

УТВЕРЖДАЮ

Заместитель директора НИЦ «Курчатовский институт» по направлению ядерные технологии - директор Курчатовского центра ядерных технологий

Штромбах Я.И.

«24» 01



ОТЗЫВ

ведущей организации Национальный Исследовательский Центр "Курчатовский институт" о диссертационной работе Манкелевича Юрия Александровича «Плазменно и термически стимулированное осаждение алмазных пленок: многомерные модели химических реакторов», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы».

Задачей автора являлись полномасштабные исследования комплекса основных процессов в реакторах газофазного химического осаждения алмазных пленок с четырьмя типами активации углерод-содержащих смесей: горячей нитью (реактор ГХОГН), дуговым плазмотроном (реактор ГХОДП), разрядом постоянного тока (реактор ГХОРПТ) и сверхвысококачественным разрядом (реактор ГХОСВЧР).

Диссертация состоит из введения, обзора литературы (глава 1), пяти глав (главы 2-6), заключения и списка цитируемой литературы (314 ссылок). Общий объем диссертации составляет 315 страниц. Во введении формулируются цели работы, и обосновывается её актуальность. Проведенный литературный обзор показывает, что автор владеет тематикой на достаточно высоком уровне. Теоретические модели различных реакторов, описанные в главах 2-6, позволили автору провести необходимые исследования на передовом уровне, соответствующем развитию современных теоретических методов исследования физики плазменных и термических реакторов. Основные результаты изложены в главах со второй по шестую. В заключении сформулированы основные результаты работы.

Значимыми результатами диссертационной работы являются разработанные уникальные полномасштабные модели четырех типов ГХО реакторов, проведенные систематические расчеты различных режимов этих реакторов и впервые полученные детальные пространственно-разрешенные картины основных реакторных процессов и сложных многостадийных конверсий компонент используемых рабочих углеводород-водородных смесей и этих смесей

с добавками благородных газов, кислородных, азотных или борных компонент. Разработанные автором диссертации подходы позволили объяснить целый ряд наблюдаемых эффектов и зависимостей, установить значимую роль ряда неучитываемых ранее процессов, значительно продвинуть уровень понимания процессов активации смесей (выявление и механизмы производства основных газофазных предшественников алмаза) и предсказания эффектов вариации параметров реакторов для актуальной проблемы оптимизации процессов осаждения алмазных пленок, их однородности и скорости.

Разработанные пространственно двумерные и трехмерные модели реакторов подвергались строгой проверке на больших массивах разнообразных, в том числе и пространственно разрешенных, массивах экспериментальных данных с систематическим варьированием параметров реакторов и рабочих смесей. К наиболее интересным результатам следует отнести следующие. В реакторе с СВЧ разрядом обнаружены и описаны три области: центральная, горячая плазменная зона (с температурами газа $2200 < T < 3000$ К и близким к равновесному распределением углеводородных компонент) и две полусферические кольцевые оболочки, ближайшая к плазменной зоне с преимущественной конверсией метана в ацетилен с расходом N атомов (при температурах газа $1400 < T < 2200$ К) и внешняя холодная оболочка с обратной конверсией ацетилена в метан (активированной атомами водорода при пониженной температуре $500 < T < 1400$ К). В этом же реакторе исследовано изменение параметров плазмы, концентраций компонент, потоков тепла на стенки и подложку при разбавлении рабочей CH_4/H_2 смеси буферным газом аргоном в широком диапазоне вплоть до 98.5%Ar. Получена оценка предела вложенной мощности для реактора заданного объема, рассчитаны потоки радикалов на подложку для разных режимов осаждения алмазных пленок от ультрананокристаллических до монокристаллического алмаза, критически проанализирована теория роста ультрананокристаллических алмазных пленок из молекул C_2 .

Для реактора с дуговым плазмотроном построенная модель позволила установить неизвестные ранее входные параметры горячей плазменной струи и ее распад в камере реактора, обнаружить ряд эффектов (разделения содержания компонент N и Ar в зоне ударной волны за счет бародиффузии, излучения плазмы в результате химической люминесценции и диссоциативной электрон-ионной рекомбинации), объяснить неожиданное падение на порядки измеряемой линейной плотности $N(n=2)$ при увеличении доли водорода в N/Ar смеси, а также эволюцию параметров плазменной струи, обеспечивающую наблюдаемые скорости роста алмазных пленок порядка 100 мкм/ч и измеряемые концентрации электронов.

Детальные механизмы активации базовых CH_4/H_2 смесей получены для реакторов ГХОГН (для варьируемых параметров и геометрии реакторов) и ГХОРПТ (с расчетом 2-D распределений электрических полей и концентраций компонент для разных межэлектродных зазоров и смесей). В проблеме легирования алмазных пленок выявлены основные меха-

низмы активации в реакторах ГХОГН $\text{CH}_4/\text{NH}_3/\text{H}_2$ смесей (с наработкой заметных концентраций атомов азота и HCN) и $\text{CH}_4/\text{B}_2\text{H}_6/\text{H}_2$ смесей (с наработкой атомов бора). Двухстадийный механизм каталитической диссоциации молекул H_2 и N_2 на поверхности горячей нити совместно с развитой аналитикой и 2-D модельными расчетами позволил объяснить наблюдаемые зависимости концентраций H и N атомов от давления газа и температуры горячей нити.

Разработанные и реализованные численные методики, модели и результаты моделирования реакторов открывают новые возможности более глубокого анализа и оптимизации сложных реакторных систем с широкой вариацией плазменных условий и параметров реагирующих потоков.

Работа не лишена некоторых недостатков. Замечания следующие:

1. Разработанная модель реактора ГХОСВЧР требует знания не всегда доступных параметров (размеров плазменной области), что снижает общность модели.
2. В главе 3 вместо аналитического решения упрощенных уравнений баланса атомов и уравнения теплопроводности можно было бы промоделировать около нитевую область на мелкой сетке с использованием развитой многомерной модели.
3. В главе 6 экспериментальный реактор ГХОСВЧР не является строго цилиндрически симметричным из-за системы подачи и откачки газа. Насколько применяемая 2-D(r,z) модель может исказить картину процессов реактора реальной 3-D геометрии и не следовало бы попытаться учесть 3-D эффекты в расширенной модели с расчетом азимутальной неоднородности?

Однако данные замечания носят частный характер и не влияют на общую положительную оценку работы. Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации.

Автор диссертации создал и развил целое направление компьютерного (2-D и 3-D) моделирования реакторов газофазного химического осаждения тонких пленок с согласованным учетом плазмохимии сложных реакционных газовых смесей и комплекса сопутствующих физических газофазных и гетерогенных процессов. Результаты диссертационной работы могут использоваться в научно-исследовательских и проектных организациях, работающих в области физики низкотемпературной плазмы, физической химии и применения химических реакторов (Институт Прикладной Физики РАН, Институт Общей Физики РАН, Объединенный Институт Высоких Температур РАН, НИЦ «Курчатовский институт», Физический Институт РАН, Институт Нефтехимического Синтеза РАН, Московский Физико-технический Институт, МГУ им. М.В. Ломоносова, Московский Радиотехнический Институт РАН и др.).

Диссертация Манкелевича Юрия Александровича «Плазменно и термически стимулированное осаждение алмазных пленок: многомерные модели химических реакторов» соот-

ветствует п.п. 9-11 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением № 842 Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года, и требованиям предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы. Ее автор Манкелевич Юрий Александрович заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация представлена и обсуждена на заседании семинара Центра физико-химических технологий НИЦ «Курчатовский институт» 21 Января 2014. На семинаре присутствовало 12 человек.

Отзыв составил

Главный научный сотрудник ЦФХТ
НИЦ «Курчатовский институт»,
доктор физико-математических наук



Шолин Г.В



Учёный секретарь ЦФХТ
НИЦ «Курчатовский институт»



Лагутин А.С

