

ODBORNÁ PRAXE Z FYZIKY

Spracoval: Kristína Tomanková

Odbor: N-FYZ

Ročník: II

Semester: I

Stáž v PlasmaSolve s.r.o.

1. Úvod

Počas semestra jaro 2021 som sa zúčastnila na stáži v PlasmaSolve s.r.o. pod vedením doktora Adama Obrusníka. Pracovala som na internom projekte firmy a náplňou mojej práce bolo vytvoriť globálny model výboja v zmesi kyslíka a tetrametyldisiloxanu (TMDSO). Tento model je previazaný s modelom kyslíkového výboja v dutej katóde, ktorý som vytvorila v predchádzajúcom semestri. Tento model je súčasťou skupiny simulácií, ktoré popisujú geometriu a depozičný proces zákazníka.

2. Model a výsledky

Simuláciu som vytvárala za použitia softvérov od firmy PlasmaSolve. Globálny model je 0D model, ktorý pozostáva zo súboru previazaných obyčajných diferenciálnych rovníc. Výsledkom modelu sú spriemerované hodnoty parametrov, ako sú hustoty jednotlivých prvkov alebo teploty.

Celková geometria procesu pozostáva z dvoch častí: duté katódy, v ktorých horí kyslíkový výboj a pripojená depozičná komora, kam vniká kyslík z dutých katód a je pridané TMDSO. V predchádzajúcej časti mojej stáže som vytvorila globálny model kyslíkového výboja v dutej katóde. Teraz vytváram model depozičnej komory s kyslíkom a TMDSO. Tieto modely sú previazané, pretože výstup z globálneho modelu dutej katódy predstavuje vstup do globálneho modelu depozičnej komory.

2.1. Tvorba modelu

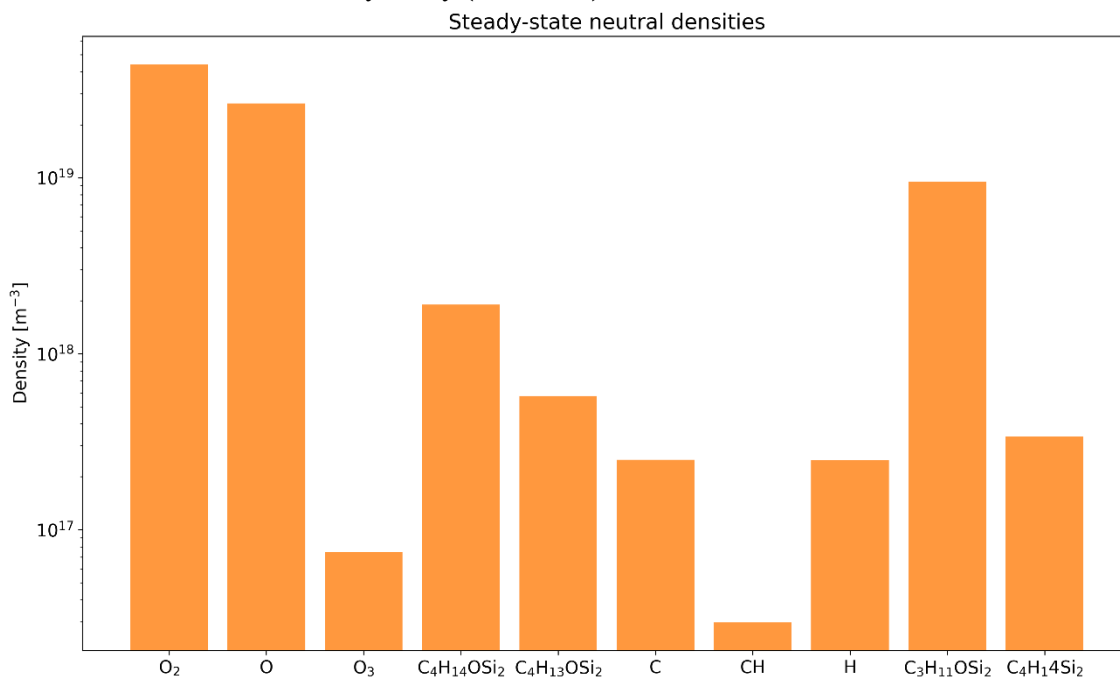
Ako vstup do softvéru bolo potrebné vytvoriť konfiguračný súbor, ktorý obsahoval nasledujúce informácie:

- Zoznam prvkov a ich počiatočné hodnoty – Výboj horel v zmesi O_2 /TMDSO. Prvky, ktoré som uvažovala boli rôzne neutrály, ióny a excitované stavy kyslíka spolu s veľkým množstvom rôznych uhlíkovodíkov, ktoré vznikajú rozbíjaním molekuly TMDSO. V neposlednom rade som uvažovala elektróny. Počiatočné hodnoty týchto prvkov som určila na základe pravdepodobnosti ich výskytu – napr. excitovaných stavov a iónov bude na počiatku, pred zapálením plazmy veľmi málo, naopak neutrálne TMDSO bude mať hustotu spočítanú z prietoku, ktorý je do komory privádzaný. Počiatočné hodnoty kyslíkových prvkov som určila na základe už vypracovaného kyslíkového modelu = vychádzala som z výstupu tohto modelu.
- Entalpie prvkov – Entalpie jednotlivých prvkov som prevzala z literatúry, sú využité v energiovej rovnici pre ťažké častice.
- Konštanty a parametre – Konštanty som prevzala z literatúry. Parametre, ako rozmery komory, napájací výkon a prietok TMDSO mi dodal zákazník. Na tomto mieste som spočítala rôzne zdrojové členy, ktoré boli potrebné do bilančných rovníc, napr. zánik prvkov na stenách, únik prvkov čerpaním, atď.
- Reakcie a procesy – Reakčné schéma kyslíku s TMDSO ($C_4H_{14}OSi_2$) sa nenachádza v literatúre. Našla som reakčné schéma kyslíku s podobnou molekulou, hexametyldisiloxan (HMDSO – $C_6H_{18}OSi_2$). Reakcie základnej molekuly TMDSO mi spočítala tretia strana pomocou ich certifikovaného modelu a zvyšné reakcie zo spomínanej schémy O_2 /HMDSO som analogicky upravila, aby sedeli na TMDSO. Reakčné schéma O_2 /TMDSO je jedným z výstupov tohto projektu.

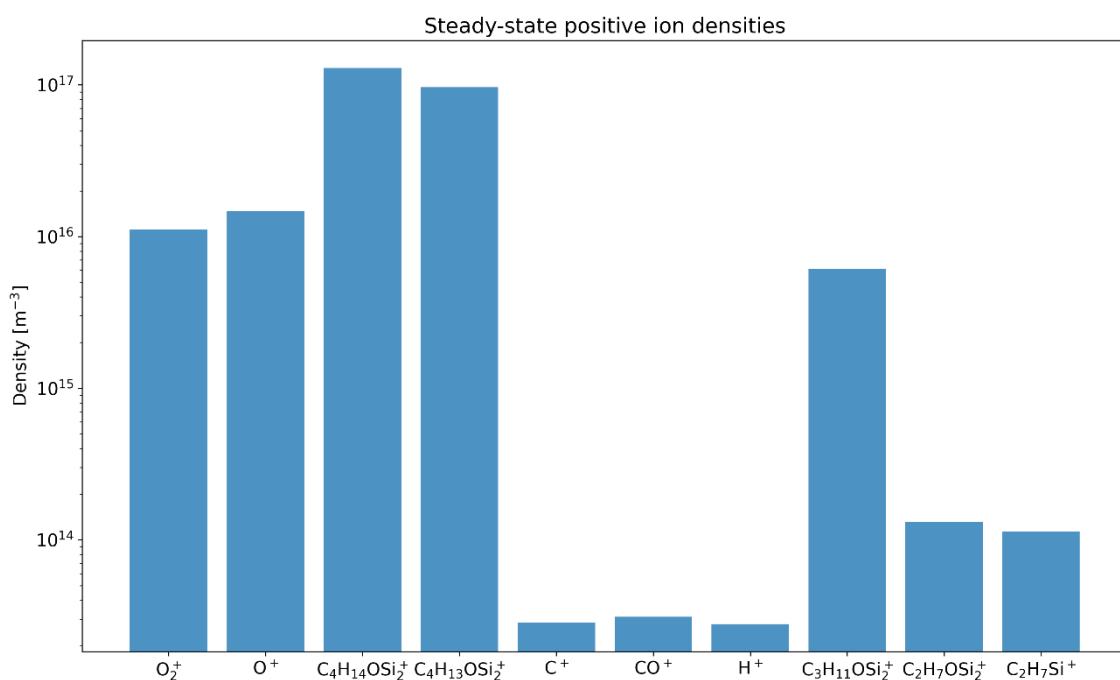
- Rýchlostné konštanty – Rýchlostné konštanty jednotlivých reakcií som buď získala z literatúry vo forme výrazu závislého na teplote alebo som ich spočítala z účinných prierezov, ktoré som získala z internetových databáz alebo mi ich spočítala spomínaná tretia strana.

2.2. Výsledky

Výsledky z modelu som najprv skontrolovala len pocitovo. Pozrela som sa, či niekde hodnoty neuchádzajú mimo fyzikálne možnosti a model je skonvergovaný. Spočiatku som narazila na prípady, kedy boli výsledky nefyzikálne a bolo treba nájsť chyby v modeli. Po dlhom a dôslednom upravovaní som dostala rozumné výsledky (Obr. 1 a 2).

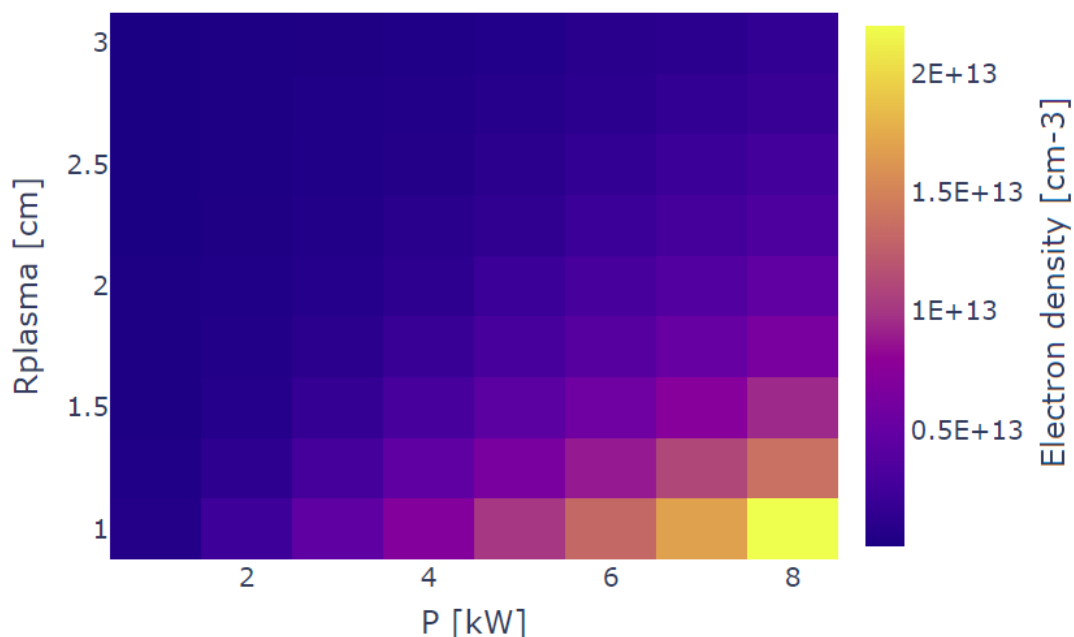


Obr. 1: Ustálené hodnoty hustôt neutrálov.



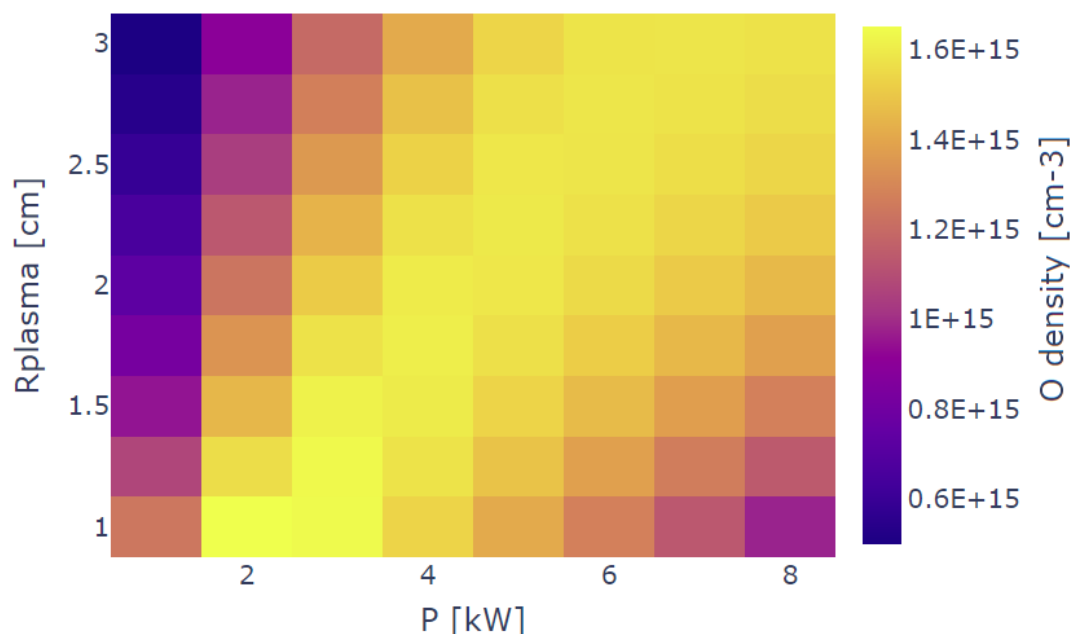
Obr. 2: Ustálené hodnoty hustôt iónov.

Vytvorila som takisto modelové parametrické štúdie, aby som skontrolovala trendy výsledkov (Obr. 3).



Obr. 3: Výsledky parametrickej štúdie k napájaciemu výkonu a rozmerom komory – hustota elektrónov.

V tejto parametrickej štúdii som dostala zaujímavý výsledok pre hustotu atómového kyslíka (Obr. 4). Toto nelineárne správanie môžu vykazovať viaceré premenné a je tu krásne ukázaný nelineárny charakter celého depozičného procesu.

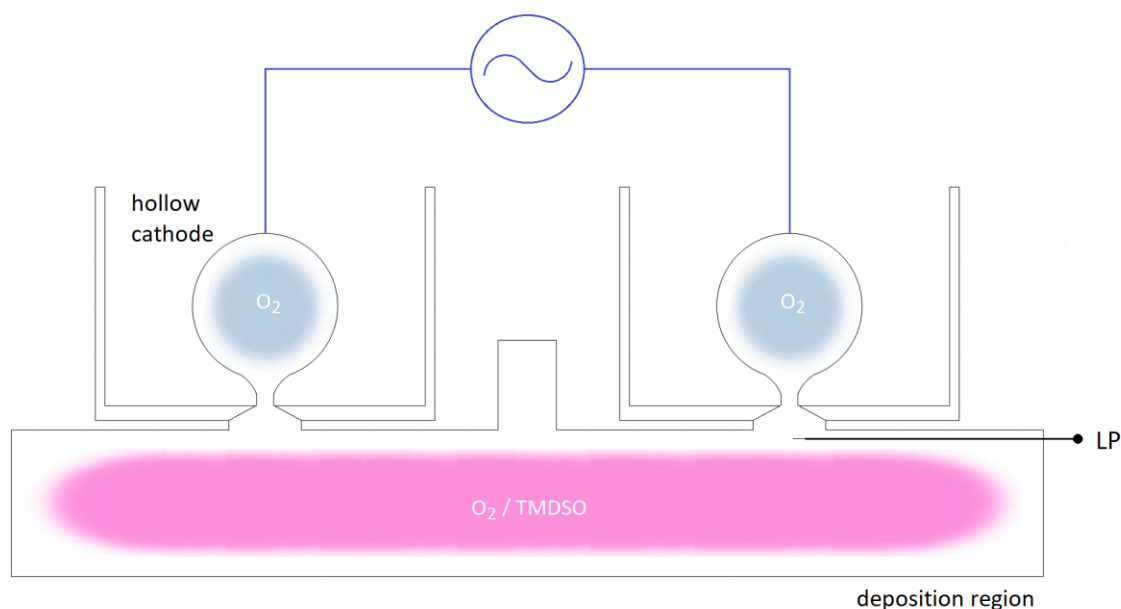


Obr. 4: Výsledky parametrickej štúdie k napájaciemu výkonu a rozmerom komory – hustota atómového kyslíka.

Všetky hodnoty vyzerali realisticky, rovnako aj trendy v parametrických štúdiách, tak som môj model považovala za správny.

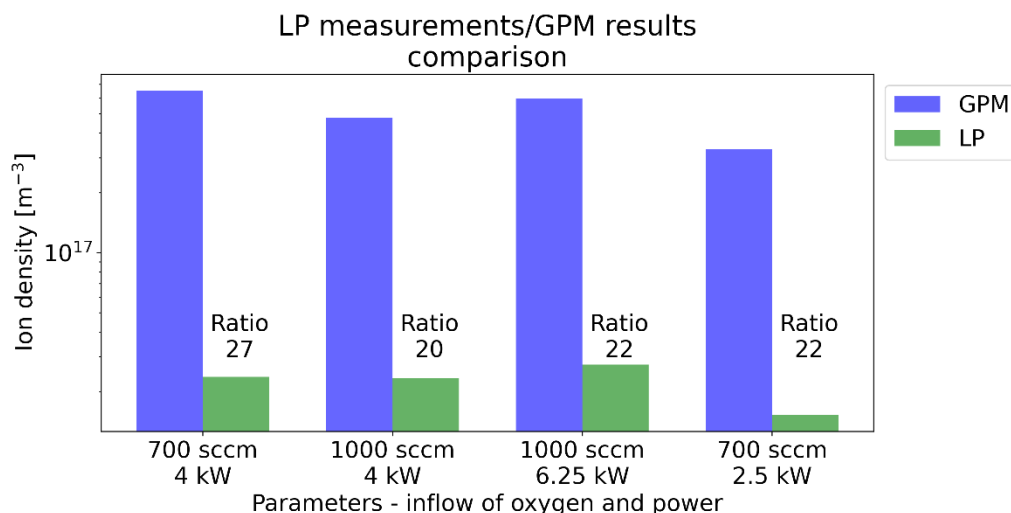
2.3. Porovnanie s meraniami

Zákazník mi poskytol viacero meraní Langmuirovou sondou pri rôznych podmienkach na zariadení obdobnom tomu jeho na porovnanie výsledkov. Upravila som môj model na parametre daného zariadenia (zmenili sa rozmery katód a komory, napájací výkon a prietok plynov). Schéma celej geometrie procesu je na Obr. 5.



Obr. 5: Schéma depozičnej komory (LP = Langmuir Probe).

Merania Langmuirovou sondou boli urobené pod dutou katódou znázornenou na Obr. 5 pozdĺž celej jej dĺžky (v smere kolmo na obrazovku). Namerané hodnoty som spriemerovala a následne porovnávala s výsledkami môjho globálneho modelu. Výsledky merania sondou v porovnaní s mojím modelom vidíme na Obr. 6.



Obr. 6: Porovnanie výsledkov z globálneho modelu a merania Langmuirovou sondou (zobrazujeme hustotu iónov = hustotu plazmy).

Meranie Langmuirovou sondou predstavuje čisto lokálnu diagnostiku plazmy. Ako som spomínala na začiatku, výsledky globálneho modelu sú objemovo spriemerované a to cez celú depozičnú komoru. Tým pádom som čakala rozdiel medzi nameranými a simulovanými hodnotami. Pokiaľ je môj model správny, tak by tento rozdiel mal byť konštantný. Na Obr. 6 vidíme porovnanie výsledkov simulácie a nameraných hodnôt pre 4 rôzne kombinácie parametrov spolu s vyznačenými

pomermi. Pomery týchto hodnôt sú takmer konštantné naprieč meraniami, môžem tak považovať môj model za správny.

Tento model je prepojený s ďalšími modelmi, ktoré kompletne popisujú zákazníkovo proces. Zákazník tak môže využiť sériu simulácií k prispôbeniu svojho procesu na dosiahnutie požadovaných výsledkov.