УДК 621:389; 621.3.01

ФИЗИКО-ТОПОЛОГИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНДУКЦИОННОГО ИСПАРИТЕЛЯ МЕТАЛЛОВ¹

Цибульский Л.Ю.

Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт», г. Киев, Украина, e-mail: senti-ki@ukr.net

PHYSICAL-TOPOLOGICAL MODELING TECHNIQUES OF METALS INDUCTION EVAPORATOR

Tsybulsky L.

National Technical University of Ukraine «Kiev polytechnic institute», Kyiv, Ukraine, e-mail: senti-ki@ukr.net

Введение

Моделирование индукционных испарителей (ИИ) с целью расчёта в дальнейшем их характеристик и параметров вполне новая и перспективная научная и инженерная задача. Эти устройства применяются для получения паровых потоков в вакууме и в газовой среде при давлении вплоть до атмосферного. Испарение может осуществляться без генерации электронов, ионов и плазмы, или реализовать процесс с генерацией заряженных частиц и плазмы. Индукционные испарители пригодны для испарения разнообразных материалов с целью осаждения тонких пленок, получения метаматериалов и веществ в форме наноразмерных частиц, фуллеренов и нанотрубок.

Среди многочисленных моделей и методов моделирования [1, 2] наиболее перспективным для приборов является физико-топологическое моделирование с использованием численных расчётов по конечноразностным сеткам. В известных источниках отсутствует системная информация по конструированию ИИ и их моделированию в отличие от индукционных систем для закалки, сварки, пайки и плавления металлов.

Физико-топологическая модель устройства определяется конструкцией устройства и задачами моделирования, которые весьма разнообразны. Работа любого устройства и, в особенности, радиоэлектронных устройств, основана на преобразовании энергии, состояния, форм и информации. Алгоритм таких преобразований в каждом устройстве индивидуальный. Это определяет необходимость постановки задачи моделирования каждого устройства, делая обобщённые модели физических процессов малоприменимыми для инженеров и исследователей.

¹ http://radap.kpi.ua/radiotechnique/article/view/1160

Для облегчения моделирования и повышения точности расчётов разработаны сотни компьютерных инженерных прикладных пакетов. Лидерами рынка таких услуг являются ANSYS (США) и COMSOL (Швеция). Существенным ограничением их применения является высокая цена. Но основным ограничением выступает отсутствие научных методик физикотопологического моделирования устройств, а не отдельных процессов.

Целью работы является разработка методики физико-топологического моделирования ИИ.

О проблеме моделирования радиоэлектронных устройств

Модели, позволяющие рассчитывать в различных элементах устройств взаимозависимые распределёние характеристики на основе физических законов, получили название – физико-топологические модели [3]. Топология моделей определяется конструкцией прибора или устройства и может быть последовательной либо разветвлённой. Этапами расчёта являются отдельные задачи, в рамках которых по физическим законам с учётом граничных и начальных условий для этой задачи определяют поля физической величины. Расчёт физических характеристик ведётся в строго определённой области, обычно это элемент (деталь) устройства. Для каждой области определяются физические процессы, и соответствующие им математические выражения, а также начальные и граничные условия. Отображают такие поля при помощи цветовых или тоновых (монохромных) карт. Анализируя карты полей, определяют промежуточные и результирующие параметры устройства. Промежуточный параметр передаётся в расчёт последующей в иерархии задаче в качестве начального или граничного условия. Параметром может быть точка либо интегральная характеристика линии, область карты или объём пространства.

Для расчётов полей используется конечно-разностный метод, разработанный и внедрённый в инженерные прикладные компьютерные пакеты [2, 3]. Но даже если удаётся задействовать хорошие вычислительные средства, возникает проблема с оптимизацией устройства, выбором приоритета параметров, с обработкой результатов.

Анализ проблем моделирования устройств позволяет утверждать, что разработка физико-топологических моделей устройств является сложной инженерной, а порой и научной задачей.

Структура физико-топологической модели индукционного испарителя и факторы её определяющие

Структура физико-топологической модели ИИ показана на рис. 1. Линии моделируют передачу данных от одних этапов решаемой задачи к последующим в иерархии. Стрелкой обозначены шаги изменения начальных данных в итерации расчётов. Разной формы геометрические фигуры в модели обозначают различные этапы моделирования испарителя, среди которых отправной точкой является материал, предназначенный для испаре-

108

ния.

Температура испарения материалов зависит от рода материала и заданной скорости испарения. При осаждении плёнок, например, для металлизации микросхем, используют чистый алюминий, испаряемый при температуре 1480 К. Такая температура определяется технологией, выдвигающей требования по скорости испарения материала загрузки. Второй фактор – длительность процесса, определяющая размер тигля с испаряемой загрузкой. Третий – свойства загрузки при температуре испарения: жидкость или твёрдое тело, метал или диэлектрик. Эти факторы определяют начальную конструкцию испарителя, варианты которой показаны на рис. 2. Каждая из этих конструкций характеризуется уникальными физическими процессами теплообмена, что качественно меняет подходы к описанию и исследованию устройства.

От количества витков индуктора существенно зависят все параметры ИИ: импеданс, напряжённости магнитного и электрического полей, энергетический кпд, устойчивость в работе и др. Поэтому можно рассматривать количество витков как первый конструктивный параметр ИИ.



Конструкции ИИ могут быть следующие:

- диэлектрический тигель с металлической загрузкой (рис. 2,а), используется в случае химической активности загрузки к материалу тигля;

- электропроводящий тигель (металлический или графитовый) с металлической загрузкой;

- электропроводящий тигель с диэлектрической загрузкой;

- диэлектрический тигель с диэлектрической загрузкой нагреваемые от терморезистивной вставки (рис. 2.2,б);

- сублимирующая загрузка в электропроводящем тигле (рис. 2.,в).

Сублимирующие материалы (Cr, Mg, графит) нагреваются в основном излучением с поверхности тигля. Для расчётов такие материалы моделируют в виде гранул одинакового или разного размера. Процессы теплопередачи в таких системах моделируют как сложный теплообмен с теплопередачей за счёт теплопроводности и излучения, а мера теплообмена регулируется эмпирическими коэффициентами.



Рис. 2. Варианты конструкций индукционных испарителей и их параметры: 1 – загрузка, 2 – тигель, 3 – индуктор, 4 – резистивный акцептор, 5 – экран; $D_{\rm H}$ – диаметр индуктора; $D_{\rm T}$ – диаметр тигля; $D_{\rm H}$ – диаметр загрузки; $h_{\rm T}$ – высота тигля; $h_{\rm H}$ – высота загрузки; $h_{\rm CT}$ – высота стенки; $h_{\rm CM}$ – смещение индуктора; d – диаметр проводника; L – высота индуктора; a – шаг индуктора

Предложенная физико-топологическая модель позволяет оптимиконструкцию зировать ИИ. Для этого определяют зависимость эффективности преобразования энергии электрической источника энергию В нейтральных частиц И энергию ионов парового потока от конструкции и физических свойств элементов ИИ, частоты тока индуктора. Также модель позволяет установить влияние конструкции ИИ на направленность парового потока и способы, позволяющие предотвратить вытекание расплава загрузки из тигля.

Следующим параметры модели – это потенци-

алы, задаваемые на компонентах ИИ, частота тока и мощность, подводимая к индуктору. Структура факторов, влияющих на конструкцию ИИ в виде ограничений, отражена на рис. 3.



Рис.3. Схема, поясняющая методику определения конструкции индукционного испарителя

Перед расчётами необходимо определить все начальные данные:

1) размеры тигля и загрузки, размеры и количество витков индуктора и другие параметры, приведенные на рис. 2,г;

2) физические свойства всех материалов, в окрестности температуры испарения загрузки: плотность, удельную электропроводность, магнитную проницаемость и ее зависимость от напряженности магнитного поля в случае нагрева магнитной загрузки, теплоёмкость, теплопроводность, степени черноты всех материалов, коэффициент тепловых потерь при испарении с поверхности загрузки и тигля, скорость испарения и коэффициент термоэлектронной эмиссии;

3) частоту тока и начальное напряжение индуктора.

На практике подавляющее число процессов испарения используются в стационарном режиме. Поэтому остановимся рассмотрением модели для стационарной задачи.

Для определения температурного поля в тигле с загрузкой необходимо итерационно решать две сложные сопряжённые задач:

1. Определение распределённых параметров электромагнитного поля, индуцированного ВЧ токами индуктора, и токов в элементах испарителя, индуцированных электромагнитным полем – прямая задача. Задача решается по уравнениям Максвелла для электромагнитного поля, возбужденного токами индуктора и других проводников [1, 2].

2. Определение токов в тигле и загрузке испарителя, необходимых для нагрева её до заданной температуры – обратная задача. Для расчёта используется уравнение теплопроводности [4].

Все компоненты ИИ имеют осевую симметрию, и модель устройства может быть создана с осевой симметрией с приемлемой точностью анализа.

В табл.1 приведены компоненты физико-топологической модели ИИ с систематизацией параметров по физическим процессам.

N⁰	Физический процесс	Результат передавае- мый в следующую за- дачу	Регулируемый параметр ИИ
1	Индукция то- ками ВЧ	электромагнитное по- ле, поле токов	число витков индуктора, частота тока, напряже- ние индуктора
2	Нагрев за- грузки и тигля	температура поверх- ности испарения	положение тигля в ин- дукторе
3	Испарение из тигля	направленность, и ин- тенсивность потока испарённых частиц	диаметр загрузки, высота стенки тигля
4	Эмиссия элек- тронов	ток термоэмиссии	потенциал тигля
5	Ионизация пара	степень ионизации, ток ионов	частота тока, напряже- ние индуктора

Таблица 1. Декомпозиция модели ИИ по физическим процессам

Для корректировки результатов под техническое задание изменяют регулируемые параметры ИИ. В табл.1 отражено их регулирующее влияние на физические процессы.

Для расчётов предлагается следующая иерархия изменения физических параметров:

- температура испаряющих поверхностей, определяемая теплофизическими свойствами материала загрузки и требуемой интенсивностью парового потока;

- частота тока индуктора, которая не может изменяться произвольно и выбирается из ряда разрешённых для применения в промышленности частот;

- напряжение на индукторе, при заданной частоте, обеспечивает токи, нагревающие загрузку до температуры испарения, и напряжённость электрического поля необходимую для ионизации молекул пара.

Также, может быть введена иерархия последовательности изменения конструктивных параметров:

- высота и диаметр тигля, определяемые интенсивностью и направленностью парового потока;

- высота стенок тигля над загрузкой (выступ тигля), определяемая магнитогидродинамической активностью загрузки и направленностью парового потока;

- количество витков индуктора, ограниченное высотой тигля и мощностью джоулевых потерь в индукторе, т.е. интенсивностью охлаждения индуктора;

- выступ тигля из индуктора, определяемый регулированием темпера-

туры выступа тигля;

- диаметр терморезистивной вставки;

- диаметр теплового экрана.

С учётом вышеизложенного, алгоритм расчёта двух первых задач следующий:

1. Задаются электрические и теплофизические свойства всех компонентов ИИ при рабочей температуре (начальные условия).

2. Рассчитывается распределение токов в тигле и загрузке (вставке).

3. Распределение токов передаётся в задачу нагрева загрузки и тигля.

4. В задаче нагрева рассчитывается распределение температуры в тигле и загрузке, определяется температура поверхности загрузки.

5. Изменяется напряжение на индукторе.

6. Расчёт повторяется по пп.2-5 пока рассчитываемая температура поверхности загрузки не совпадёт с заданной.

7. Определяется: распределение напряжённости магнитного поля вдоль выбранных сечений над поверхностью испарения; ток индуктора; мощность потребляемая индуктором; мощность тепловых потерь на испарение, распределение температуры вдоль поверхности испарения.

8. По полю потока термоэлектронов определяются области ионизации, и очаги возникновения газового разряда.

9. Изменяется частота тока и повторяется расчёт по пп.2-8 пока результат расчёта не удовлетворит п.8

10. Изменяется геометрический размер элемента ИИ и расчёт повторяется по пп.2-8.

11. Изменяется компоновка ИИ и расчёт повторяется по пп.2-9.

Результаты расчётов заносятся в таблицы, по которым строятся графики и производится обработка результатов.

Технологические ограничения при моделировании

При создании наноразмерных структур для снижения радиационного воздействия используют низкоэнергетические паровые потоки нейтральных частиц. Ионы с энергией всего 1 эВ разрушают или деформируют структуры в радиусе 20 нанометров.

Для получения паровых потоков с исключительно нейтральными частицами тигель и верхний виток индуктора заземляют. Для подавления ионизации испарённых частиц так же понижают частоту тока индуктора [2]. Снижение напряжения на индукторе не позволяет ускоряться термоэлектронам до энергии ионизации атомов парового потока.

Ионизированные паровые потоки используют для увеличения радиационного воздействия на осаждаемые структуры с целью влияния на их состав, кристаллизацию и текстуру. Энергия ускоренных ионов из парового потока используется для удаления с поверхности подложки адсорбированных газовых молекул на начальной стадии осаждения структур, либо в течение всего процесса, либо импульсными энергетическими ударами. Так же ускоренные ионы могут использоваться для имплантации в подложку для создания переходного слоя на её поверхности.

Для ионизации парового потока повышают частоту тока индуктора и количество его витков. Также применяют дополнительные устройства для ионизации парового потока.

В вакуумно-плазменных технологиях получают паровые потоки высокой интенсивности, при которой давление насыщенных паров над поверхностью испарения близок к значению p = 1,33 Па $= 10^{-2}$ Торр, а температуру, соответствующую этому давлению пара, называют температурой испарения [5]. Большая часть металлов достигает температуры испарения после расплавления. Некоторые металлы (Cd, Zn, Mn, Cr) сублимируют, и их температура испарения находится ниже температуры плавления.

В источниках (например, [5, 6]) приведены разные значения для температуры испарения, а для некоторых веществ данные отсутствуют. При необходимости можно воспользоваться формулами аппроксимации, но в ограниченном диапазоне давлений и, соответственно, температур. Аппроксимации удобны при динамических расчётах, но они не охватывают всего температурного диапазона технологических процессов.

Математическая модель электромагнитного поля и токов

Ток в индукторе определяется как сумма стороннего тока от внешней электрической цепи и вихревого тока, индуцированного магнитным полем

$$j = j_{\rm ctop} + j_{\rm buxp}.$$

Параметры поля представляются дифференциальным уравнением в частных производных относительно комплексной амплитуды векторного магнитного потенциала **A** (**B** = **rot A**, **B** – вектор магнитной индукции) [2]. Вектор магнитной индукции **B** предполагаем лежащим в плоскости осесимметричной модели (*z*0*r*), а вектор плотности электрического тока **j** и векторный магнитный потенциал **A** ортогональны к нему. Только элементы j_{θ} и A_{θ} отличны от нуля (обозначим их просто *j* и *A*).

При таких ограничениях модели получим выражение связывающее токи в элементах и поле в пространстве испарителя:

$$+\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r\mu_z}\frac{\partial(rA)}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{\mu_r}\frac{\partial A}{\partial z}\right)-i\omega\cdot\gamma\cdot A=-j_{\rm crop},$$

где электропроводность γ и элементы тензора магнитной проницаемости μ_z и μ_r постоянны в переделах каждого элемента модели. Составляющая тока $j_{\rm стор}$ принимается обратно пропорциональной радиусу (~1/r).

Ток смещения не оказывает влияния до мегагерцовых частот изменения поля, поэтому член $\partial \mathbf{D} / \partial t$ в формуле закона Ампера не учитываем. Тогда

имеем: $rot \mathbf{H} = \mathbf{j}$.

Свойства материалов считаем линейными, т.е. магнитные величины, описывающие поле в любой его точке, изменяются во времени синусоидально.

Материалы индуктора, тигля и загрузки считаем изотропными, что для испарителей типично. Тогда электропроводность не зависит от направления и напряжённости электрического поля E, и связана с ним законом Ома. Вместо элементов тензоров для таких сред можно задать интегральные значения магнитной проницаемости и электропроводности элементов испарителя.

Отсутствия нормальной составляющей индукции на оси симметрии и на удалённых границах области задаётся через условие Дирихле, которое определяет известное значение векторного магнитного потенциала A_0 [2]. Это условие определяет нормальную составляющую элемента вектора магнитной индукции. Для осесимметричной задачи условие Дирихле задаётся в функции координат: $rA_0 = a + bzr + cr^2/2$, где *a*, *b* и *c* – постоянные для каждой поверхности, и могут изменяться от одной поверхности к другой. Тогда внешнее однородное поле задаётся ненулевой нормальной компонентой магнитной индукции на гладком участке границы сред.

На оси симметрии модели ИИ задано однородное граничное условие Дирихле, т.е. значение нормальной составляющей индукции равно нулю ($B_r = 0$).

На плоскостях магнитной антисимметрии, если явно не указаны иные виды граничных условий, задаются граничные условие Неймана [2]. К плоскостям магнитной антисимметрии относятся внешние и внутренние границы исследуемой области.

На рис. 4, в качестве примера расчётов, приведены карты электрической напряжённости в пространстве испарителя и поле токов в тигле. Для расчётов в модели использованы экспериментальные данные зависимости от температуры параметров веществ.

Аналогично в соответствии с математическим формализмом прописываются модели температурного поля, парового потока и разряда в паровом потоке.

Обсуждение результатов

На рис. 4 приведены примеры результатов расчётов: графическая модель испарителя (рис. 4,а) с указанием сечений вдоль которых определялись токи в тигле с загрузкой (рис. 4,б); тоновая карта напряжённости электрического поля в окрестности испарителя (рис. 4,в) с обозначением эквипотенциалей с шагом 2 В, при заземлённом тигле и напряжении на верхнем витке индуктора 42 В; изотермы в тигле с загрузкой (шаг 1 К). На графиках рис. 4,в для сечений 1 и 2 виден скачок тока на границе тигля и

1.8 1.6 1.4 (2W 1.2 TOKB (*10⁷ 1.0 0.8 Плотность 0.6 2 0.4 0.2 0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0 Координата, мм 0.0 1.2 1.4 б а 1545 K Z 42 B 0 B Mo

загрузки, который обусловлен большей электропроводностью медной загрузки.

> Г Рис. 4 Графическая модель ИИ (а), токи в тигле с загрузкой (б), тоновая карта напряжённости электрического поля (в) и изотермы в тигле (г): 1, 2, 3 – сечения тигля с загрузкой

Тепловыделение повторяет распределение токов в тигле с загрузкой и используется в качестве источников при расчёте температурного поля.

в

Выводы

Использование ИИ развито недостаточно из-за отсутствия научно обоснованных методик расчёта и конструирования таких испарителей. Физико-топологическая модель ИИ с декомпозицией физических процессов позволяет создать адекватную компьютерную модель. Подобные модели позволяют решать задачи исследования процессов и устройств, производить оптимизацию исследований и параметров устройств. Применительно к ИИ не решены несколько принципиальных задач: подавление электрических разрядов на витки индуктора при испарении материалов, которые

перетекают на наружную сторону тигля; оптимизации напряжения на индукторе, при приемлемой скорости испарения; эффективная ионизация парового потока.

Численный расчёт по иерархической структуре позволяет определять распределённые параметры электромагнитного поля в окрестности ИИ, тепловые поля в элементах, электрические режимы индуктора, условия испарения с поверхностей тигля и загрузки, эмиссионные характеристики и, в итоге, провести анализ зависимости параметров парового потока от конструкции и размеров испарителя.

Перечень ссылок

1. Слухоцкий А. Е. Индукторы для индукционного нагрева / А. Е. Слухоцкий, С.Е. Рыскин. – Л. : Энергия, 1974. – 264 с.

2. Немков В. С. Теория и расчёт устройств индукционного нагрева / В. С. Немков, В. Б. Демидович. – Л. : Энергоиздат, 1988. – 280 с.

3. Kuzmichev A. Advances in Induction and Microwave Heating of Mineral and Organic Materials / A. Kuzmichev, L. Tsybulsky, S. Grundas ed., – Vena : InTech, 2011. – 752 p. ISBN: 978-953-307-522-8.

4. Исаченко В. П. Теплопередача : учебник для вузов. : 3-е изд. / В. П. Исаченко, В. А. Осипова, А. С. Сукомел. – М. : Энергия, 1975. – 488 с.

5. Дешман С. Научные основы вакуумной техники / С. Дешман. – М. : Мир, 1964. – 715 с.

6. Технология тонких плёнок : справочник. Т. 1 / Под ред. Л. Майссела и Р. Глэнга. – М. : Сов. радио, 1977. – 657 с.

Referenses

1. Slukhotskii A. E. and Ryskin S.E. (1974) *Induktory dlya induktsionnogo nagreva* [Inductor for induction heating]. Leningrad, Energiya, 264 p.

2. Nemkov V. S. and Demidovich V. B. (1988) *Teoriya i raschet ustroistv induktsionnogo nagreva* [Theory and calculation of induction heating devices]. Leningrad, Energoizdat, 280 p.

3. Kuzmichev A. and Tsybulsky L. and Grundas S. ed. (2011) Advances in Induction and Microwave Heating of Mineral and Organic Materials, Vena, InTech, 752 p.

4. Isachenko V. P., Osipova V. A. and Sukomel A. S. (1975) Teploperedacha [Heat transfer]. Moskow, Energiya, 488 p.

5. Deshman S. (1964) Nauchnye osnovy vakuumnoi tekhniki [Scientific fundamentals of vacuum technology]. Moskow, Mir Publ., 715 p.

6. Maissela L. eds. and Glenga R. eds. (1977) Tekhnologiya tonkikh plenok [Handbook of thin films technology]. Moskow, Sov. radio, 657 p.

Цибульский Л. Ю. Фізико-топологічне моделювання індукційного випарника металів. На основі декомпозиції фізичних процесів, що протікають в індукційному випарнику, представлена його ієрархічна фізико-топологічна модель, де магнітне поле струмів індуктора описується рівнянням в часткових похідних щодо комплексної амплітуди векторного магнітного потенціалу. Чисельним розрахунком встановлюється розподіл напруженості магнітного поля, розподіл струму і температури в елементах випарника. Наведено приклади розрахунків.

Ключові слова: фізико-топологічне моделювання, індукційний випарник, чисельні методи, математична модель

Цибульский Л. Ю. Физико-топологическое моделирование индукционного испарителя металлов.. На основе декомпозиции физических процессов, протекающих в индукционном испарителе, представлена его иерархическая физико-топологическая модель, где магнитное поле токов индуктора описывается уравнением в частных производных относительно комплексной амплитуды векторного магнитного потенциала. Численным расчетом устанавливается распределение напряженности магнитного поля, распределение тока и температуры в элементах испарителя. Приведены примеры расчётов.

Ключевые слова: физико-топологическое моделирование, индукционный испаритель, численные методы, математическая модель

Tsybulsky L. Physical-topological modelling techniques of metal induction evaporator. The article describes the methodology and results of hierarchical modelling of the induction evaporator, which takes into account the related heterogeneous processes and allows to numerically calculate the electromagnetic field in the vicinity of the evaporator as well as current and temperature distributions in the loaded crucible. The model development work allows to make the conclusion that the method of finite elements is most suitable for calculation of electromagnetic and temperature fields. The given model may be employed for modeling vapor flow ejection from the crucible to substrates and electrical discharges in the evaporator. On the base of decomposition of physical processes in the induction evaporator, a complex hierarchical physical-topological model, where the magnetic field of induction current is described by differential equation in partial derivatives relatively the complex amplitude of magnetic vector potential, is created. The magnetic field distribution is numerically calculated, from which the boundary conditions are founded for determining the current distribution in the elements of the evaporator with the use of the total current equation. The current distribution determines a heat source distribution, which, in turn, is a boundary condition for numerical calculation of non-linear heat-conductivity equation for the stationary problem. As a result, the temperature distribution and heat flows in the loaded crucible as well as integral characteristics of the induction evaporators are determined.

Keywords: physical-topological modeling, inductive evaporator, numerical methods, mathematical model

118