

**Клейманов Роман Валерьевич**

**РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ПОДАЧИ ВЯЗКИХ  
ВЫСОКОКИПЯЩИХ РЕАГЕНТОВ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ  
ХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ**

2.2.3. Технология и оборудование для производства материалов и приборов  
электронной техники

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени

кандидата технических наук

Санкт-Петербург

2023 год

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого».

**Научный руководитель:** **Александров Сергей Евгеньевич**  
доктор химических наук, профессор

**Официальные оппоненты:** **Горбачев Юрий Евгеньевич**  
доктор физико-математических наук, академик  
РАЕН, ведущий специалист Акционерного  
общества «Группа СТР», г. Санкт-Петербург

**Большаков Алексей Дмитриевич**  
кандидат физико-математических наук,  
заведующий лабораторией функциональных  
наноструктур, фотоники и двумерных  
материалов, старший научный сотрудник  
федерального государственного автономного  
образовательного учреждения высшего  
образования «Московский физико-технический  
институт (национальный исследовательский  
университет)», Московская область,  
г. Долгопрудный

**Ведущая организация:** Федеральное государственное бюджетное  
учреждение науки «Институт Проблем  
Машиноведения Российской Академии Наук»,  
г. Санкт-Петербург

Защита состоится 21 февраля 2023 года в 16:00 на заседании диссертационного совета У.2.2.3.08 федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» по адресу: г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, лит. П (Химический корпус), ауд. 51

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» <https://www.spbstu.ru>.

Автореферат разослан «\_\_» января 2023 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета У.2.2.3.08  
кандидат химических наук



Тюрикова Ирина Андреевна

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность

Значительное количество технологических процессов получения различных материалов (пленок, наночастиц, нанотрубок и пр.) осуществляется методами химического осаждения из газовой фазы (ХОГФ, англ. Chemical vapor deposition, CVD). Подача реагентов, при нормальных условиях находящихся в жидком состоянии, осуществляется в виде пара или аэрозоля (мелкие капли распыленной жидкости, переносимые потоком газа-носителя) с последующим испарением капель. Одним из важнейших направлений в применении процессов ХОГФ является получение особо чистых материалов в больших количествах, например, осаждение кварцевого стекла, осуществляемое в пламени горелки (ХОГФП) из различных летучих соединений кремния. Это один из наиболее производительных технологических процессов, обеспечивающий получение кварцевого стекла высокой степени чистоты в виде монолитных заготовок с линейными размерами до нескольких метров и массой до нескольких сотен кг.

В качестве перспективных реагентов для получения кварцевого стекла методами ХОГФП особый интерес представляют кремнийорганические соединения, не выделяющие в качестве побочного продукта хлороводород, как в случае использования хлорсиланов. Переход на жидкие низколетучие высоковязкие кремнийорганические реагенты требует разработки оригинальных систем подачи реагента, обеспечивающие большие расходы реагента в виде мелкодисперсного аэрозоля или пара в среде водорода или кислорода.

Сочетание высоких требований к чистоте получаемого продукта и большим объемам осаждаемого материала, с учетом сложности и многостадийности процесса осаждения, приводит на практике к необходимости разработки нового технологического оборудования для ввода реагента в пламя кислородно-водородной горелки.

Решение данной задачи требует рассмотрения существующих способов подачи реагентов и разработки устройства, обеспечивающего выполнение

требований, предъявляемых к подобным системам с учетом используемых реагентов и газов. На сегодняшний день в технической литературе отсутствует информация об успешном решении данной проблемы, а недостаточная изученность и сложность процессов, сопровождающих получение, транспорт и испарение аэрозоля и процессов ХОГФП не позволяет решить задачу за счет комбинации ранее примененных решений.

**Целью** настоящей работы являлась разработка конструкции, создание и проверка работоспособности системы подачи вязкого высококипящего реагента в виде аэрозоля или паров в установку химического осаждения, обеспечивающей высокую производительность и возможность регулировки расхода жидкости в широких пределах.

Достижение данной цели предусматривает решение следующих **задач**:

1. Построение и отладка (настройка) численной модели распылителя на основе сверхзвукового сопла для определения геометрических параметров каналов подачи газа и жидкости.
2. Разработка конструкции и создание прототипа аэродинамического распылителя на основе сверхзвукового сопла, способного распылять вязкий высококипящий реагент с достаточно большим расходом и высокой дисперсностью формируемого аэрозоля при распылении.
3. Экспериментальная проверка работоспособности конструкции распылителя, спроектированной на основе численной модели.
4. Построение и отладка численной модели испарителя, учитывающей особенности теплообмена в двухфазном потоке. Настройка геометрии проточной части, схемы расположения и мощности нагревателей, позволяющей обеспечить наиболее эффективное испарение реагента, исключая засорение проточной части испарителя продуктами разложения реагента. Отладка численной модели подразумевает сокращение требуемых вычислительных ресурсов при сохранении достаточной степени точности работы модели для проведения расчетов без привлечения суперкомпьютеров.

5. Разработка конструкции и создание прототипа системы подачи реагента испарительного типа для работы с “легкими” (водород, гелий) газами-носителями.

6. Экспериментальная проверка работоспособности конструкции испарителя, спроектированной на основе численной модели.

### **Научная новизна**

1. Разработана численная модель распылителя оригинальной конструкции, позволяющая экономить вычислительные ресурсы при расчете течения в сверхзвуковом сопле и переносе параметров для расчета расхода реагента. Модель распылителя позволяет рассчитывать расход реагента на основе нестационарного неизотермического описания течения газа-носителя с учетом косых скачков уплотнения, возникающих в канале плоского сверхзвукового сопла с внутренним телом.

2. Впервые получены экспериментальные данные о режимах работы системы распыления реагента на базе плоского сверхзвукового сопла, обеспечивающая дробление капель за счет косых скачков уплотнения и возможность плавного регулирования расхода газа и реагента за счет изменения геометрии критического сечения сопла

3. Разработана численная модель испарителя оригинальной конструкции, описывающая двухфазный двухкомпонентный неизотермический поток и позволяющая рассчитывать требуемую мощность и конфигурацию нагревателей. Модель базируется на нестационарной модели течения газа-носителя с учетом теплообмена, впервые дополненной уравнениями переноса концентрации дисперсной фазы и корректировкой полей скорости, давления и температуры с учетом испаряющегося реагента;

4. Разработан испаритель оригинальной конструкции, позволяющий переводить высококипящие реагенты в пар в потоке легкого газа при температурах стенок испарителя ниже температур объемного кипения.

## **Теоретическая и практическая значимость работы**

Разработанные модели для расчета аэродинамических распылителей и канальных испарителей могут быть применены для численного моделирования процессов генерации и транспорта аэрозольных частиц в условиях сложного теплообмена в устройствах распыления и испарения аэрозолей в потоке газа-носителя. Данные модели основываются на методах расчета течения турбулентных потоков газа при пониженном давлении, близком к атмосферному и повышенном давлении, а также при высоких скоростях потока газа и отличаются высокой производительностью и простотой настройки, что значительно ускоряет процесс предварительного моделирования при разработке систем подачи реагентов в виде аэрозолей или паров.

Продемонстрировано, что аэродинамический распылитель на основе плоского сопла Лавалья с внутренним телом способен производить распыление жидких реагентов со значительно различающимися показателями вязкости и поверхностного натяжения.

Показано, что методика моделирования испарения аэрозоля в потоке газа на основе численной модели переноса концентрации дисперсной фазы позволяет с приемлемой точностью описывать теплообмен в двухфазном потоке при низких концентрациях аэрозоля. За счет этого удастся избежать ресурсоемкого моделирования поверхности теплообмена, представляющей собой поверхности аэрозольных частиц, что позволяет значительно быстрее выполнять расчеты и обеспечивает удовлетворительную точность при сравнении результатов моделирования с испытаниями лабораторных макетов.

Разработанные и апробированные в ходе лабораторных испытаний образцы технологического оборудования позволяют осуществлять подачу высококипящих реагентов с расходами газа-носителя до 27 л/мин (по кислороду) и до 300 г/ч жидкого реагента (декаметилциклопентасилоксана, D5) с возможностью как увеличения, так и уменьшения оных. Применительно к процессам ХОГФ, данное оборудование может быть использовано для химического осаждения из газовой

фазы особоочистого кварцевого стекла в больших количествах, осуществляемое в пламени горелки (ХОГФП).

### **Методология и методы исследования**

Для анализа течения транспортирующего газа и потока аэрозоля реагента в нем применяется численное моделирование течения одно- и двухфазных неизоермических потоков методами вычислительной гидродинамики. Модель представляет собой совокупность отдельных модулей, предназначенных для последовательного и параллельного построения полей физических величин, необходимых как для построения картины течения, так и в качестве исходных данных для последующих расчетов, например, для расчета испарения частиц аэрозоля по мере продвижения парогазовой смеси по реактору или проточной части испарителя. Для проверки работоспособности конструкции и методов расчета, заложенных при ее проектировании и численном моделировании, проводится натурный эксперимент с лабораторным образцом аэродинамического распылителя и трубчатого испарителя.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Оригинальная конструкция аэродинамического распылителя на основе плоского сопла Лавалья, обеспечивающая распыление реагента (декаметилциклопентасилоксана, D5) с расходом 300 г/ч в среде кислорода, при давлениях газа-носителя 1,6 -2,0 атм. и расходе газа 18 л/мин.

2. Численная модель, позволяющая рассчитывать производительность распылителя оригинальной конструкции с учетом свойств транспортирующего газа и жидкого реагента. Модель распылителя обеспечивает расчёт расхода реагента на основе нестационарного неизоермического описания течения газа-носителя с учетом косых скачков уплотнения, возникающих в канале плоского сверхзвукового сопла с внутренним телом. И использованные в численной модели методы описания течения базируются на высокопроизводительных расчетных алгоритмах, что позволяет экономить вычислительные ресурсы и ускоряет проведение расчетов.

3. Оригинальная конструкция испарителя для вязких высококипящих реагентов, предназначенная для перевода высококипящего реагента (октаметилциклотетрасилоксан с расходом 300 г/ч) в пар в потоке легкого газа-носителя (водорода с расходом 0.4 м<sup>3</sup>/ч) при температурах стенок испарителя ниже температур объемного кипения реагента (145 °С).

4. Численная модель двухфазного двухкомпонентного неизотермического течения с испарением аэрозоля, модель позволяет определять мощность нагревателей в зависимости от типа и расхода транспортного газа и реагента, а также расхода реагента в широком диапазоне, базирующаяся на нестационарной модели течения газа-носителя с учетом теплообмена, впервые дополненной уравнениями переноса концентрации дисперсной фазы и корректировкой полей скорости, давления и температуры с учетом испаряющегося реагента.

**Степень достоверности результатов и обоснованность выводов,** полученных в диссертационной работе, определяется комплексным использованием современных экспериментальных, аналитических и численных методик, соответствием полученных экспериментальных и расчётных результатов, их воспроизводимостью и корреляцией с данным из литературных источников.

#### **Апробация результатов работы**

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях, семинарах и школах: «XXI Школа-семинар молодых ученых и специалистов под руководством академика А.И. Леонтьева "Проблемы газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках"»(2017, Санкт-Петербург), конференция с международным участием "International youth conference of electronics, telecommunications and information " (YETI-2021).

#### **Публикации**

По теме диссертации опубликовано 3 научные работы, из них: 1 статья в научном журнале, рекомендованном ВАК, 2 статьи в научных журналах, индексируемых Scopus.

**Личный вклад автора** имеет определяющее значение в постановке цели и задач, в выборе объектов и методов исследования. Изготовление образцов, их теоретическое и экспериментальное исследование, а также анализ полученных результатов, проводились лично автором или совместно с соавторами.

### **Структура и объем диссертационной работы**

Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения, и библиографического списка, включающего 198 наименований. Диссертация содержит 129 страниц машинописного текста, включая 51 рисунок и 3 таблицы.

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

Во **введении** рассмотрены актуальность выбранного направления исследований и состояние актуальных разработок по теме исследования, раскрыта научная новизна, сформулированы цель и основные задачи работы, приведена научная и практическая значимость работы, а также изложены положения, выносимые на защиту.

В **главе 1** содержится обзор современного состояния исследований по теме диссертации, рассмотрены системы подачи труднолетучих реагентов, приведены примеры технологических процессов, использующих подачу реагента в виде аэрозоля для осаждения пленок, а также наночастиц. Рассмотрены методы генерации аэрозолей распылением и конструкции испарительных устройств. Рассмотрены особенности процессов химического осаждения из газовой фазы в пламени, используемые в процессах синтеза оптических материалов. Приведено современное состояние работ в области разработки систем подачи жидких реагентов. На основе проеденного анализа сформирована актуальность, проведена постановка целей и задач исследования.

В **главе 2** представлены методы математического моделирования течения газа и жидкости, рассмотрены подходы, основанные на системе уравнений Навье-Стокса. Представлено отличие различных подходов к моделированию

турбулентных вихрей в потоке жидкости или газа. Приведены различия в затратах вычислительных ресурсах, требуемых для решения задач со сложной геометрией расчетной области и режимом течения, при котором возможно образование вихревых структур, описанные параметры приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Требуемые вычислительные ресурсы и готовность методов

Метод	Необходимое число узлов сетки	Необходимое число шагов по времени	Готовность для общинженерных расчетов
2D RANS нестационарный	$10^5$	$10^{3,5}$	1980
3D RANS	$10^7$	$10^3$	1985
3D RANS нестационарный	$10^7$	$10^{3,5}$	1995
DES	$10^8$	$10^4$	2000
LES	$10^{11,5}$	$10^{6,7}$	~2045
DNS	$10^{16}$	$10^{7,7}$	~2080

Данные, приведенные в таблице 1, отражают состояние готовности метода к расчету течения в течение суток на мощном суперкомпьютере. Приведенные данные показывают относительную разницу в затратах вычислительной мощности для разрешения одной и той же задачи, реализуемой в рамках следующих подходов: Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS, осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье-Стокса), симуляция больших вихрей Large Eddy Simulation (LES), симуляция больших вихрей (Detached Eddy Simulation, DES) и прямое численное моделирование DNS – Direct Numerical Simulation.

На основе приведённых данных можно заключить, что единственным доступным методом моделирования сложных течений, к каковым относятся течения в распылителях и испарителях систем подачи реагентов для реакторов ХОГФ, является подход, основанный на использовании уравнений RANS. Рассмотрены современные подходы к моделированию сложных течений. На основании рассмотренных подходов были построены численные модели распылителя и испарителя, позволяющие определять параметры работы при распылении (испарении) декаметилциклопентасилоксана для подачи в водород-кислородную горелку. В численной модели испарителя был впервые применен

метод расчета двухфазного потока на основе RANS-подхода и определения поля концентрации дисперсной фазы.

Для моделирования двухфазного течения с теплообменом в процессе образования аэрозоля, традиционно используются подвижные деформированные сетки, в данной работе предложен альтернативный вариант, реализованный на постоянных сетках. Чтобы избежать использования подвижных деформируемых сеток, был использован подход, при котором на первом этапе расчета определялись поля скоростей и давлений для основной фазы (газовой), а затем происходила их корректировка с учетом концентрации дисперсной фазы.

Таким образом, локальные параметры среды (теплоемкость, вязкость, плотность и пр.) пересчитывались, исходя из фактической концентрации жидкости к конкретной области, это привело к коррекции полей температур и скоростей относительно расчета без участия реагента. Такой подход не может быть применен в случаях, когда объемная концентрация дисперсной фазы велика (более 10%, по результатам предварительных расчетов), для данной задачи объемная концентрация жидкости на входе в расчетную область не превышала 1%, что можно считать допустимым для применения данного метода.

**В главе 3** приведена одномерная методика проектирования каналов сверхзвуковых сопел, рассмотрены зависимости параметров потока от геометрии проточной части и произведен выбор геометрии сопла. Показано, что при сравнении газов с различными молекулярными массами, местная скорость звука у более легких газов выше, что требует увеличения расхода газа в распылителе (таблица 2).

Анализируя термодинамику сверхзвуковых сопел, можно заключить, что для работы совместно с водород-кислородными горелками более предпочтительно использование кислорода в виду больших диаметров критических сечений и меньшей скорости звука. На основе методик расчета формы канала сопла был спроектирован распылитель, основанный на плоском сверхзвуковом сопле с внутренним телом (рисунок 1). Внутреннее тело предназначено для подвода жидкого реагента в зону пониженного давления,

кроме того, в таком случае стало возможным выполнение канала с прямолинейными стенками, что является более технологичным.

Таблица 2 – Диаметры критических сечений (мкм) осесимметричного сверхзвукового сопла для водорода и аргона

	$V_{H_2}$ , л/мин				
$P_{изб}$ , атм	10	20	30	40	50
1	124	176	215	249	278
1,5	111	157	193	223	249
2	102	144	176	203	227
	$V_{Ar}$ , л/мин				
$P_{изб}$ , атм	10	20	30	40	50
1	545	770	943	1089	1218
1,5	487	689	844	974	1089
2	445	629	770	889	994

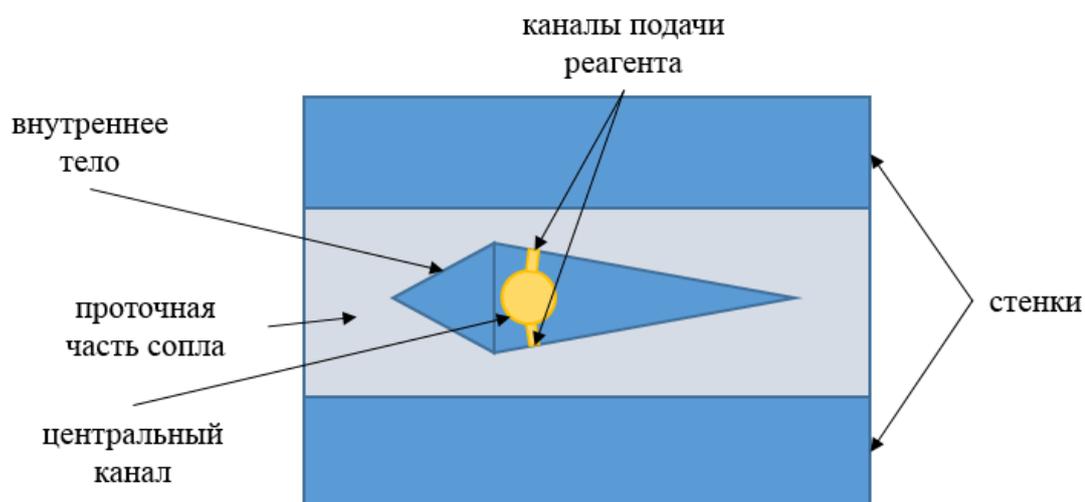


Рисунок 1 – Общий вид распылителя с плоским соплом Лавала с внутренним телом.

Плоский канал сопла образован стенками основания и выступами вставки, которые задают геометрию сужающейся и расширяющейся частей. Конструкция допускает применение сменных проточных частей для регулирования расхода как несущего газа, так и реагента.

Далее было выполнено численное моделирование спроектированной конструкции с целью получения параметров течения с учетом пульсаций

давления и переотражения ударных волн в проточной части сопла. Расчет выполнен в программном пакете COMSOL Multiphysics, включающим моделирование течения вязкого сжимаемого газа с моделью турбулентности SST в низкорейнольдской стационарной постановке. Газ (рабочая среда) – кислород с температурой на входе 300 К, давление на входе (избыточное) изменялось в диапазоне от 1 до 3 атм. Изменение свойств рабочей среды в зависимости от температуры и давления учитывалось с применением многопараметрического уравнения состояния Бенедикта-Вебба-Рубина. Данные задавались при помощи таблиц библиотеки Refprop NIST. Выбранный диапазон давления газа связан с необходимостью обеспечения сверхзвукового течения в каналах сопла, а также возможности работы при переменном давлении газа на входе. Геометрия канала подстраивается таким образом, чтобы в средней плоскости сечения канала добиться переотражения скачка уплотнения за критическим сечением сопла и добиться максимального увеличения зоны разряжения. Увеличение протяженности зоны разряжения необходимо для того, чтобы подводящие отверстия для распыляемой жидкости все время оставались в области низкого давления при пульсациях потока, и истечение реагента было более равномерным.

Визуализация распределения числа Маха в проточной части сопла представлена на рисунке 2. Можно отметить наличие переотражения скачков уплотнения от стенок канала и растянутую зону разряжения (рисунок 3), которая способствует стабильной подаче реагента, так как пульсации потока не будут приводить к выходу скачка за пределы зоны расположения подводящих отверстий.

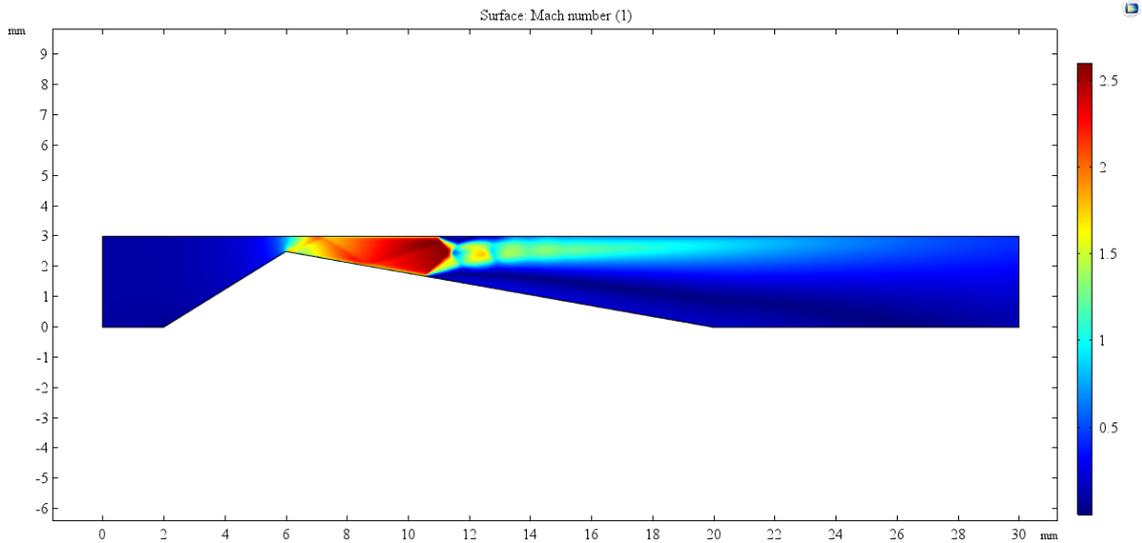


Рисунок 2 – Распределение числа Маха в проточной части распылителя.

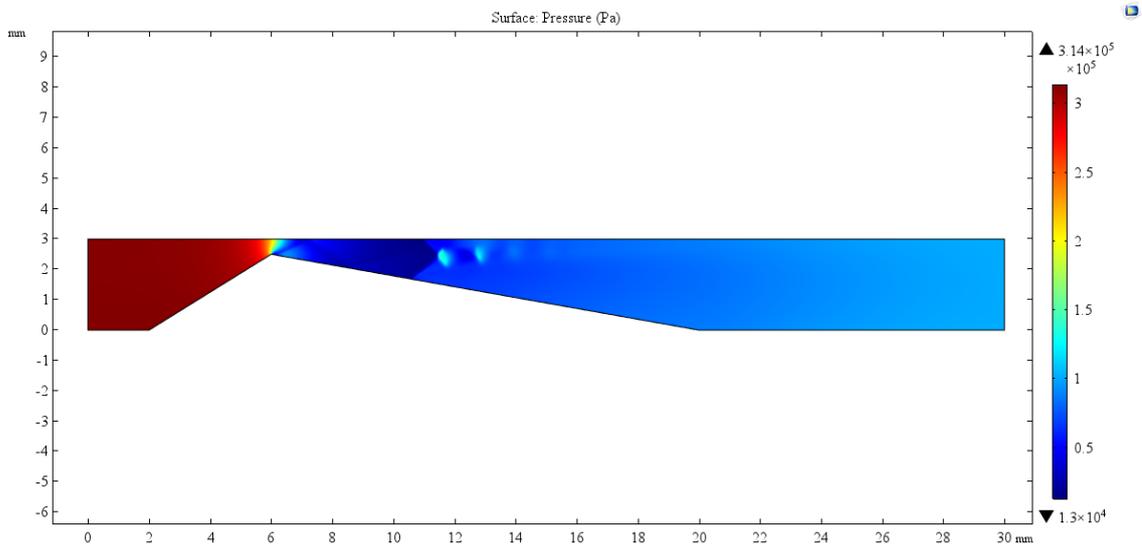


Рисунок 3 – Распределение статического давления в проточной части распылителя.

Полученные параметры течения газа были использованы для расчета расхода реагента. Экспериментальная проверка работоспособности системы была осуществлена с помощью лабораторного макета. В качестве газа-носителя был использован воздух, в качестве распыляемой жидкости: дистиллированная вода и декаметилциклопентасилоксан, результаты экспериментов приведены на рисунках 4 – 8.

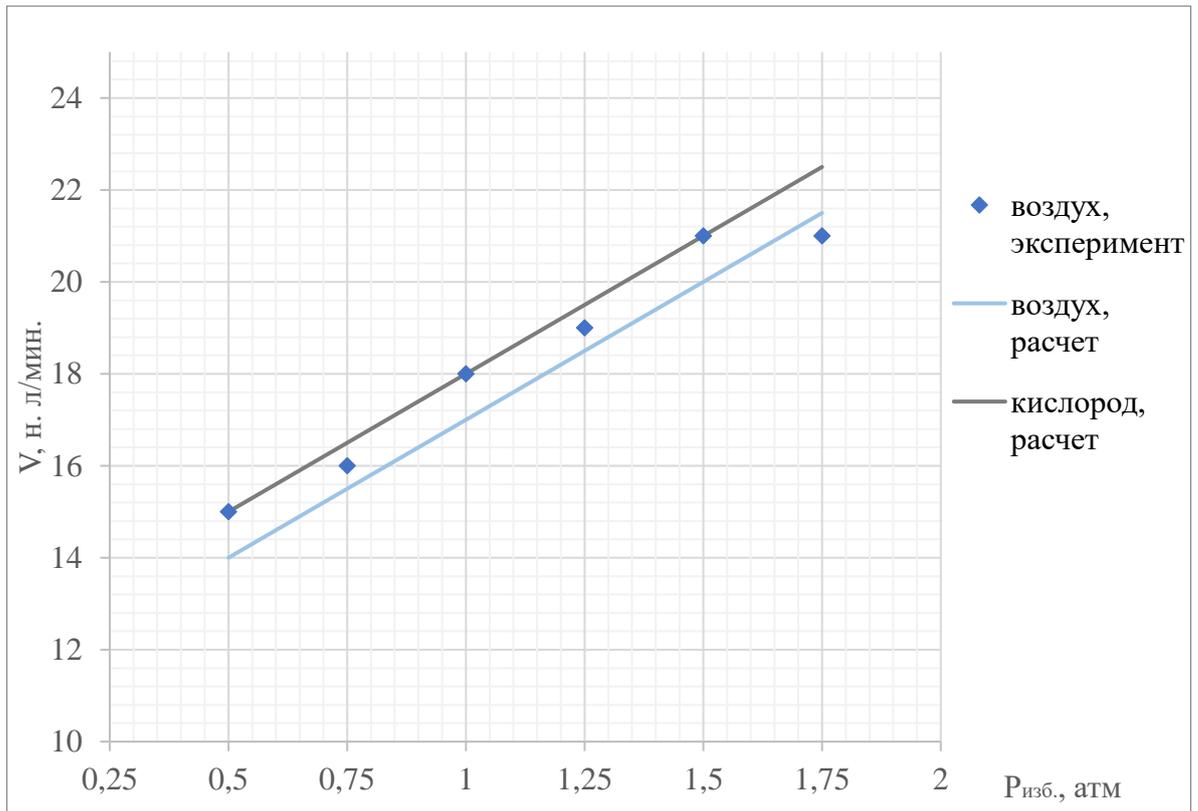


Рисунок 4 – Расход воздуха через распылитель.

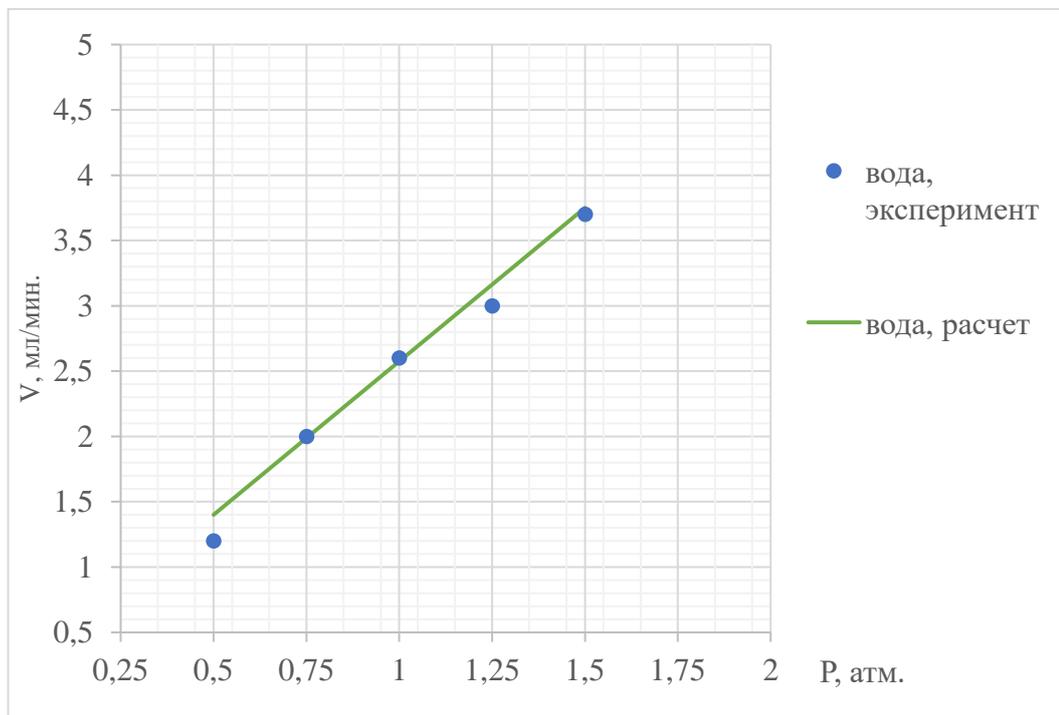


Рисунок 5 – Расход воды через распылитель.

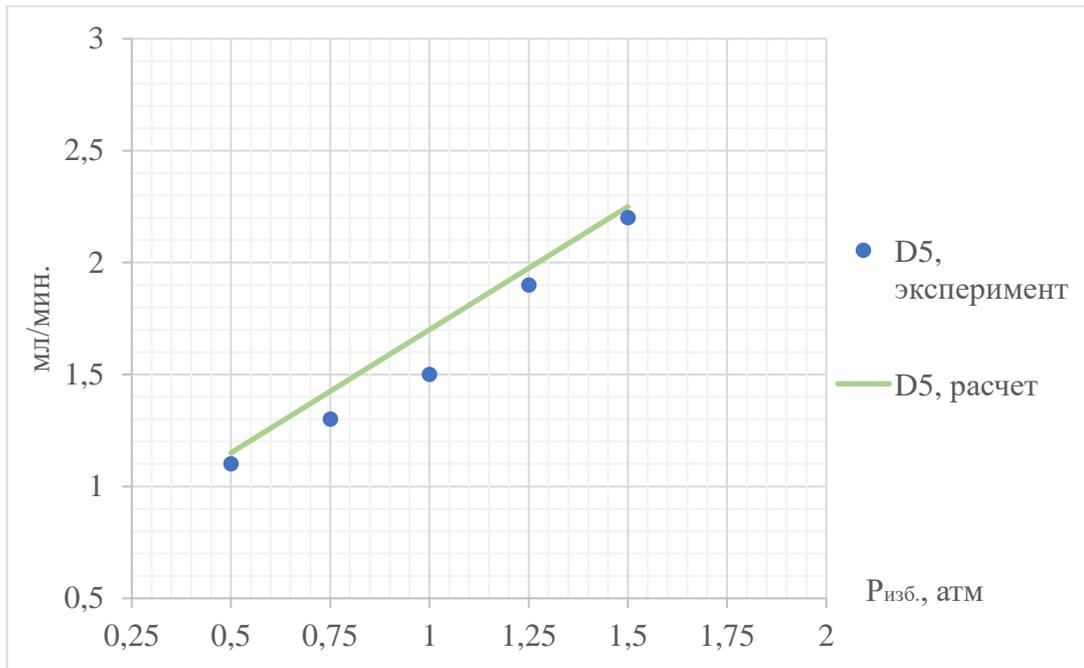


Рисунок 6 – Расход декаметилциклопентасилоксана через распылитель.

Экспериментальное исследование показало работоспособность конструкции при замене распыляемой жидкости с воды на декаметилциклопентасилоксан. Конструкция распылителя позволила изменить критическое сечение плоского сопла и значительно увеличить производительность распылителя за счет изменения условий течения (рисунки 7, 8).

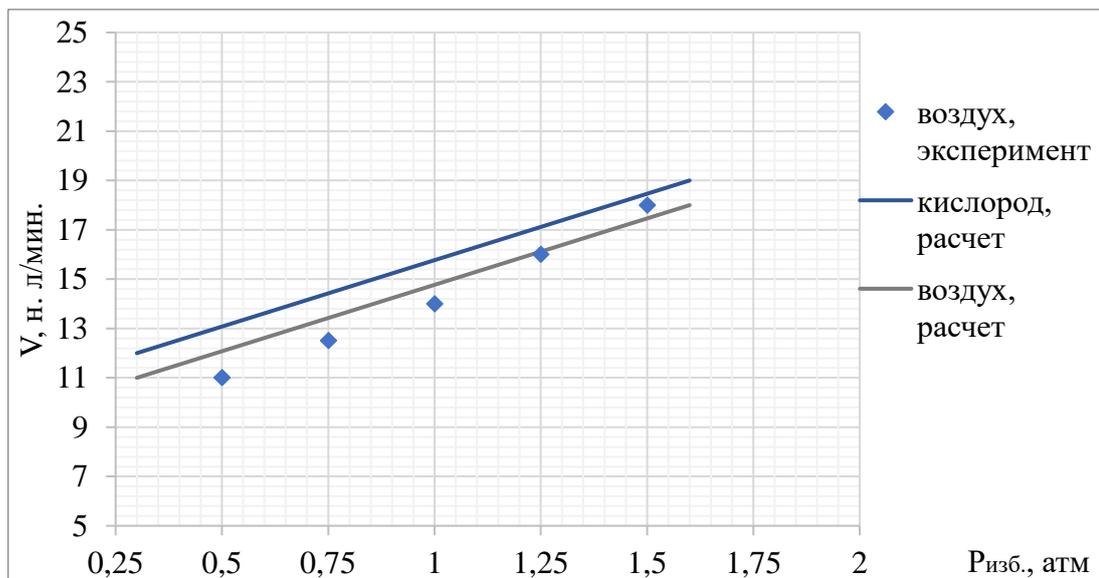


Рисунок 7 – Расходная характеристика распылителя при двухсторонней подаче газа и уменьшенном критическом сечении сопла.

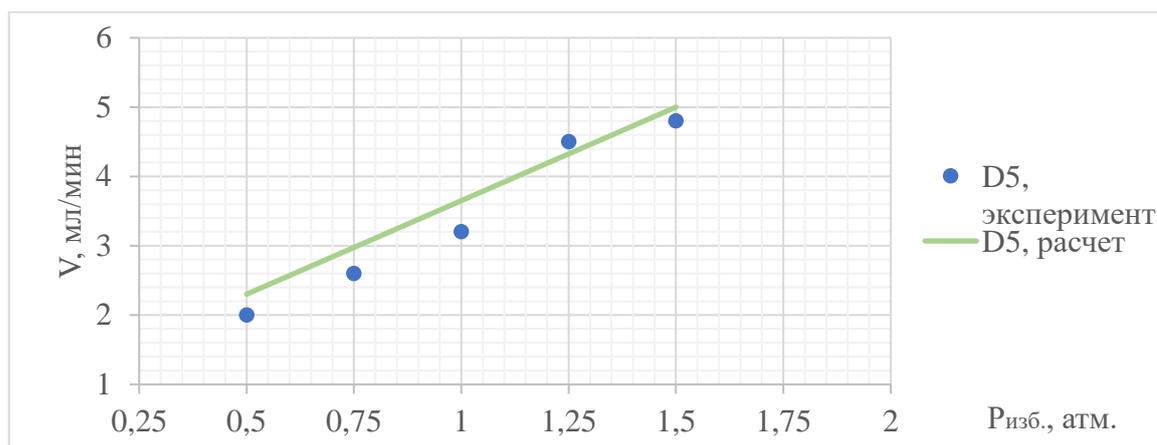


Рисунок 8 – Расход декаметилциклопентасилоксана через распылитель при двухсторонней подаче газа и уменьшенном критическом сечении сопла.

Для определения влияния скоростей потока и свойств распыляемого реагента на расход образующегося аэрозоля и минимально достижимый размер капель, был проведен ряд расчетов для различных транспортных газов и распыляемых жидкостей, результаты расчетов представлены на рисунках 9 и 10.

Представленная на рисунке 9 зависимость рассчитана для декаметилциклопентасилоксана и содержит отметки скоростей звука в газах при комнатной температуре, применение сверхзвуковых сопел для ускорения потока позволяет получать большие скорости течения, и как следствие, меньший размер капель.

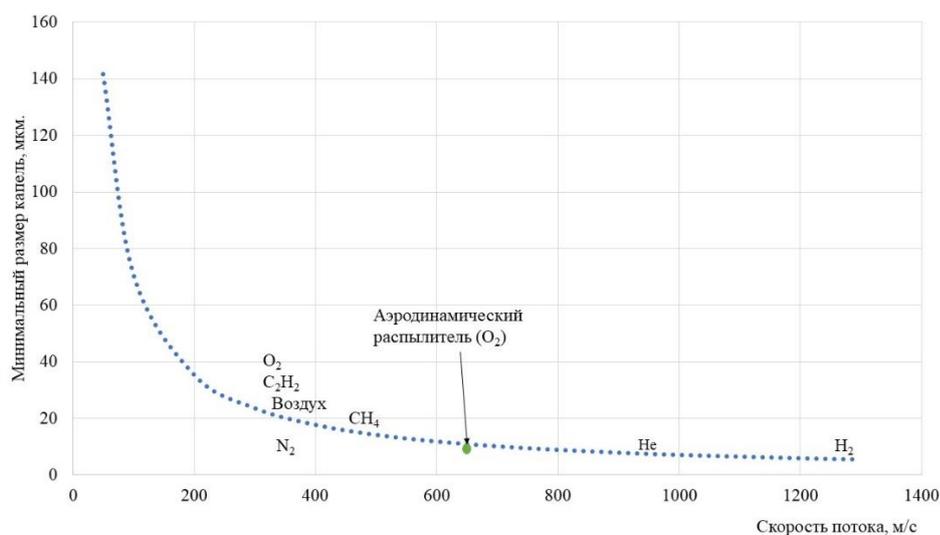


Рисунок 9 – Зависимость минимального размера капель от скорости течения газа.

Для определения влияния свойств жидкости на скорость подачи, был проведен ряд расчетов с различными свойствами жидкостей (вязкость, поверхностное натяжение) при фиксированных параметрах газового потока (транспортный газ-кислород с расходом 27 л/мин, сопло в режиме запирания), полученная зависимость позволяет оценить диапазоны вязкостей распыляемых реагентов, при которых достижимы большие расходы реагентов, результаты этих расчетов представлены на рисунке 10.

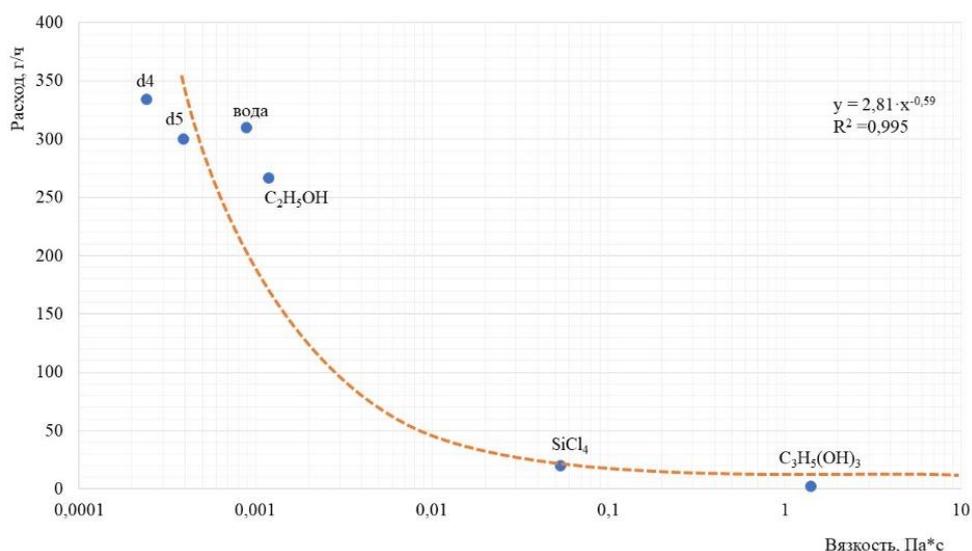


Рисунок 10 – Зависимость расхода различных реагентов при фиксированных условиях течения транспортного газа.

Зависимость, представленная на рисунке 10, представляет собой аппроксимационную кривую, которая позволяет при заданном режиме работы сопла распылителя (расход, тип и давление транспортного газа) определить скорости подачи при замене одного реагента на другой.

Таким образом, работоспособность разработанной конструкции была подтверждена в ходе экспериментального исследования, было показано, что путем несложной перестройки проточной части распылителя, можно значительно изменить характеристику распылителя.

В главе 4 показано, что поскольку распылитель аэродинамического типа неспособен на малых расходах обеспечить сверхзвуковое истечение газа-носителя и эффективное распыление реагента, альтернативным вариантом системы подачи реагента является испаритель. В качестве газа-носителя в испарителе использован

водород, а в качестве реагента – октаметилциклотетрасилоксан. Поскольку температура объемного кипения октаметилциклотетрасилоксана при нормальных условиях составляет 175 – 180 °С, а термическое разложение начинается уже при температурах кипения, была выбрана конструкция с испарением при меньших температурах в потоке газа. За основу конструкции было решено взять трубчатый испаритель с двойным поворотом потока, в который вводится реагент в виде капель, предварительно разбрызгиваемых в атмосфере легкого газа, общий вид геометрии проточной части испарителя приведен на рисунке 11. На внешних стенках располагался нагреватель, передача тепла осуществлялась через стенки внутрь проточной части.

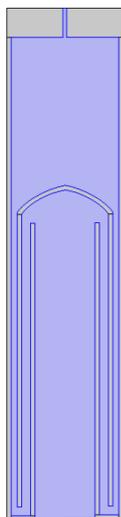


Рисунок 11 – Итоговая геометрия расчетной области испарителя со скругленным обтекателем.

Настройка режимов течения и определение мощностей нагревателей было выполнено с применением численного моделирования. Расчетный алгоритм строился по следующей схеме: была построена начальная геометрия с произвольными размерами, отталкиваясь от площади сечения на входе (обеспечивалась скорость потока 7 м/с в узких каналах); затем были получены поля скоростей и давлений с учетом работы нагревателей (задано начальное распределение мощности по 20 Вт на секцию); поле скорости использовалось для расчета переноса дисперсной фазы, было получено поле концентрации аэрозоля; по распределению температур и концентраций, исходя из свойств реагента, были пересчитаны параметры среды (теплоемкость, плотность, вязкость); далее

следовал очередной расчет полей скоростей и давлений по скорректированным свойствам рабочего тела, в итоге получено скорректированное поле концентраций; процесс длился до тех пор, пока различие в полях предыдущей и текущей итерации не составлял 1%; затем следовала корректировка геометрии с учетом ограничений, наложенных параметризацией и процесс продолжался с первого шага. Окончанием процесса вычислений служило достижение целевой функции: однородное распределение температур в выходной части испарителя на уровне ниже температуры кипения реагента ( $T_{кип.} - 10\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), это контролировалось сравнением осредненного поля и трех контрольных точек в ходе каждого цикла вычислений. В результате численного моделирования были получены поля скоростей, давлений и температур (рисунок. 12).

Для проверки полученных данных было решено провести экспериментальное измерение потребляемой мощности нагревателей испарителя при испарении октаметилциклотетрасилоксана. Так как проведение экспериментов с водородом не представляется возможным, была произведена замена газа и сделаны дополнительные расчеты. Экспериментально установленные значения температур в верхней ( $135\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), средней ( $135\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) и нижней ( $145\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) зонах испарителя, обеспечивающих перевод жидкости в пар, позволили оценить соответствующие мощности нагревателей, необходимые для поддержания этого распределения температур. Они, соответственно, составляли 51, 32.5 и 76.5 Вт. Для упрощения конструкции нагревателя и возможности использования одного источника электропитания был создан нагреватель с переменным шагом обмотки, обеспечивающий указанное выше распределение температур в трех зонах. Длина верхнего нагревателя составляла 50 мм и имела сопротивление 33 Ом, среднего – 40 мм и 21 Ом, а нижнего – 130 мм и 35 Ом. Именно такой нагреватель использовался при испытаниях кварцевого испарительного устройства.

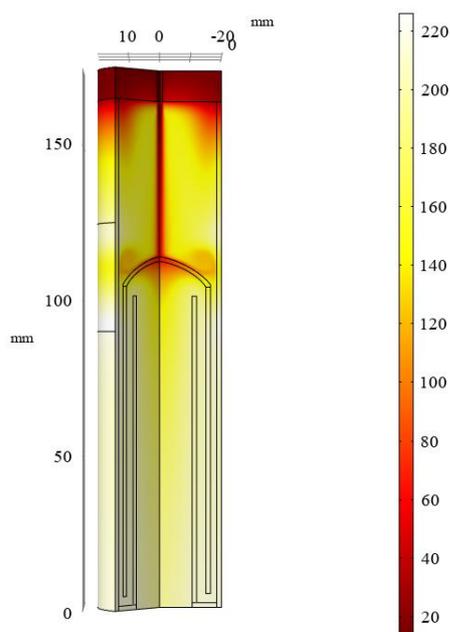


Рисунок 12 – Поле температур в испарителе на расчетном режиме.

Результаты испытания созданной конструкции испарителя при использовании гелия и водорода для распыления реагента с расходами, соответствующими техническому заданию, показали, что характер распыления жидкости и условия ее испарения хорошо согласуются с результатами математического моделирования.

Сравнивая экспериментальные и расчетные величины (таблица 3), можно сделать вывод о достаточной достоверности расчетов. Сравнивая экспериментальные и расчетные величины (таблица 3), следует отметить максимальную величину расхождения результатов менее 10% (как вариант более нейтрального описания). Так температуры в верхней и средней частях испарителя достаточно точно согласуются, несколько большие различия наблюдаются при сравнении мощностей нагревателей, однако в расчете невозможно учесть всех особенностей наружного теплообмена системы с окружающей средой и заданный конвективный теплообмен с внешней поверхности нагревателя может оказаться некорректным из-за различий в геометрии и состоянии окружающей среды (влажность воздуха, потоки воздуха вокруг экспериментальной установки и т.п.).

Таблица 3 – Сравнение расчетных и экспериментальных значений температур в контрольных точках на стенках испарителя и мощности нагревателей

	Нагреватель 1	$\Delta_1$ , %	Нагреватель 2	$\Delta_1$ , %	Нагреватель 3	$\Delta_1$ , %
$t^\circ\text{C}$ , расчет	140	3,5	130	3,7	160	9,3
$t^\circ\text{C}$ , эксперимент	135		135		145	
P, Вт, расчет	47	7,8	35	7,7	70	8,5
P, Вт, эксперимент	51		32,5		76,5	

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения работы была разработаны две конструкции устройств подачи реагента, обеспечивающие высокую производительность и возможность регулировки расхода распыляемой жидкости в широких пределах в двух исполнениях: распылительного типа для тяжелых газов и испарительного типа для легких газов и малых расходов транспортного газа. В ходе выполнения работы был решен следующий ряд задач:

1. Разработана конструкция аэродинамического распылителя на основе сверхзвукового сопла. Ранее такие конструкции для распыления высоковязких реагентов не применялись.
2. Построена и отлажена численная модели распылителя для определения геометрических параметров каналов подачи газа и жидкости.
3. Разработана конструкция системы подачи реагента испарительного типа для работы с легкими газами-носителями.
4. Построена и отлажена численная модель испарителя, проведена настройка геометрии проточной части, а также схемы расположения и мощности нагревателей, позволяющих полностью испарить реагент при исключении его разложения в зоне нагрева.
5. Проведена экспериментальная проверка работоспособности конструкции испарителя, спроектированной на основе численной модели.

Таким образом, все поставленные задачи были решены и достигнута цель разработки устройств подачи вязких высококипящих реагентов в реакторы химического осаждения из газовой фазы.

В ходе выполнения работы были достигнуты следующие результаты:

Построена численная модель испарителя, описывающая двухфазный двухкомпонентный неизотермический поток и рассчитывать требуемую мощность и конфигурацию нагревателей.

Впервые создана система распыления реагента на базе плоского сверхзвукового сопла Лавалья с дроблением капель за счет косых скачков уплотнения.

Созданная конструкция распылителя позволяет гибко варьировать параметры расхода газа и реагента за счет изменения критического сечения сопла;

Построенная численная модель распылителя позволяет рассчитывать производительность распылителя с учетом свойств транспортного газа и жидкого реагента.

Разработан испаритель, позволяющий переводить высококипящие реагенты в пар в потоке легкого газа при температурах стенок испарителя ниже температур объемного кипения.

### **СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ**

1. Клейманов Р.В. Аэродинамический высокопроизводительный распылитель жидких реагентов на основе сопла Лавалья. / Р.В. Клейманов, С.Е. Александров // Наноиндустрия. –2020. –Т. 13. –№ 5 (98). –С. 264-275.
2. Kleimanov R. Aerosol transport modeling for evaporator of CVD-reactor / R. Kleimanov, S. Alexandrov, A. Korshunov // In: Velichko, E., Kapralova, V., Karaseov, P., Zavjalov, S., Angueira, P., Andreev, S. (eds) International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies. – Springer Proceedings in Physics. –Vol 268. –Springer –2022. –P. 221-227.
3. Kleimanov R. Numerical Simulation of CVD Reactor for Oxide Semiconductor Layer Deposition / R. Kleimanov, A. Korshunov, I. Komarevtsev et al. In: E.Velichko, V. Kapralova, P. Karaseov, S. Zavjalov, P. Angueira, S. Andreev (eds) International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies. –Springer Proceedings in Physics. –Vol 268. – Springer –2022. –P. 229-234.