

О Т З Ы В

официального оппонента 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».

В настоящее время низкотемпературная плазма молекулярных газов активно исследуется преимущественно с прикладных позиций. Возможность создания «горячей» электронной подсистемы при низких поступательных температурах рабочего газа, сочетаемость механического, электрического и теплового воздействия на вещество, высокая скорость протекания плазменных процессов, компактность конструктивного оформления установок – все эти факторы определяют обширные применения плазменных технологий в задачах синтеза перспективных материалов, переработки углеводородов, обработки поверхностей, химико-металлургических процессах и т.д. В частности, большое распространение получил метод плазмохимического осаждения из газовой фазы, с помощью которого производят напыление тонкопленочных покрытий, востребованных в электронике. Разработка плазмохимических систем требует исчерпывающих сведений о свойствах плазмы в целом, так и об отдельных протекающих в ней процессах. В то же время сложность такого рода физических сред, вызванная наличием взаимодействующих друг с другом и разномасштабных по времени подсистем, делает задачу адекватного количественного описания плазменного процесса очень сложной. По этой причине обращаются к различным вычислительным моделям плазмы, с помощью которых можно выполнять прогнозирование процессов в плазме. Особое значение методы моделирования приобретают на этапе оптимизации конкретного плазмохимического способа. На этой стадии обычно уже ясны общие закономерности изучаемой среды, и требуется осуществить поиск значений параметров, обеспечивающих экстремальность тех или иных характеристик процесса (скорость осаждения, степень конверсии рабочего газа, КПД и т.д.). Получение искомой информации в необходимом объеме из натурных экспериментов может быть трудоемко. Кроме этого применение экспериментальных диагностических методов часто осложняется высокой химической активностью плазмы. Поэтому разработка моделей таких сред в прикладном отношении представляет собой актуальную задачу.

Диссертационная работа Ляхова Анатолия Александровича посвящена моделированию процессов в аргон-силановой плазме. В ней проведены расчеты электронной кинетики и процессов диффузионного переноса нейтральных частиц плазмообразующей смеси $\text{Ar}+\text{SiH}_4$. Таким образом, **актуальность работы** связана с прикладным характером объекта изучения – исследуемая среда часто применяется для осаждения пленок аморфного кремния, которые в свою очередь применяются при изготовлении солнечных батарей, фото- и термосенсоров, а также используются в интегральной микроэлектронной технологии. Помимо того, что силановая плазма является химически-активной средой и ей свойственны все характеристики присущие слабоионизованной плазме молекулярного газа, в ней происходит формирование мелкодисперсных частиц, обусловленное полимеризацией рабочего газа. Несмотря на то, что процессы в силановой плазме исследуются на протяжении последних 30 лет, в вопросах формирования и динамики мелкодисперсных частиц конденсированной фазы в силаносодержащей плазме до конца нет ясности. Поэтому к настоящему моменту времени

отсутствуют пока и математические модели, в которых бы самосогласованным образом прослеживалась бы эволюция дисперсных частиц от формирования нанометровых кластеров до образования частиц микронного размера. С другой стороны неизбежное присутствие этих частиц в газоразрядном объеме закономерным образом ставит вопрос об их влиянии на свойства плазмы и показатели плазмохимического процесса. С этой точки зрения моделирование аргон-силановой плазмы, выполненное в работе А.А. Ляхова, в рамках которой при расчете параметров электронной подсистемы модельным образом учитывается наличие дисперсной фазы, следует считать первым приближением на пути к построению более полных моделей и отчасти позволяет ответить на сформулированный выше вопрос.

Новизной обладают следующие результаты:

- 1) Результаты расчета функции распределения электронов по энергии и кинетические коэффициенты электронов в аргон-силановой плазме с учетом частиц конденсированной дисперсной фазы (КДФ) в широком диапазоне значений приведенного поля.
- 2) Установлена закономерность повышения коэффициента диффузии в плазме аргона, содержащей частицы КДФ по сравнению с чистой плазмой в области малых значений приведенного поля.

Значимость результатов, заключается в том, что значения коэффициентов переноса электронов, констант скоростей реакций электронного удара позволяют более точно описать кинетические процессы с участием электронов в слабоионизованной плазме инертных газов (аргон, гелий) и аргон-силановой смеси в присутствии частиц КДФ. Эти коэффициенты, полученные в достаточно широком диапазоне приведенного поля, могут быть применены при формулировке уравнений движения электронов и переноса их энергии в составе гидродинамических моделей газового разряда с пылевыми частицами.

Проведенное моделирование химической кинетики продуктов разложения силана дает представление о механизмах плазмохимического разложения силана. Установлены временные границы преобладающего влияния плазменных электронов и высокомолекулярных соединений кремния на кинетику силановых радикалов. Эти результаты могут быть использованы при оптимизации плазмохимического осаждения пленок кремния.

Достоверность и обоснованность результатов

При решении задачи о кинетике электронов автор использовал достоверные сечения рассеяния электронов из международной базы данных элементарных процессов. Алгоритм решения уравнения Больцмана автор сравнивал с результатами, даваемым кодом BOLSIG. В качестве исходных данных для моделирования процессов диффузионного переноса в аргон-силановой плазме привлекались параметры потенциала Леннарда-Джонса, а также константы скоростей химических реакций для компонентов, включенных в модель. Эти данные заимствованы автором из надежных литературных источников. При реализации алгоритма решения уравнения диффузии автор опирался на хорошо разработанный аппарат теории разностных схем и использовал стандартные вычислительные методы при решении дискретных уравнений.

Структура работы и краткий анализ содержания глав.

Диссертация общим объемом 129 страниц состоит из введения, четырех глав основного текста, заключения, списка литературы, состоящего из 177 литературных источников и одного приложения.

Во **введении** обосновывается актуальность темы исследования, формулируется цель и задачи работы, указаны защищаемые положения и новизна, обозначено содержание глав.

Первая глава представляет обзор по теме исследования. Дано описание систем осаждения пленок кремния и обсуждаются их особенности. Подчеркивается важность методов моделирования, перечислены основные подходы к моделированию низкотемпературной плазмы, кратко обсуждаются модели разрядов в силановой смеси. Автор проанализировал несколько работ посвященных зондовым измерениям в силановой плазме, а также работы, в которых выполнялись расчеты распределения электронов. Часть материала первой главы связана с анализом работ, в которых изучались вопросы формирования дисперсной фазы в силановой плазме.

Вторая глава содержит изложение теоретических сведений, составляющих аппарат для исследования плазменных процессов. Приводится формулировка кинетического уравнения Больцмана для электронов в двучленном приближении, при этом в уравнении пренебрегается пространственными градиентами. Далее рассматривается система соотношений, определяющих простейшую гидродинамическую модель тлеющего разряда. В конце главы автор обсуждает имеющиеся литературные данные о сечениях столкновения электронов с молекулами силана.

В **третьей главе** решается задача об определении функции распределения электронов по энергии в неравновесной плазме, содержащей частицы конденсированной дисперсной фазы. Используется метод численного решения кинетического уравнения Больцмана, в которое включены дополнительно процессы упругого и неупругого взаимодействия электронов с макрочастицами. В главе анализируется влияние, которое частицы КДФ оказывают на энергетический спектр электронов, а также на их кинетические коэффициенты при учете их в кинетическом уравнении. Для рассмотренных газовых составов (аргон, гелий, $Ar+SiH_4$) обнаружено, что наибольшему влиянию подвергаются коэффициенты переноса электронов и константы скоростей электронного удара.

Четвертая глава содержит исследование диффузионной кинетики нейтральных компонентов аргон-силановой плазмы. Дана математическая постановка задачи и методом конечных разностей получены конечномерные аппроксимации исходного уравнения и граничных условий. Автор конкретизирует внешние параметры путем выбора условий соответствующих разложению силана в высокочастотной плазме. При выбранном рабочем давлении и размерах плазмохимического реактора соискатель обосновывает возможность применения диффузионного приближения для поставленной задачи. Далее приводятся результаты моделирования – зависимости концентраций компонентов плазмы $Ar+SiH_4$ от времени и пространственных координат. При этом значительный акцент в исследовании сделан на анализе кинетики отдельных химических реакций, определяющих формирование и гибель продуктов плазмохимического процесса.

В **заключении** формулируются выводы работы.

Замечания.

- 1) Заявленная научная новизна в п.4 является спорной.
- 2) В четвертой главе нет пояснений, каким образом (вычислительный алгоритм) получены парциальные вклады отдельных реакций в каналах образования и гибели реагентов.

- 3) В тексте автореферата при изложении содержимого третьей главы работы не приведено выражения для кинетического уравнения Больцмана и расчетных формул для кинетических коэффициентов.
- 4) В таблице, приведенной в автореферате, не указаны значения коэффициентов скоростей реакций. Автор ни разу не упоминает о программировании и трудностях учета разных процессов, отличающихся по их вкладу до 10 порядков величины.
- 5) В тексте диссертации и в автореферате присутствуют недочеты в оформлении – встречаются переносы размерностей во внутритекстовых математических выражениях.

Несмотря на приведенные замечания, в целом работу оцениваю положительным образом. Содержание автореферата отвечает поставленным во введении решаемым задачам.

Заключение

Представленная диссертационная работа содержит решение прикладной научно-технической проблемы описания диффузионной кинетики силансодержащей плазмы с учетом неравновесности электронного газа и тесно связанной с совершенствованием технологии плазмохимического осаждения пленок аморфного кремния. Научный уровень исследования, практическая значимость результатов, и их 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».

Официальный оппонент,
Начальник управления информационной
политики и работы с выпускниками
ФГБОУ ВО «Томский государственный
архитектурно-строительный университет»
кандидат физ.-мат. наук,
телефон: +7 3822-65-09-24
E-mail: info@tsuab.ru

Ижойкин
Дмитрий
Александрович

Сведения об организации: 634003, г. Томск, пл. Соляная, 2, ФГБОУ ВО «Томский государственный архитектурно-строительный университет»

Подпись Ижойкина Д.А. удостоверено
И.о. проректора по научной работе
кандидат технических наук



Юрьев Иван Юрьевич

« 06 » 12 2018 г.