



Statusgespräch 3 : Vorstellung der Projektfortschritte

Jürgen Geiser

12. März 2008

Humboldt Universität zu Berlin
Institut für Mathematik

Unter den Linden 6, D-10099 Berlin, Deutschland.

Übersicht

Fortschritte des Arbeitspaketes der Modellierungs- und Simulationsgruppe

- 0) Modellierung
- 1) Simulation von Makro- und Mikroskalenmodelle
- 2) Optimierung der Oberflächenbeschichtung
- 3) Veröffentlichungen
- 4) Ausblick für weitere Arbeiten

Modellierung

Im Bereich des Modellierung wurden die makro- und mikroskopische Modelle weiter diskutiert :

- Quellen im Makroskopischen Modell
- Reaktionen im mikroskopischen Modell

Makroskopisches Modell

Im makroskopischen Modell wurden die unterschiedlichen Quellen simuliert :

$$\partial_t u + v \nabla u - \nabla D \nabla u = -\lambda u + u_{sources} , \text{ in } \Omega \times [0, T] \quad (1)$$

$$u(x, 0) = 0 , \text{ in } \Omega , \quad (2)$$

$$u(x, t) = u_{outflow}(x, t) , \text{ on } \partial\Omega \times [0, T] , \quad (3)$$

where $u_{sources}$ are point, moving point, discontinuous and line sources.

Mikroskopisches Modell

Im mikroskopischen Modell wurden die chemischen Reaktionen erweitert, diese kommen bei dem PVD (Sputter-Verfahren) vor, vgl. [Christie 2005].

Mikroskopisches Modell

Dabei gibt es folgende Reaktionen

$$\partial_t c_{tot} = -\lambda_1 c_{tot}, \quad (4)$$

$$\partial_t c_A = \lambda_1(1 - \beta) c_{tot}, \quad (5)$$

$$\partial_t c_B = \lambda_1 \beta c_{tot} - \lambda_2 c_B, \quad (6)$$

$$\partial_t c_C = \lambda_2(1 - \sigma) c_B - \lambda_3 c_C, \quad (7)$$

$$\partial_t c_D = \lambda_2 \sigma c_B, \quad (8)$$

$$\partial_t c_E = \lambda_3(1 - \eta) c_C, \quad (9)$$

$$\partial_t c_F = \lambda_3 \eta c_C, \quad (10)$$

wobei c_{tot} is die gesamt Masse von der Quelle und c_A , c_B , c_C , c_D and c_F sind die Zwischenprodukte der Partikel. Dabei sind die Produkte c_A und c_F welche an dem Ziel (Metallische Platte) enden.

Simulationen

Programmpakete :

- Transportproblem (Far Field) : UG Programmpaket (Simuliert das Strömungsfeld des Gases), hier arbeitet der Wissenschaftler Meraa Arab (seit Januar 2008).
- Chemische Reaktionen (Far Field) : Matlab (Waveform-Relaxation Methoden für die Reversiblen Prozesse), hier arbeitet der Student Robert Röhle seit November 2007.

Simulationen

- Schwerteilchentransport (Near Field) : Matlab (Nichtlineare stark gekoppelte Momentengleichungen), hier arbeitet der Student Jammeshan seit Februar 2008.
- Optimierung des Teilchentransport : Matlab (Lineare Optimierung mit PID-Reglern), hier arbeitet der Student Fleck seit Januar 2008.

Makrooskala (Far Field)

Mit der Projektgruppe wurde im letzten Statusgespräch weitere Ideen besprochen, z.B. Geometrische Anordnung der Quellen, langsame und schnelle Reaktionen der Materialien, z.B. Kohlenstoff ist schneller und reagiert heftiger. Diese Ideen wurden in Simulationen eingebracht und von Herrn Arab werden nun einzelne Projekte abgearbeitet :

- 1: Optimierung der homogenen Schicht
- 2: Optimierung der korrekten Vermischung (3 Ti, 1 Si, 2 C)
- 3: Optimierung der Quellen für kompliziertere Geometrien

Optimierung des Transports

Wir haben mehrere unterschiedliche Quellenmodelle simuliert :

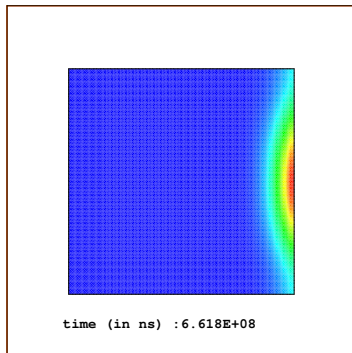
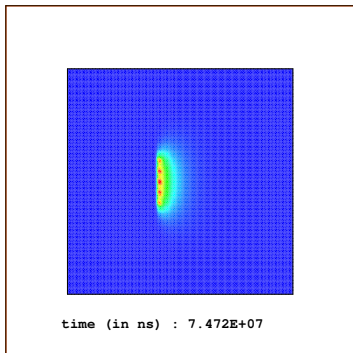


Abbildung: Fünf Punktquellen: y Richtung mit Schrittweite 10, $x = 50$.

Die Abbildung 2 präsentiert die Ablagerungsrate mit den fünf Punktquellen.

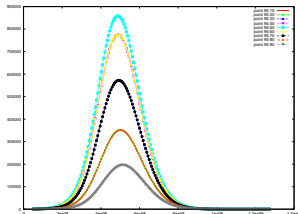


Abbildung: Fünf Punktquellen: Ablagerungsrate.

Macroscopisches Modell

In Bild 3 präsentieren wir die Flächen- oder Linienquelle.

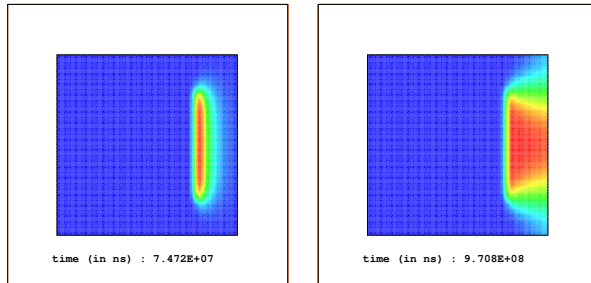


Abbildung: Flächenquelle: x zwischen 75,80 und y zwischen 20,80.

Macroscopic Simulations

In Bild 4 präsentieren wir die Ablagerungsrate der Flächen- oder Linienquelle.

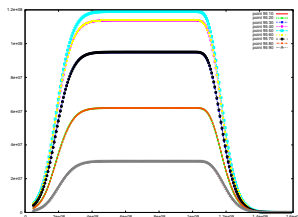


Abbildung: Ablagerungsrate der Linienquelle

Veröffentlichungen (Preprints)

- 1) J. Geiser
Modelling for Chemical Vapor Deposition: Meso- and
Microscale Model.
Preprint No. 2008-01 of the Humboldt University of Berlin,
Department of Mathematics, Germany, 2008.
- 2) J. Geiser
Discretization methods with analytical solutions for a
convection-reaction equation with higher-order
discretizations.
International Journal of Computer Mathematics, Taylor and
Francis, New York, accepted December 2007.

Projekte

- 1) Prof. Peter Schaaf, Universität Göttingen
Modellierung im Bereich der MAX-Phase Materials
Zusammenarbeit mit dem Doktorand Chr. Lange
- 2) Prof. Michel Barsoum, Drexel University, Philadelphia, USA
Modellierung und Literatúraustausch
Besuch von Prof. Barsoum ist angedacht, ev. Einladung zu einem Minisymposium.

Ausblick

Ausblick für weitere Arbeiten

- 1) Projekt 2 : Mischung der 3 Materialien (Optimale Vermischung).
- 2) Projekt 3 : Geometrieanpassung mit den einfachen dünnen Kanälen
- 3) Optimierung des Wachstums (PID-Regler für das Makromodell)
- 4) Ausbau des Mikromodells: Weitere Ansätze mit Massen- und Impulsgleichung, einfaches Mikromodell
- 5) Präsentation der ersten Arbeiten auf der AIMS08, Arlington, Texas, USA.