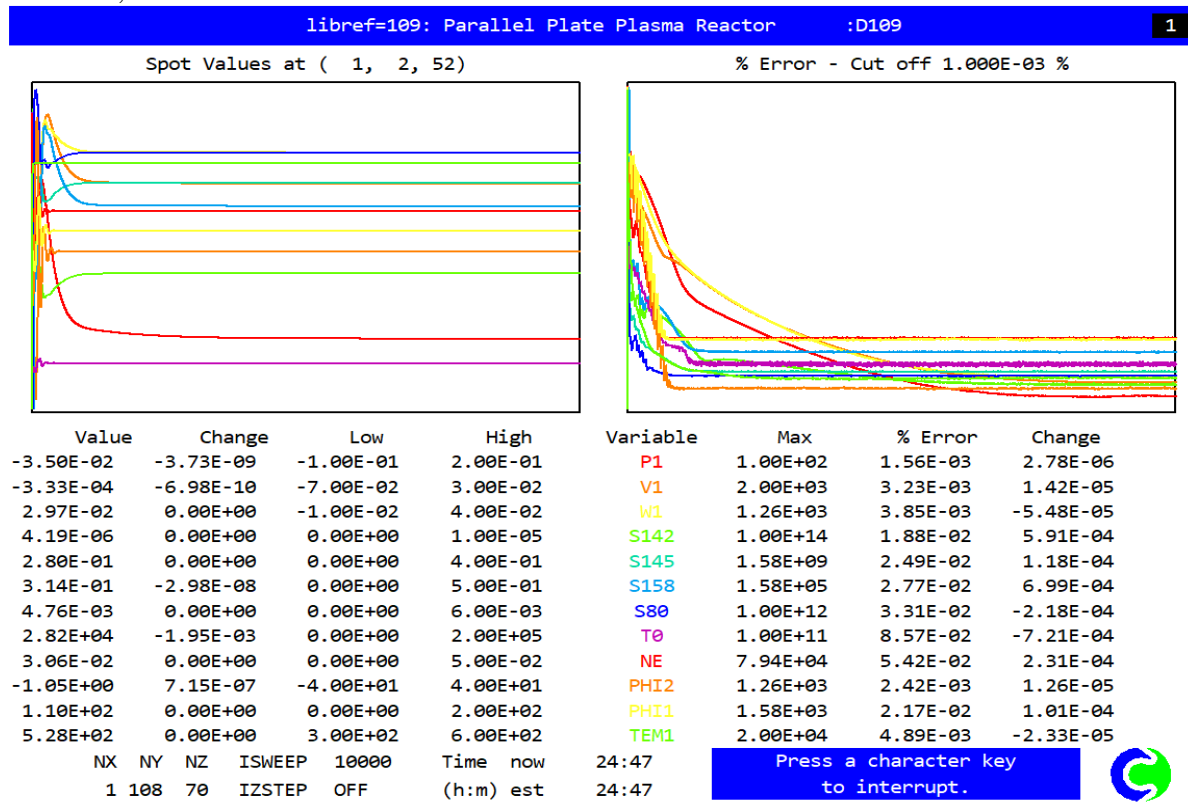
Περίπτωση 6^η
800K – 3,344 m/s



Περίπτωση 7η
900K – 1,344 m/s



Περίπτωση 8η
900K – 2,344 m/s

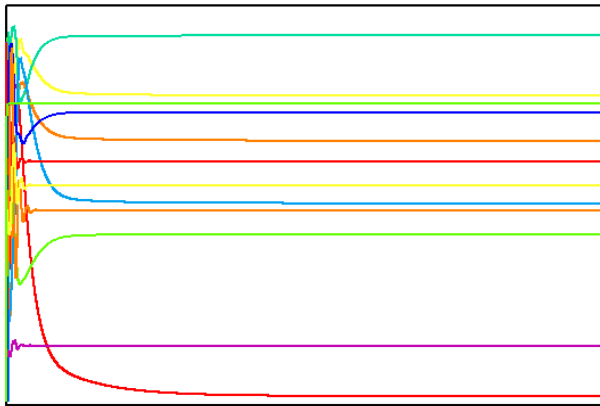


Περίπτωση 9η
900K – 3,344 m/s

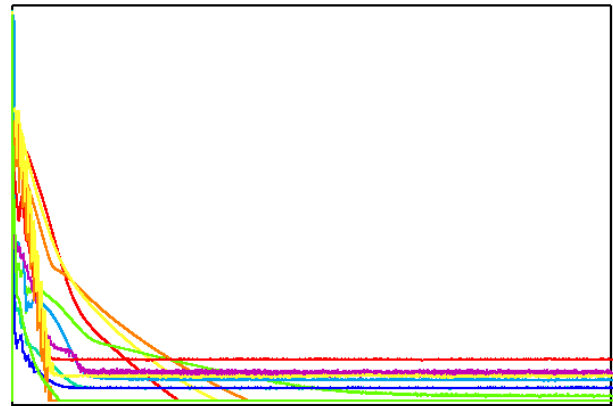
libref=109: Parallel Plate Plasma Reactor :D109

1

Spot Values at (1, 2, 52)



% Error - Cut off 1.000E-02 %



Value	Change	Low	High	Variable	Max	% Error	Change
-9.53E-02	0.00E+00	-1.00E-01	3.00E-01	P1	1.26E+02	1.32E-03	-3.24E-06
-3.26E-04	-7.86E-10	-2.00E-01	1.00E-01	V1	1.58E+03	2.47E-03	-9.34E-06
2.91E-02	0.00E+00	-1.00E-02	4.00E-02	W1	1.26E+03	2.86E-03	6.72E-06
4.27E-06	0.00E+00	0.00E+00	1.00E-05	S142	1.00E+13	1.48E-02	-4.06E-04
2.80E-01	0.00E+00	0.00E+00	3.00E-01	S145	1.26E+09	2.32E-02	1.42E-04
3.03E-01	0.00E+00	0.00E+00	6.00E-01	S158	2.00E+05	2.47E-02	1.52E-04
4.43E-03	0.00E+00	0.00E+00	6.00E-03	S80	1.00E+12	2.91E-02	-1.65E-04
2.82E+04	1.95E-03	0.00E+00	2.00E+05	T0	1.00E+11	8.36E-02	-3.22E-03
3.06E-02	0.00E+00	0.00E+00	5.00E-02	NE	7.94E+04	5.41E-02	2.72E-04
-1.05E+00	4.77E-07	-4.00E+01	4.00E+01	PHI2	1.26E+03	2.37E-03	-2.28E-05
1.10E+02	0.00E+00	0.00E+00	2.00E+02	PHI1	1.58E+03	2.15E-02	2.82E-06
5.28E+02	0.00E+00	3.00E+02	6.00E+02	TEM1	1.26E+04	3.97E-03	5.21E-06
NX NY NZ ISWEEP	10000	Time now	56:05	Press a character key to interrupt.			
1 108 70 IZSTEP	OFF	(m:s) est	56:06				

