

УДК 541.124; 539.234

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛЯ ТЕЧЕНИЯ АЛМАЗОПОДОБНОЙ УГЛЕРОДНОЙ ПЛЕНКИ В РЕАКЦИОННОЙ КАМЕРЕ ЦИКЛОТРОННО-РЕЗОНАНСНОГО ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОГО ГАЗОФАЗНОГО ОСАЖДЕНИЯ

Ф. Л. Ли, Ч. С. Тай*, Дж. Ч. Леон*

Центр общего образования Военной академии Республики Китай,
83059 Гаосюн, Тайвань, Китай

* Национальный университет науки и техники Пинтуна,
91201 Пинтун, Тайвань, Китай

E-mails: fulinlih@gmail.com, chtai@mail.npust.edu.tw, jcleong@mail.npust.edu.tw

Анализируется влияние скорости реагирующего газа на свойства пленки с целью определения оптимальных параметров для получения однородной алмазоподобной углеродной пленки в реакционной камере циклотронно-резонансного плазмохимического газофазного осаждения. С использованием методов вычислительной гидродинамики моделируются химические поверхностные реакции, поля течения и температуры, а также процесс теплообмена. Из результатов численного моделирования следует, что естественная конвекция и массоперенос оказывают влияние на возвратное течение, а следовательно, и на распределение материала при осаждении. Возникновение возвратного течения обусловлено наличием концевой пластины в верхней части подложки, что приводит к существенному увеличению скорости осаждения. При этом уменьшается однородность поверхности подложки.

Ключевые слова: алмазоподобный углерод, циклотронно-резонансное плазмохимическое газофазное осаждение, вычислительная гидроаэромеханика, скорость осаждения, однородность.

ВВЕДЕНИЕ

Первые результаты синтеза алмазоподобных углеродных тонких пленок были представлены в работе [1]. Этот материал, являющийся химически инертным, имеет высокое сопротивление на износ и разрушение, высокую оптическую прозрачность в инфракрасном диапазоне, что позволяет использовать его при изготовлении режущих инструментов, гаек и винтов, а также медицинских устройств и оптических приборов.

Несмотря на то что алмазоподобный углерод считается подобным углероду, его структура отличается от структуры алмаза и графита. Атомная структура алмазоподобного углерода близка к sp^3 -структуре алмаза sp^2 -структуре графита. Так как углерод связан с атомом водорода, то его можно считать аморфной структурой. В процессе производства алмазоподобная углеродная пленка может быть классифицирована как гидрогенизируемая

аморфная структура а-С:Н или аморфная структура а-С. Составляющими первой структуры являются метан, бензол и этан, второй — графит и т. п. В настоящее время существует большое количество методов производства алмазоподобной углеродной пленки: напыление путем конденсации из паровой (газовой) фазы, химическое парофазное осаждение, эксимерная лазерная абляция.

В настоящей работе исследуется процесс циклотронно-резонансного плазмохимического газофазного осаждения. Целью работы является изучение основных параметров, влияющих на образование алмазоподобной углеродной пленки на подложке. Например, качество алмазоподобной углеродной пленки существенно зависит от скорости реагирующих газов. Обычно оптимальные значения параметров процесса получения пленки определяются методом проб и ошибок или методом Тагучи. Для повышения эффективности процесса получения оптимальной алмазоподобной углеродной пленки необходимо использовать систематический подход, включающий анализ процесса циклотронно-резонансного плазмохимического газофазного осаждения с учетом поверхностной реакции, полей течения, температуры и концентрации. Одним из таких подходов является подход вычислительной гидромеханики.

В работе [2] установлено, что с уменьшением расстояния между входом в реактор и реактором или времени реакции скорость осаждения алмазоподобного углерода увеличивается. Кроме того, показано, что при использовании входа в виде разбрызгивающей головки структура алмазоподобного углерода пленки становится более однородной. В [3] исследованы особенности автоэлектронной эмиссии и механические свойства алмазоподобного углерода, обнаружено, что электронная эмиссия алмазоподобной углеродной пленки является наиболее эффективной, если смесь включает 9 % азота и 91 % метана. В [4] изучено влияние геометрической формы подложки на процесс осаждения. При исследовании процесса массопереноса установлено, что при использовании вогнутой подложки структура получаемой пленки более однородна, чем при использовании выпуклой подложки. Однако применение выпуклой подложки обеспечивает более высокую скорость осаждения. В работе [5] исследовано влияние тепломассообмена на процесс химического парофазного осаждения, в частности на скорость осаждения. Изучалось влияние таких параметров, как высота реактора, число Рейнольдса, температура подложки и размер входного отверстия. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. Другим важным параметром, влияющим на структуру течения в реакторе, является плавучесть. В [6, 7] отмечено, что в случае осевой симметрии наличие плавучести может привести к возникновению возвратного течения и в конечном счете к возникновению турбулентного течения.

В последнее время в большинстве работ, посвященных исследованию алмазоподобного углерода, экспериментально изучаются его механические свойства (коэффициент трения, твердость поверхности и т. д.). При этом применяются рамановская оптическая спектроскопия и отраженная инфракрасная спектроскопия с фурье-преобразованием [8, 9]. В данной работе с использованием численного метода изучается циклотронно-резонансное плазмохимическое газофазное осаждение алмазоподобной углеродной пленки. Это позволяет определить оптимальные параметры реакции, зная характеристики поля течения.

1. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОСАЖДЕНИЯ

1.1. Управляющее уравнение. В данной работе рассматриваемая жидкость предполагается несжимаемой, а течение — ламинарным, стационарным и осесимметричным. Как теплота химической реакции, так и тепловое излучение пренебрежимо малы. Давление в реакторе составляет 10^{-1} тор.

С учетом принятых предположений в безразмерных переменных

$$R^* = \frac{r}{D_H}, \quad Z^* = \frac{z}{D_H}, \quad V^* = \frac{v_r}{u_{in}}, \quad U^* = \frac{v_z}{u_{in}}, \quad C^* = \frac{Y}{Y_{in}}, \quad P^* = \frac{p - p_0}{\rho u_{in}^2},$$

$$\text{Re} = \frac{u_{in} D_H}{\nu}, \quad \text{Pr} = \frac{\nu}{\alpha}, \quad \text{Sc} = \frac{\nu}{D_i}, \quad \text{Gr} = \frac{g\beta(T_{sub} - T_{in})D_H^3}{\nu^2}, \quad \theta = \frac{T - T_{in}}{T_{sub} - T_{in}}$$

уравнения задачи имеют следующий вид:

— уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial V^*}{\partial R^*} + \frac{\partial U^*}{\partial Z^*} = 0;$$

— уравнения импульса:

$$V^* \frac{\partial V^*}{\partial R^*} + U^* \frac{\partial V^*}{\partial Z^*} = -\frac{\partial P^*}{\partial R^*} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 V^*}{\partial R^{*2}} + \frac{\partial^2 V^*}{\partial Z^{*2}} - \frac{V^*}{R^{*2}} \right),$$

$$V^* \frac{\partial U^*}{\partial R^*} + U^* \frac{\partial U^*}{\partial Z^*} = -\frac{\partial P^*}{\partial Z^*} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 U^*}{\partial R^{*2}} + \frac{\partial^2 U^*}{\partial Z^{*2}} \right) - \frac{\text{Gr}}{\text{Re}^2} \theta;$$

— уравнение энергии:

$$V^* \frac{\partial \theta}{\partial R^*} + U^* \frac{\partial \theta}{\partial Z^*} = \frac{1}{\text{Re Pr}} \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial R^{*2}} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial Z^{*2}} \right);$$

— уравнение диффузии:

$$V^* \frac{\partial C^*}{\partial R^*} + U^* \frac{\partial C^*}{\partial Z^*} = \frac{1}{\text{Re Sc}} \left(\frac{\partial^2 C^*}{\partial R^{*2}} + \frac{\partial^2 C^*}{\partial Z^{*2}} \right).$$

Здесь r, z — цилиндрические координаты; D_H — гидравлический диаметр; v_r, v_z — скорость в r - и z -направлении; u_{in} — скорость на входе в реактор; Y — массовая доля компонента смеси; p — давление; p_0 — рабочее давление; ρ — плотность; ν — кинематическая вязкость; α — температуропроводность; β — коэффициент объемного расширения; D_i — коэффициент массовой диффузии; g — ускорение свободного падения; T — температура; $\text{Re}, \text{Pr}, \text{Sc}, \text{Gr}$ — числа Рейнольдса, Прандтля, Шмидта, Грасгофа; индекс in соответствует значениям параметров состояния на входе в реактор, sub — на подложке.

1.2. Механизм химической реакции на поверхности подложки. Рассматриваемые в данной работе реакции на поверхности подложки являются гомогенными для фаз газ — газ:



и негомогенными для фаз газ — твердое тело:



Так как полная масса газовой и твердой фаз должна сохраняться, каждый компонент должен удовлетворять уравнению

$$\sum_{i=1}^{N_g} g'_{i,r} G_i \xrightarrow{K_r} \sum_{i=1}^{N_g} g''_{i,r} G_i + \sum_{i=1}^{N_b} b''_{i,r} B_i,$$

где G_i, B_i — компоненты газовой и твердой фаз соответственно; N_g, N_b — количества этих компонентов; $g'_{i,r}$ — стехиометрический коэффициент для i -го компонента реагента; $g''_{i,r}$, $b''_{i,r}$ — стехиометрические коэффициенты для каждого i -го компонента продукта реакции; K_r — полная постоянная скорость реакции.

Исследование поверхностной реакции основано на использовании понятий скорости образования и скорости разрушения каждого химического компонента на подложке. В то же время эти скорости должны удовлетворять уравнению Аррениуса [10]. Так как течение ламинарное, то при описании поверхностной реакции в настоящей работе используется ламинарная модель с конечной скоростью:

$$R_i = M_{w,g} \sum_{r=1}^{N_g} \hat{R}_{i,g} + M_{w,b} \sum_{r=1}^{N_b} \hat{R}_{i,b}.$$

Здесь $M_{w,g}$, $M_{w,b}$ — молекулярная масса газообразных и твердых компонентов соответственно; $\hat{R}_{i,g}$, $\hat{R}_{i,b}$ — молярная скорость разложения и образования газообразных и твердых компонентов в ходе реакции соответственно.

Скорости получения или расхода газовой и твердой фаз каждого компонента могут быть определены по уравнениям

$$\hat{R}_{i,g} = \sum_{r=1}^{N_g} (g''_{i,r} - g'_{i,r}) R_r, \quad \hat{R}_{i,b} = \sum_{r=1}^{N_b} (b''_{i,r} - b'_{i,r}) R_r.$$

Скорость химической реакции на поверхности подложки R_r определяется соотношениями

$$R_r = k_{f,r} \prod_{i=1}^{N_g} (G_i)_{wall}^{g'_{i,r}}, \quad k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E/(RT)},$$

где $(G_i)_{wall}^{g'_{i,r}}$ — молярные концентрации компонентов газа на стенке; A_r — предэкспоненциальный коэффициент; β_r — безразмерный показатель в уравнении Аррениуса; E — удельная энтальпия; R — универсальная газовая постоянная. В соответствии с законом Аррениуса параметры, определяющие скорость реакции, принимают следующие значения [10]: для уравнения (1) $A_r = 6,9 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1}$, $E = 2248 \text{ кДж}/(\text{кг} \cdot \text{моль})$, $\beta_r = 2,74$, для уравнения (2) $A_r = 6,4 \cdot 10^{17} \text{ с}^{-1}$, $E = 338 \text{ кДж}/(\text{кг} \cdot \text{моль})$, $\beta_r = -1,3$.

1.3. Физические параметры газовой смеси. При моделировании циклотронно-резонансного плазмохимического газофазного осаждения необходимо определить следующие физические параметры газовой смеси: плотность ρ , теплоемкость c_p , динамическую вязкость μ , теплопроводность k :

$$\rho = \frac{1}{\sum_i Y_i / \rho_i}, \quad c_p = \sum_i Y_i c_{p,i}, \quad \mu = \sum_i \frac{Y_i \mu_i}{\sum_j Y_j \varphi_{i,j}}, \quad k = \sum_i \frac{Y_i k_i}{\sum_j Y_j \varphi_{i,j}}.$$

При определении плотности используется средневзвешенный по объему закон смешивания, динамическая вязкость определяется в соответствии с уравнением Клапейрона, теплопроводность вычисляется на основе теплопроводности для каждого компонента.

Из экспериментов следует, что исходный газ состоит в основном из водорода, который улучшает качество алмазоподобной углеродной пленки. Поэтому в данной работе используется коэффициент диффузии для водорода, равный $4,1 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$.

1.4. Граничные условия. Вычислительная область показана на рис. 1. Ставятся следующие граничные условия.

1. На входе задаются скорость потока и температура, равная 1000 К. Эти условия обеспечивают инерцию вынужденной конвекции по направлению к подложке.

2. Согласно граничным условиям на выходе никакое химическое вещество не покидает систему.

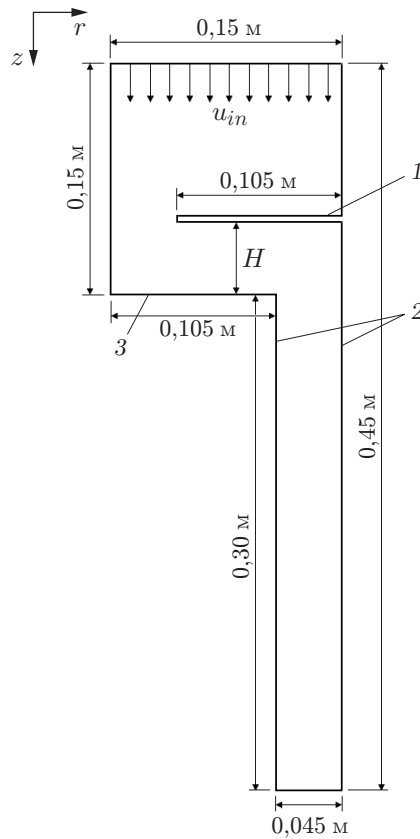


Рис. 1. Вычислительная область:

1 — пластина, 2 — стенки реакционной камеры, 3 — подложка

3. Стенки реактора считаются твердыми, непроницаемыми и химически инертными. На них ставится условие прилипания. Задается температура, равная 300 К. Массовая доля Y_i каждого компонента на этих стенках удовлетворяет условию

$$\frac{\partial Y_i}{\partial n} = 0,$$

где \mathbf{n} — единичный вектор нормали к твердой стенке.

4. Подложка считается твердой, непроницаемой, на ней ставится условие прилипания. На подложке поддерживается температура, равная 600 К, что обеспечивает энергию, достаточную для химической реакции. Поскольку массовый расход на подложке должен быть уравновешен скоростью образования вещества, ставится дополнительное условие

$$\rho_{wall} D_i \frac{\partial Y_{i,wall}}{\partial n} - m_{dep} Y_{i,wall} = M_{w,i} \hat{R}_{i,bulk},$$

где ρ_{wall} , m_{dep} , $Y_{i,wall}$ — плотность газа, скорость осаждения и массовая доля вещества на подложке.

5. В силу симметрии задачи (ось симметрии $r = 0$) ставится условие периодичности

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0,$$

где φ — любая физическая величина.

1.5. Скорость осаждения и однородность алмазоподобной углеродной пленки. При исследовании осаждения алмазоподобной углеродной пленки на подложку большое значение имеют скорость образования и однородность алмазоподобной углеродной пленки. Для определения скорости образования алмазоподобного углерода используется массовая скорость осаждения на единицу площади, для получения оценки однородности алмазоподобного углерода с помощью статистических методов вычисляются среднее, стандартное отклонение и дисперсия для алмазоподобной углеродной пленки:

- среднее значение \bar{x} определяется как геометрическое среднее по площади подложки;
- стандартное отклонение вычисляется по формуле

$$s = \sum \frac{|x - \bar{x}|}{n'};$$

- дисперсия, определяемая как s^2 , показывает степень отклонения данных.

1.6. Эффективность конверсии. Чтобы оценить эффективность конверсии при входе в реактор метана с молярной концентрацией $5 \cdot 10^{-4}$ кмоль/м³, используется молярная концентрация метана, оставшегося на подложке после завершения поверхностной реакции. Наряду со степенью однородности и скоростью осаждения алмазоподобного углерода этот параметр используется для выбора оптимальных рабочих режимов. Эффективность конверсии оценивается по формуле

$$q = \frac{(\text{CH}_4)_{in} - (\text{CH}_4)_{sub}}{(\text{CH}_4)_{in}} \cdot 100 \%,$$

где $(\text{CH}_4)_{in}$ — молярная концентрация метана, входящего в камеру; $(\text{CH}_4)_{sub}$ — молярная концентрация метана, оставшегося на подложке, после завершения поверхностной реакции.

2. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД

Во всех расчетах течение предполагается несжимаемым ламинарным, консервативные переменные находятся последовательно. Конвективные и диффузионные члены потоков вычисляются с использованием схемы первого порядка точности против потока и схемы центральных разностей первого порядка точности соответственно. Связь между давлением и скоростью устанавливается с помощью полунявного метода для связанных с давлением уравнений (алгоритм SIMPLE). В качестве критерия сходимости принималось следующее условие: невязки всех физических величин должны быть меньше 10^{-4} . Все расчеты были выполнены с помощью программы FLUENT на операционной системе Windows XP.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Эффективность осаждения алмазоподобного углерода в случае отсутствия перегородки при различных числах Рейнольдса. Сначала исследуются течение и осаждение в случае отсутствия перегородки при различных числах Рейнольдса. В табл. 1 приведены параметры процесса осаждения. Из табл. 1 следует, что при увеличении скорости течения на входе эффективность конверсии уменьшается. При $Re = 200$ достигается наибольшая средняя скорость осаждения, при этом степень однородности наименьшая. Наибольшая степень однородности пленки достигается при значении $Re = 50$, при котором скорость осаждения попадает в приемлемый диапазон. Это обусловлено тем, что при малом значении Re и равномерной скорости течения на входе на осевую скорость не влияет инерционная сила. При этом основное влияние на течение оказывает естественная конвекция. В данном случае размер зоны возвратного течения таков, что она оказывает воздействие на радиальную скорость течения выше подложки и вызывает изменение

Таблица 1

Результаты численного моделирования
в случае отсутствия перегородки при различных числах Рейнольдса

| Re | $q, \%$ | $m_{dep} \cdot 10^{-5}, \text{ кг}/(\text{м} \cdot \text{с})$ | $s \cdot 10^{-10}$ |
|-----|---------|---|--------------------|
| 25 | 87,7 | 6,4 | 4,70 |
| 50 | 85,3 | 8,2 | 0,19 |
| 75 | 84,0 | 8,2 | 1,10 |
| 100 | 83,0 | 8,3 | 4,70 |
| 125 | 82,5 | 8,5 | 5,00 |
| 150 | 82,1 | 8,5 | 5,10 |
| 175 | 81,4 | 8,9 | 5,50 |
| 200 | 80,5 | 9,5 | 6,20 |

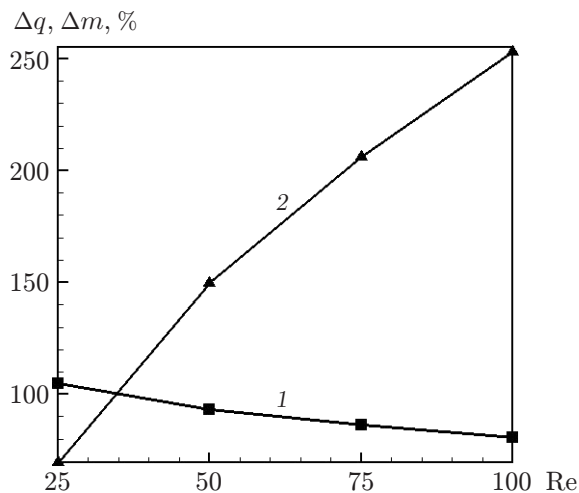


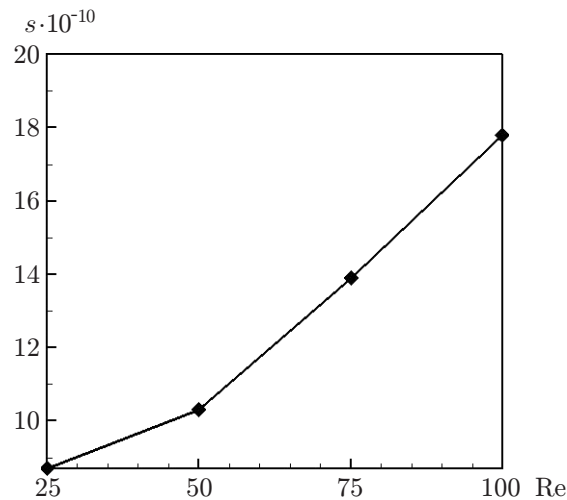
Рис. 2. Результаты сравнения эффективности конверсии (1) и скорости осаждения (2) в случаях наличия и отсутствия перегородки при различных значениях Re ($L = 0,105$ м, $H = 0,03$ м)

скорости осаждения пленки; при $Re < 100$ влияние естественной конвекции практически отсутствует и преобладает влияние вынужденной конвекции.

Таким образом, степень однородности пленки зависит от влияния вынужденной конвекции и возвратного течения в области реакции на скорость течения по подложке. При $Re > 100$ плавучесть не оказывает влияния на осевую скорость течения. Следует отметить, что при больших числах Рейнольдса скорость осаждения в центре подложки не увеличивается, увеличивается только осевая скорость течения на наиболее удаленной от центра части подложки, вследствие чего в этой области осаждение происходит более интенсивно.

3.2. Влияние положения прямоугольной перегородки в реакционной камере. Для уменьшения количества реагирующего газа, вытекающего из отверстий, увеличения скорости осаждения на подложку и повышения эффективности конверсии в реакционную камеру на расстоянии $H = 0,03$ м над подложкой помещалась перегородка длиной $L = 0,105$ м (см. рис. 1). При таком положении подложки были проведены расчеты при различных числах Рейнольдса.

На рис. 2 приведены результаты сравнения эффективности конверсии и скорости осаждения в случаях наличия и отсутствия перегородки при различных числах Рейнольдса. По оси ординат отложены величины $\Delta m = (m_{dep}^b / m_{dep}) \cdot 100 \%$, $\Delta q = (q^b / q) \cdot 100 \%$.

Рис. 3. Зависимость отклонения от числа Рейнольдса ($L = 0,105$ м, $H = 0,03$ м)

В случае наличия перегородки при $Re = 50$ эффективность конверсии на 17 % меньше, а скорость осаждения на 50 % больше, чем в случае отсутствия перегородки. При этом отклонение равно $s = 10,3 \cdot 10^{-10}$, т. е. на два порядка больше, чем в случае отсутствия перегородки. Результаты показывают, что добавление перегородки приводит к значительному увеличению скорости осаждения и степени неоднородности. При $Re > 50$ существенно увеличивается отклонение s (рис. 3), в то время как при $Re < 50$ скорость осаждения становится очень малой. Поэтому исследование процесса осаждения при различных длинах перегородки и ее положениях проводилось при $Re = 50$.

3.3. Влияние параметров перегородки на процессы, происходящие в реакционной камере. Выше отмечено, что установка перегородки в реакционной камере приводит к возникновению зоны возвратного течения выше перегородки, что может оказать воздействие на характер течения, скорость реакции, потоки осаждения, а также на эффективность конверсии, скорость осаждения и отклонение. Ниже приводятся результаты исследования влияния параметров перегородки на процессы, происходящие в реакционной камере.

Сначала проводились исследования при постоянной длине перегородки $L = 0,105$ м и постепенно увеличивающейся высоте H в случае $Re = 50$. Результаты численных расчетов приведены в табл. 2. Как и следовало ожидать, при установке перегородки в камере скорость осаждения увеличивается.

Таблица 2
Результаты численного моделирования
при различных значениях H ($Re = 50$, $L = 0,105$ м)

| H , м | q , % | $m_{dep} \cdot 10^{-5}$, кг/(м · с) | $s \cdot 10^{-10}$ |
|---------|---------|--------------------------------------|--------------------|
| 0,03 | 79,62 | 12,90 | 13,80 |
| 0,04 | 80,07 | 12,40 | 11,50 |
| 0,05 | 80,45 | 12,00 | 10,30 |
| 0,06 | 81,12 | 11,60 | 9,63 |
| 0,07 | 81,73 | 11,20 | 9,02 |
| 0,08 | 81,99 | 10,90 | 8,06 |
| 0,09 | 82,04 | 11,00 | 7,73 |
| 0,10 | 82,42 | 10,70 | 9,99 |
| 0,11 | 83,02 | 10,20 | 4,63 |
| 0,12 | 83,56 | 9,73 | 3,61 |

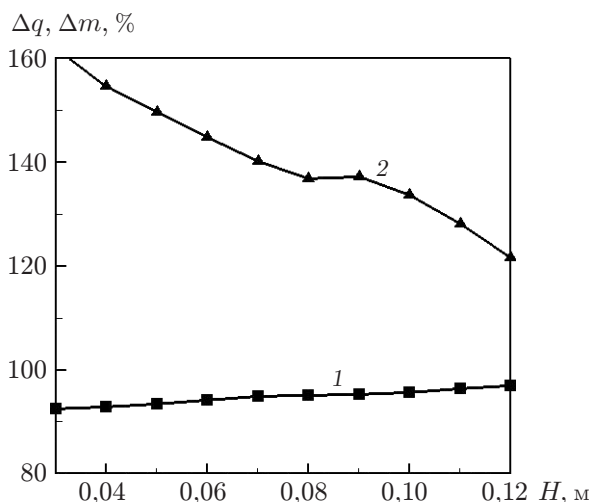


Рис. 4. Зависимости изменения эффективности конверсии (1) и скорости осаждения (2) от параметра H ($L = 0,105$ м, $Re = 50$)

Таблица 3

Результаты численного моделирования
при различных значениях L ($Re = 50$, $H = 0,05$ м)

| $L, \text{ м}$ | $q, \%$ | $m_{dep} \cdot 10^{-5}, \text{ кг}/(\text{м} \cdot \text{с})$ | $s \cdot 10^{-10}$ |
|----------------|---------|---|--------------------|
| 0,045 | 86,58 | 7,74 | 0,200 |
| 0,055 | 86,86 | 7,56 | 0,198 |
| 0,065 | 87,04 | 7,45 | 0,192 |
| 0,075 | 86,92 | 7,55 | 0,276 |
| 0,085 | 86,32 | 7,99 | 0,785 |
| 0,095 | 83,88 | 9,69 | 2,320 |
| 0,105 | 80,45 | 12,00 | 10,300 |
| 0,115 | 76,29 | 15,60 | 42,100 |

На рис. 4 показано изменение эффективности конверсии и скорости осаждения в зависимости от параметра H . Видно, что при установке перегородки скорость осаждения увеличивается, но при этом увеличивается степень неоднородности. Однако с увеличением H толщина слоя осаждения уменьшается, при этом уменьшается степень неоднородности. При $H = 0,1$ м зона возвратного течения, первоначально расположенная над подложкой, исчезает, при этом ниже перегородки возникает большая рециркуляционная зона. В результате локальная скорость осаждения в центральной области подложки увеличивается, при этом увеличивается и степень неоднородности. При дальнейшем увеличении H указанное явление не наблюдается (рис. 5).

Приведенные выше результаты могут быть использованы для оптимизации процесса химического парофазного осаждения.

Перегородка устанавливается для того, чтобы уменьшить выход из реакционной камеры не вступившего в реакцию газа. В табл. 3 приведены результаты численного моделирования при $Re = 50$, $H = 0,05$ м и различных длинах перегородки L .

На рис. 6 показано изменение эффективности конверсии и скорости осаждения в зависимости от длины перегородки. Видно, что в случае наличия перегородки постепенное увеличение значения L приводит к увеличению скорости осаждения и отклонения, а также к уменьшению эффективности конверсии. При $L < 0,085$ м достигается наибольшая степень однородности, тогда как при $L > 0,085$ м — наибольшая скорость осаждения.

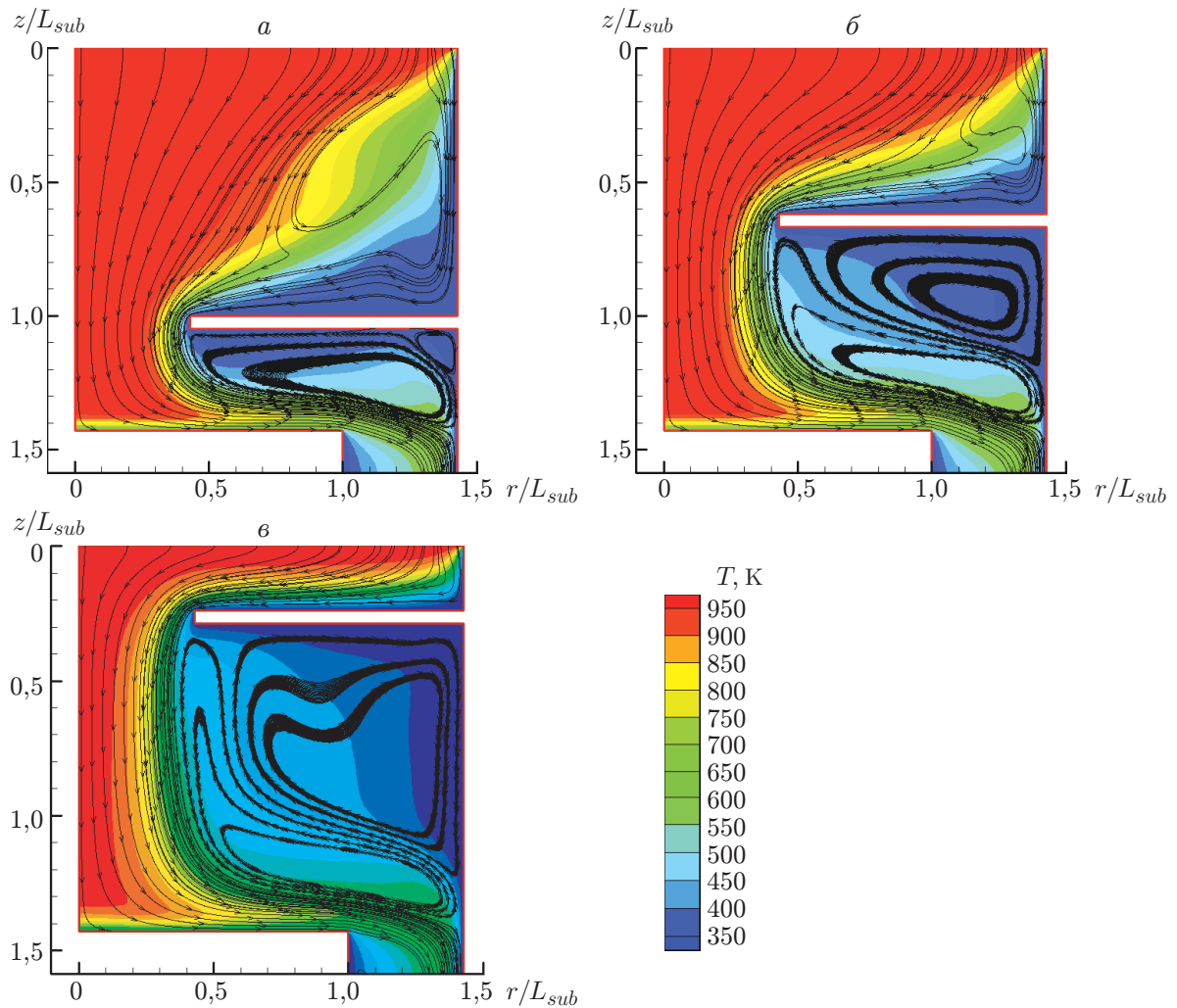


Рис. 5. Распределения линий тока и изотерм при различных значениях H ($L = 0,105$ м, $Re = 50$):
 а — $H = 0,04$ м, б — $H = 0,08$ м, в — $H = 0,12$ м

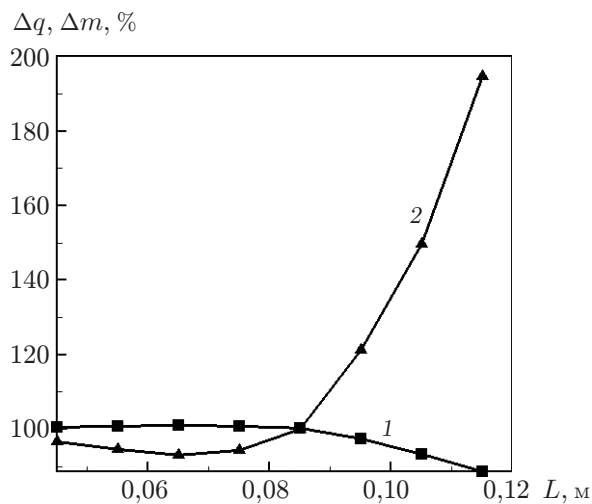


Рис. 6. Зависимости изменения эффективности конверсии (1) и скорости осаждения (2) от параметра L ($H = 0,05$ м, $Re = 50$)

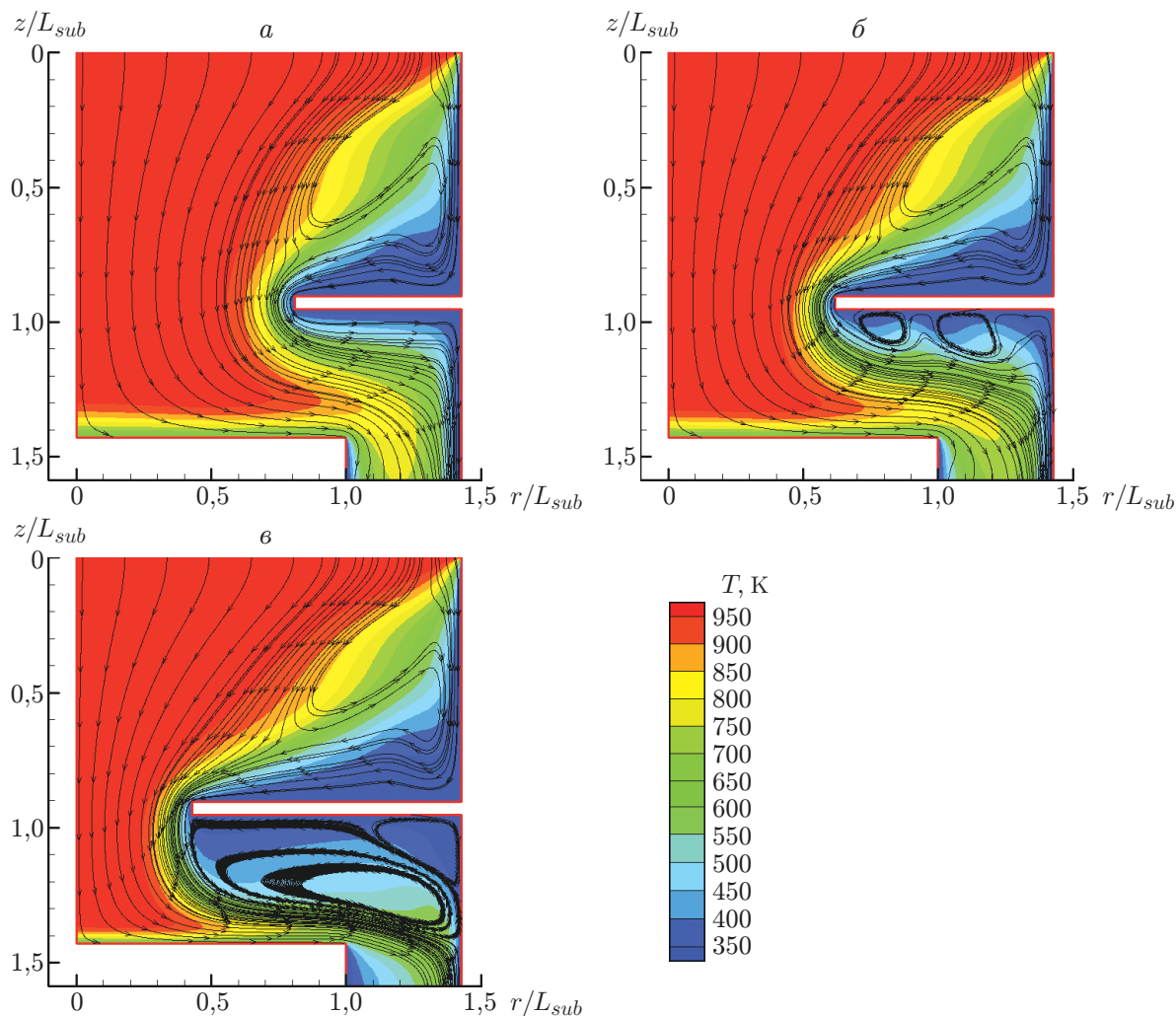


Рис. 7. Распределения линий тока и изотерм при различных значениях L ($H = 0,05$ м, $Re = 50$):
 а — $L = 0,065$ м, б — $L = 0,085$ м, в — $L = 0,105$ м

Например, в случае наличия перегородки длиной $L = 0,115$ м скорость осаждения увеличивается приблизительно в два раза по сравнению со случаем отсутствия перегородки, но при этом существенно увеличивается степень неоднородности. Такая конструкция подложки приводит к чрезмерной концентрации вещества в центральной части подложки и как следствие к увеличению степени неоднородности.

На рис. 7 показаны линии тока и изотермы при различных значениях L . Видно, что под перегородкой формируется зона рециркуляции. С увеличением длины перегородки эта зона постепенно увеличивается, что вызывает формирование “вынужденного течения” и приводит к локализации реагирующего газа в центральной части подложки.

3.4. Влияние наличия отверстий в перегородке. В табл. 4 приведены результаты численного моделирования при наличии в перегородке ($H = 0,05$ м, $L = 0,105$ м) девяти отверстий, при этом исследовалось влияние диаметра отверстия D на скорость осаждения и степень неоднородности.

На рис. 8 показаны линии тока и изотермы при различных диаметрах отверстия. Из приведенных результатов следует, что с увеличением диаметра зона рециркуляции ниже

Таблица 4

Результаты численного моделирования
при различных значениях D ($Re = 50$, $H = 0,05$ м, $L = 0,105$ м)

| D , см | q , % | $m_{dep} \cdot 10^{-5}$, кг/(м·с) | $s \cdot 10^{-10}$ |
|----------|---------|------------------------------------|--------------------|
| 0 | 80,45 | 12,00 | 10,30 |
| 0,1 | 81,76 | 11,20 | 8,45 |
| 0,2 | 83,51 | 9,98 | 6,89 |
| 0,3 | 85,11 | 8,89 | 5,95 |
| 0,4 | 86,24 | 8,13 | 5,39 |
| 0,5 | 87,05 | 7,60 | 4,85 |
| 0,6 | 87,51 | 7,30 | 4,65 |
| 0,7 | 87,93 | 7,03 | 4,77 |
| 0,8 | 88,17 | 6,87 | 4,61 |
| 0,9 | 88,36 | 6,74 | 4,35 |
| 1,0 | 88,53 | 6,62 | 4,02 |

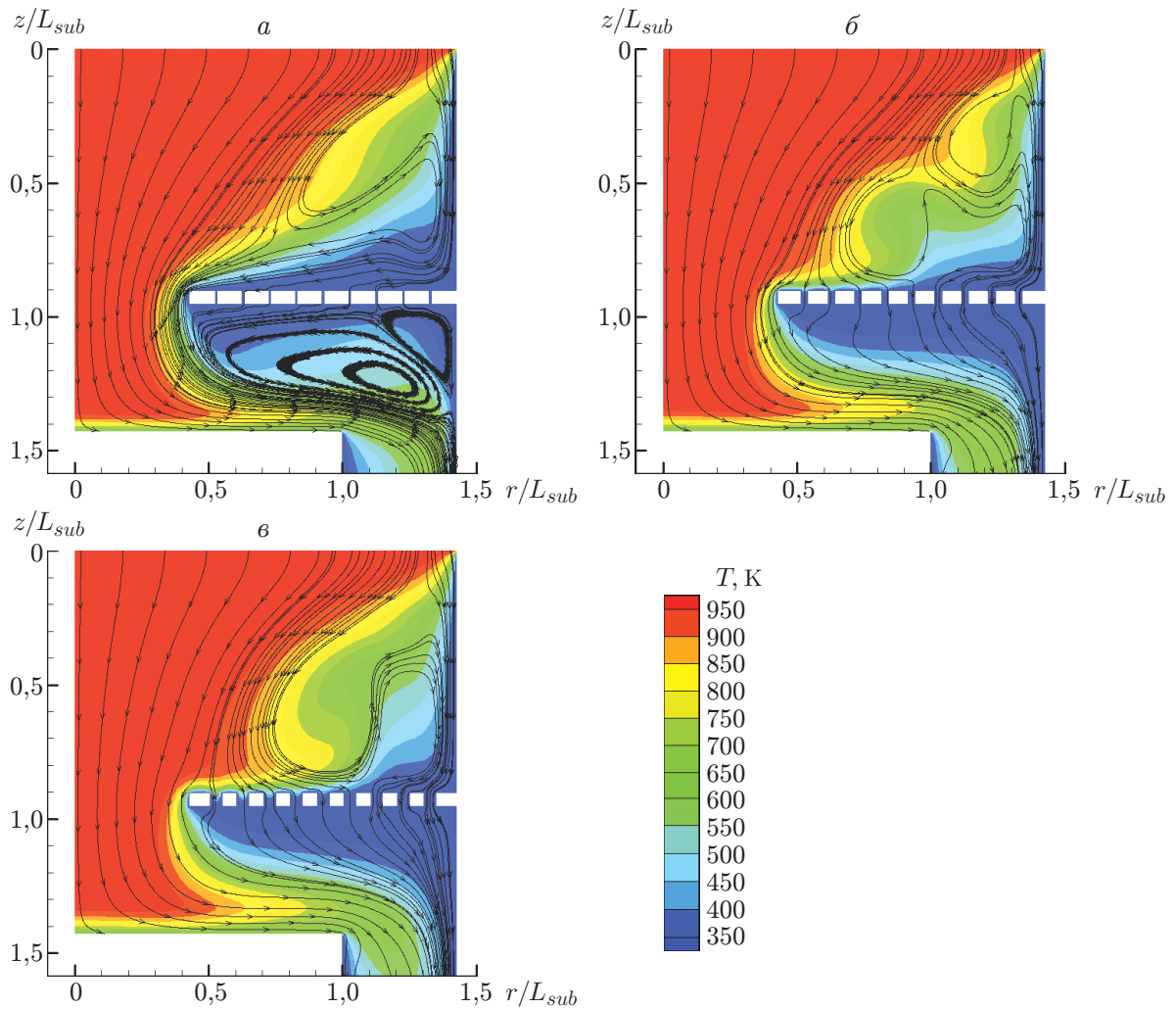


Рис. 8. Распределения линий тока и изотерм при различных значениях D ($H = 0,05$ м, $L = 0,105$ м, $Re = 50$):

a — $D = 0,01$ см, $б$ — $D = 0,03$ см, $в$ — $D = 0,05$ см

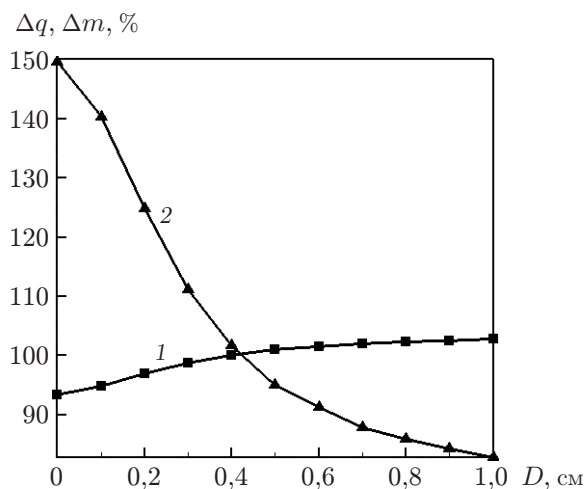


Рис. 9. Зависимости изменения эффективности конверсии (1) и скорости осаждения (2) от диаметра отверстия в случаях наличия и отсутствия пористой перегородки ($Re = 50$, $H = 0,05$ м, $L = 0,105$ м)

перегородки исчезает. Кроме того, при прохождении реагирующего газа через отверстие происходит осаждение на подложке, при этом реагирующий газ не локализуется в центральной части подложки, а степень неоднородности существенно уменьшается.

На рис. 9 показано изменение эффективности конверсии и скорости осаждения в случаях наличия и отсутствия пористой перегородки при различных диаметрах отверстий. При $D = 0,4$ см в обоих случаях получены приблизительно одни и те же результаты, тогда как при других значениях D с увеличением эффективности конверсии скорость осаждения уменьшается, и наоборот. При моделировании температура перегородки считалась постоянной (300 К) и была ниже температуры на входе (1000 К). При наличии отверстий в перегородке на температуру реагирующего газа, проходящего через эти отверстия, в основном влияет температура перегородки. Чем больше диаметр отверстий в перегородке, тем большее количество реагирующего газа проходит через них. В результате температура реагирующего газа на поверхности подложки и скорость осаждения уменьшаются. Иными словами, скорость осаждения и степень однородности могут быть увеличены путем увеличения температуры перегородки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе с использованием методов вычислительной гидромеханики проведено исследование течения в реакционной камере при циклотронно-резонансном плазмохимическом газофазном осаждении алмазоподобной углеродной пленки. При моделировании учитывались уравнения, описывающие механизмы поверхностных химических реакций компонентов газа. Исследовано влияние основных характеристик течения (скорости реагирующего газа на входе) и геометрии реакционной камеры (наличие (отсутствие) перегородки, расстояние от перегородки до подложки, диаметр отверстий в перегородке) на эффективность конверсии, скорость осаждения и степень неоднородности. Полученные результаты численного моделирования могут быть использованы для повышения эффективности процесса получения алмазоподобных пленок.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Aisenberg S., Chabot R.** Ion-beam deposition of thin films of diamondlike carbon // J. Appl. Phys. 1971. V. 42. P. 2953–2958.
2. **Weyburne D. W., Ahern B. S.** Design and operating considerations for a water-cooled close-spaced reactant injector in a production scale MOCVD reactor // J. Crystal Growth. 1997. V. 170. P. 77–82.
3. **Jang J., Moon J. H., Han E. J., Chung S. J.** Advanced PECVD processes for highly electron emitting diamond-like-carbon // Thin Solid Films. 1999. V. 341. P. 196–201.
4. **De A. K., Muralidhar K., Eswaran V., Wadhawan V. K.** Modelling of transport phenomena in a low pressure CVD reactor // J. Crystal Growth. 2004. V. 267. P. 598–612.
5. **Liu Y. C.** Heat and mass transfer modeling for a CVD process in anufacturing TFT-LCD: M. S. Thesis. S. l.: Nat. Sun Yat-Sen Univ., 2006.
6. **Van Santen H., Kleijn C. R., Van Den Akker H. E. A.** On turbulent flows in cold-wall CVD reactors // J. Crystal Growth. 2000. V. 212. P. 299–310.
7. **Van Santen H., Kleijn C. R., Van Den Akker H. E. A.** Symmetry breaking in a stagnation-flow CVD reactor // J. Crystal Growth. 2000. V. 212. P. 311–323.
8. **Chen P. C.** Raman spectroscopy study of diamond like carbon films by combining magnetron sputtering and ECR-CVD deposition: M. S. Thesis. S. l.: Nat. Cheng Kung Univ., 2002.
9. **Malekfar R., Motahari H., Rohollahnejad J., Sahraiyani F.** Raman, dielectric and optical investigations of DLC thin films // Surf. Rev. Lett. 2009. V. 16. P. 731–736.
10. **Fotiadis D. I., Kremer A. M., Jensen K. F.** Complex flow phenomena in vertical MOCVD reactor: effect on deposition uniformity and interface abruptness // J. Crystal Growth. 1987. V. 85. P. 154–164.

*Поступила в редакцию 30/VIII 2012 г.,
в окончательном варианте — 18/I 2013 г.*
