МИНОБРНАУКИ РОССИИ ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ

ИНСТИТУТ ТЕПЛОФИЗИКИ им. С.С. КУТАТЕЛАДЗЕ

СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИТ СО РАН)

проспект Академика Лаврентьева, 1 г. Новосибирск, 630090 Тел.: (383)330-90-40; 330-84-80; факс 330-84-80 Эл. почта: director@itp.nsc.ru

ИНН/КПП 5408100040/540801001 ОКПО 03534009 ОГРН 1025403648786 УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук член-корреспондент РАН

_Д.М. Маркович

октября 2018 г.

OT <u>06: 12: 2018</u> № 15314<u>-01/518</u>

На _____ от ____

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу Ляхова Анатолия Александровича «Моделирование кинетических процессов в аргон-силановой высокочастотной плазме пониженного давления», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 — «Механика жидкости, газа и плазмы».

Для производства возобновляемых источников энергии на основе фотоэлектрических преобразователей большое значение имеют технологичные способы получения тонких пленок гидрогенизированного аморфного (a-Si:H) и микрокристаллического (µс-Si) кремния. Эксплуатационные характеристики стоимость солнечных батарей напрямую зависят от показателей эффективности процесса осаждения тонкопленочного материала. Среди различных способов получения кремниевых пленок метод плазмохимического осаждения сохраняет за собой позиции способа, позволяющего получать высококачественные пленки. Совершенствование плазмохимических систем осаждения слоев a-Si:Н и µс-Si тонких кремниевых пленок, масштабирование их до установок промышленного уровня предполагает поиск комбинаций газоразрядных параметров (давление, вкладываемая мощность, стехиометрия исходной смеси и др.), которые обеспечивают оптимальный рост пленок. Многообразие каналов трансформации подводимой энергии, химическая активность и полимеризация газа, делают силановую плазму сложным объектом для Поэтому важную экспериментального изучения. роль при плазмохимических систем играют методы математического моделирования, которые позволяют вести параметрический поиск оптимальных режимов работы устройств осаждения по разным критериям. Отдельной областью исследований является изучение процессов формирования и эволюции пылевых частиц в плазме силансодержащих газов. В прикладном аспекте пылевые макрочастицы ухудшают качество осаждаемых покрытий, и, кроме этого, пыль изменяет и многие свойства самой плазмы. В этом смысле учет пылевой компоненты при описании рабочей среды в плазмохимическом процессе является немаловажным. Представленная работа диссертанта, в которой физико-химических процессов, протекающих выполнено моделирование газоразрядной аргон-силановой плазме, является актуальной, т.к.

Во-первых, её результаты непосредственно направлены на оптимизацию плазмохимического способа осаждения пленок кремния, востребованных в производстве возобновляемых источников энергии.

Во-вторых, в ней (в части исследования кинетики электронов) рассматриваются вопросы, примыкающие к проблематике пылевой плазмы — направления, которое интенсивно разрабатывается в настоящее время, является актуальной и своевременной.

В ходе выполнения диссертационной работы для достижения поставленной цели был решен ряд важных задач:

определение функции распределения электронов по энергии (ФРЭЭ) для плазмы силансодержащих смесей при наличии пылевых частиц;

расчет электронных кинетических коэффициентов для ВЧ плазмы аргона, гелия и Ar+SiH₄ с учетом частиц пыли;

разработка модели переноса нейтральных частиц химически-активной плазмы в диффузионном приближении и расчет химического состава силановой плазмы для условий соответствующих осаждению пленок аморфного и микрокристаллического кремния;

установление основных механизмов плазмохимического разложения моносилана в BЧ-плазме путем численного анализа кинетически химических реакций, протекающих в плазме Ar+SiH4.

Для каждого из рассмотренных вопросов получены новые и научно-значимые результаты.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, выводов, приложения, списка использованной литературы с общим объемом 129 страниц, содержит 32 иллюстрации и 3 таблиц.

В первой главе рассмотрены основные разновидности плазмохимических систем осаждения пленок аморфного и микрокристаллического кремния. Обосновывается важность методов моделирования при прототипировании систем осаждения. Дана характеристика общих принципов математического моделирования плазменных сред. В главе также проведен анализ теоретических и экспериментальных работ, в которых исследовались пылевые частицы в силановой плазме.

Вторая глава носит методический характер и содержит теоретические положения, которые положены в основу описания подсистем газового разряда. Автор большое внимание уделил формулировке уравнения Больцмана в двучленном приближении, которое чаще всего привлекается для описания кинетики электронов неравновесной плазмы.

В третье главе представлены результаты численного исследования кинетики электронов в слабоионизованной плазме, содержащей пылевые частицы. Акцент сделан на определении влияния пылевой компоненты на электронные транспортные коэффициенты в плазме инертных газов и аргон-силановой смеси.

В **четвертой главе** сформулирована модель переноса многокомпонентного реагирующего газа и на её основе выполнены расчеты химического состава плазмы Ar+SiH₄, а также проанализирована химическая кинетика продуктов разложения моносилана.

В Заключении приведены основные результаты работы. Список цитируемой литературы (177 наименований) содержит обширную и достаточную библиографию по всем вопросам, рассмотренным в диссертации.

Новизна исследования, научная значимость полученных результатов, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации.

Предложено влияние монодисперсных пылевых частиц на кинетику электронов в слабоионизованной плазме характеризовать одним комбинированным параметром радиуса и концентрации частиц. В широком диапазоне значений приведенного поля определены значения коэффициентов переноса электронов в пылевой плазме аргона, гелия и в смеси Ar+SiH4. Установлено, что коэффициенты диффузии и подвижности электронов в аргоновой плазме при добавлении пыли существенно увеличиваются в области малых значений приведенного поля. Определено значение параметра пылесодержания, начиная с которых влияние пылевых частиц на кинетику электронов становится существенным в аргон-силановой плазме. На основе модели диффузионного переноса многокомпонентного химически-активного газа для аргонсилановой плазмы проведен численный анализ кинетики химических реакций, ответственных за синтез пленкообразующих радикалов.

Практическая значимость полученных автором результатов.

Рассчитанные зависимости коэффициентов переноса электронов от приведенного поля в аргон-силановой плазме, содержащей частицы пыли субмикронного размера, могут использоваться в качестве параметров при разработке более полных гидродинамических моделей газового разряда. Результаты моделирования кинетики нейтралов аргон-силановой плазмы могут быть использованы при оптимизации режимов получения пленок аморфного кремния струйным плазмохимическим способом, где рабочим газом являются кремневодороды. Ппоказано что, во-первых, для заданных размеров реактора существует предельное время пребывание газа в активной зоне, когда влияние процессов полимеризации на кинетику пленкообразущих радикалов еще не существенно, во-вторых, в синтезе радикала SiH₃ большую роль играет атомарный водород.

Достоверность

Достоверность результатов, полученных в работе, обеспечена использованием проверенных и опубликованных данных по сечениям рассеяния электронов и констант скоростей химических реакций, применением стандартных подпрограмм при реализации вычислительных алгоритмов, верификацией численных алгоритмов путем сравнения с результатами, полученными другими авторами.

Оценка содержания диссертации, ее завершенности

В рамках представленного исследования решена прикладная научно-техническая проблема количественного описания компонентного состава силансодержащей плазмы, связанная с совершенствованием технологии плазмохимического осаждения тонкопленочных покрытий на основе аморфного кремния.

Диссертация является завершенным научным исследованием и содержит решение всех поставленных задач. Содержание диссертации полностью соответствует паспорту специальности01.02.05 — «Механика жидкости, газа и плазмы»

Основные положения работы с необходимой полнотой представлены в научных публикациях, в том числе 9 статей в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК, 2 свидетельства о регистрации программ для ЭВМ, 1 монография, 14 статей в других изданиях. Результаты исследования докладывались на научных конференциях.

О необходимом уровне освещения полученных научных результатов в печати свидетельствует список публикаций. Опубликованные работы соответствуют тематике, основным положениям и выводам диссертационной работы.

Качество оформления диссертации высокое. По каждой главе сформулированы содержательные выводы, что облегчает понимание и анализ материала. Автореферат полностью и правильно отражает содержание диссертации.

Замечания по диссертационной работе:

- 1. Из текста работы неясно учитывалось ли каким-то образом в диффузионнореакционной модели переноса нейтралов наличие пылевых частиц в объеме разряда. Связь расчетов кинетики электронов из третьей главы с моделью четвертой главы раскрыта не в полной мере.
- 2. В четвертой главе нет указаний о верификации вычислительного алгоритма, разработанного автором.
- 3. Автор для выбранного режима работы реактора, обосновывает возможность пренебрежения конвективным движением среды, но не дает оценки применимости гидродинамического приближения (по числу Кнудсена). Вместе с тем моделируется работа реактора при достаточно низком давлении (p=0,1 мм.рт.стб.)

Указанные замечания не снижают общей положительной характеристики работы.

Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней

На основании вышеизложенного можно сделать вывод о том, что диссертация А.А. Ляхова является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задач, имеющих существенное значение для дальнейшего развития газовых разрядов, которые применяются для осаждения кремниевых пленок.

На основании изложенного считаем, что диссертация А.А. Ляхова, практическая значимость полученный в ней результатов, их актуальность и новизна соответствуют требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Автор работы, Ляхов Анатолий Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.05 «Механика жидкости, газа и плазмы».

Отзыв на диссертацию А.А.Ляхова обсужден и одобрен на расширенном научном семинаре лаборатории экологических проблем теплоэнергетики Института теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН в качестве отзыва ведущей организации (протокол № 7.1/3-2018 от 29 октября 2018 г.).

Доктор технических наук, профессор ______ Аньшаков А.С.

Аньшаков Анатолий Степанович,

доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории экологических проблем теплоэнергетики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук (ИТ СО РАН).

Почтовый адрес: г. Новосибирск, 630090, проспект Академика Лаврентьева, д. 1.

Телефон: 8 (383) 330-80-92, адрес электронной почты: anshakov@itp.nsc.ru.

Сайт ИТ СО РАН: http://www.itp.nsc.ru

Подпись А.С. Аньшакова заверяю:

Ученый секретарь ИТ СО РАН

к.ф.-м.н.

М.С. Макаров

«29» <u>октября</u> 2018 г.