

Προσομοίωση αέριας φάσης αντιδραστήρα πλάσματος με λεπτομερή μοντέλα

Σ. Μουχτούρης και Γ. Κόκκορης

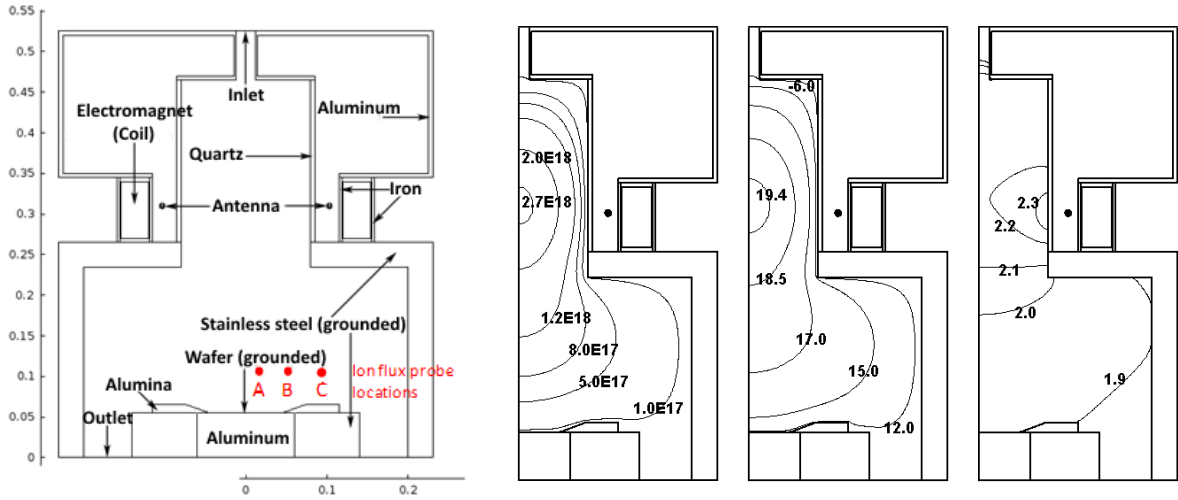
Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης & Νανοτεχνολογίας, ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος,
Αγία Παρασκευή, 15310

Οι διεργασίες πλάσματος χρησιμοποιούνται για την εγχάραξη, τροποποίηση, εκτράχυνση και καθαρισμό επιφανειών καθώς και για την απόθεση υμενίων. Το εύρος εφαρμογών τους τις καθιστά σημαντικές σε πεδία όπως της μικρο-(νανο-)ηλεκτρονικής και των μικρο-(νανο-)ηλεκτρομηχανικών συστημάτων, όπου χρησιμοποιούνται κυρίως για τη μεταφορά σχήματος, της μικρορευστονικής (microfluidics), όπου χρησιμοποιούνται για τις αλλαγές των ιδιοτήτων διαβροχής των επιφανειών, και των φωτοβολταϊκών συστημάτων, όπου χρησιμοποιούνται για την απόθεση υμενίων. Διεξάγονται σε αντιδραστήρες πλάσματος. Κατάλληλα μίγματα αερίων διασπώνται μέσω αντιδράσεων με ηλεκτρόνια. Τα ηλεκτρόνια επιταχύνονται υπό την επίδραση ηλεκτρικών ή/και μαγνητικών πεδίων και αν και η ενέργεια τους είναι μερικά eV (1 eV αντιστοιχεί σε 11600 K), το πλάσμα που δημιουργείται είναι ψυχρό λόγω της χαμηλής θερμοκρασίας του αέριου μίγματος (300 – 500 K).

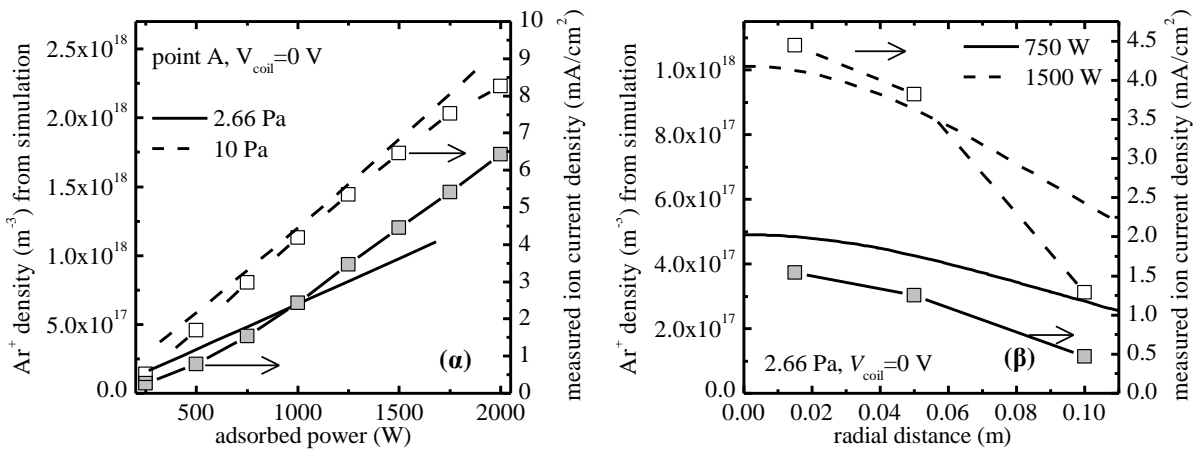
Το αντικείμενο της παρούσας εργασίας είναι η κατάσταση μαθηματικού προτύπου (μοντέλου) και η προσομοίωση της αέριας φάσης του αντιδραστήρα του εργαστηρίου πλάσματος του Ινστιτούτου Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας του ΕΚΕΦΕ «Δημόκριτος» (Σχήμα 1α). Ένα χρονικά μεταβαλλόμενο μαγνητικό πεδίο παράγεται από μία αντένα που διαρρέεται από εναλλασσόμενο ρεύμα. Το πεδίο αυτό επάγει ηλεκτρικά ρεύματα στο αέριο οδηγώντας στη δημιουργία και διατήρηση του πλάσματος. Το μαθηματικό πρότυπο [1] περιλαμβάνει τις εξισώσεις μεταφοράς ορμής και συνέχειας, διατήρησης της μάζας των συστατικών (ουδέτερων και φορτισμένων), διατήρησης της ενέργειας των ηλεκτρονίων, καθώς και τις εξισώσεις Maxwell. Για τη σύζευξη όλων των εξισώσεων και την προσομοίωση (αριθμητική επίλυση) χρησιμοποιείται εμπορικός κώδικας (Comsol).

Γίνονται υπολογισμοί για πλάσμα Ar σε συνθήκες χαμηλής πίεσης (2.66 - 10 Pa) για διαφορετικές τιμές απορροφούμενης ισχύος. Το δίκτυο αντιδράσεων που χρησιμοποιείται προέρχεται από την εργασία των Thorsteinsson και Gudmundsson [2]. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης συγκρίνονται με πειραματικές μετρήσεις καθέτρα μέτρησης ροής θετικών ιόντων (ion flux probe [3]). Συγκεκριμένα, γίνεται σύγκριση της πυκνότητας του ιόντος Ar^+ με την μετρούμενη πυκνότητα του ρεύματος ιόντων σε ένα σημείο του αντιδραστήρα για διαφορετικές συνθήκες (Σχήμα 2α) και για τις ίδιες συνθήκες σε διαφορετικά σημεία (Σχήμα 2β). Η σύγκριση με τα πειραματικά αποτελέσματα είναι ικανοποιητική σε κάθε περίπτωση. Επιπρόσθετα, παρουσιάζεται σύγκριση των αποτελεσμάτων του λεπτομερούς μοντέλου με αυτά ενός απλούστερου μοντέλου μαθηματικού προτύπου μηδενικής διάστασης (global ή volume averaged models [4, 5]) (Σχήματα 3α και 3β). Αν και δεν μπορούμε να έχουμε τη χωρική κατανομή των παραμέτρων του πλάσματος με μοντέλα μηδενικής διάστασης, μπορούν να αναπαράγουν τη «μέση συμπεριφορά» του πλάσματος με πολύ μικρότερο υπολογιστικό κόστος από τα λεπτομερή.

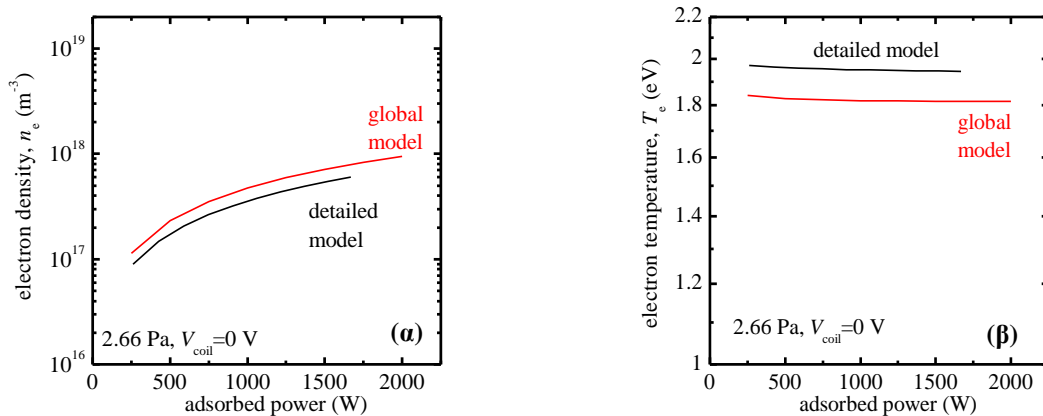
- [1] E. Kawamura, D. B. Graves, and M. A. Lieberman, "Fast 2D hybrid fluid-analytical simulation of inductive/capacitive discharges," *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 20, p. 035009, Jun 2011.
- [2] E. G. Thorsteinsson and J. T. Gudmundsson, "A global (volume averaged) model of a Cl-2/Ar discharge: I. Continuous power," *J Phys D Appl Phys*, vol. 43, p. 115201, 2010.
- [3] N. S. Braithwaite, J. P. Booth, and G. Cunge, "A novel electrostatic probe method for ion flux measurements," *Plasma Sources Sci. Technol.*, vol. 5, pp. 677-684, 1996.
- [4] G. Kokkoris, A. Goodyear, M. Cooke, and E. Gogolides, "A global model for C4F8 plasmas coupling gas phase and wall surface reaction kinetics," *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 41, p. 195211, Oct 7 2008.
- [5] *plasma-R: Global modeling of plasma reactors*.www.plasma-r.com



Σχήμα 1. α) Εγκάρσια τομή του αντιδραστήρα με απεικόνιση των σημαντικότερων μερών του. Α, Β και C είναι τα σημεία μέτρησης της πυκνότητας ρεύματος ιόντων. Αποτελέσματα προσομοίωσης σε πλάσμα Ar για β) πυκνότητα ηλεκτρονίων (m^{-3}), γ) δυναμικό πλάσματος (V) και δ) θερμοκρασία ηλεκτρονίων (eV). Συνθήκες λειτουργίας: παροχή εισόδου 200 sccm, πίεση λειτουργίας 2.66 Pa, απορροφούμενη ισχύς από το πλάσμα 1061 W, θερμοκρασία αερίου 315 K, συχνότητα πηγής 13.56 MHz.



Σχήμα 2. α) Πυκνότητα του Ar^+ από το λεπτομερές μοντέλο στο σημείο Α (Σχήμα 1α) και μετρούμενη πυκνότητα ρεύματος ιόντων στο ίδιο σημείο σε σχέση με την απορροφούμενη ισχύ στα 2.66 και 10 Pa. β) Πυκνότητα του Ar^+ από το λεπτομερές μοντέλο και μετρούμενη πυκνότητα ρεύματος ιόντων κατά μήκος της ακτινικής διεύθυνσης σε ύψος 6 cm πάνω από το δίσκιο (σημεία Α, Β, C στο Σχήμα 1α), για 750 και 1500 W απορροφούμενης ισχύος σε πίεση 2.66 Pa.



Σχήμα 3. Συγκρινόμενα αποτελέσματα από το μοντέλο μηδενικής διάστασης (global model) και το λεπτομερές μοντέλο σε σχέση με την απορροφούμενη ισχύ για πλάσμα Ar σε πίεση 2.66 Pa: α) Πυκνότητα και β) θερμοκρασία ηλεκτρονίων.