

行政院原子能委員會
委託研究計畫研究報告

電漿熱流分析研究

Study of thermal analysis for plasma

計畫編號：992001INER036

受委託機關(構)：國立成功大學

計畫主持人：林仁輝

核研所聯絡人員：梁文龍

聯絡電話：06-2757575-62155

E-mail address：jflin@mail.ncku.edu.tw

報告日期：中華民國 99 年 11 月 23 日

目 錄

目 錄.....	I
圖 目 錄.....	III
表 目 錄.....	IV
中文摘要.....	1
英文摘要.....	2
壹、計畫緣起與目的.....	3
一、計畫緣起.....	3
二、研究目的.....	4
三、研究內容.....	4
四、文獻回顧.....	5
貳、研究方法與過程.....	6
一、基礎理論.....	7
(一)電漿原理與特性.....	7
(二)電漿形成機制.....	7
(三)電漿電磁場理論與控制方程式.....	10
(四)統御方程式.....	12
二、數值模擬.....	14
(一)模擬流程.....	14
(二)物理模型與假設.....	15
(三)邊界條件與材料參數.....	17
三、最佳化分析.....	21
(一)實驗計劃法之基礎理論.....	21

(二) 應答曲面法 (Response Surface Method)	23
(三) 最佳化過程.....	25
參、主要發現與結論.....	29
一、不同電磁條件對電漿腔體內熱流場之影響.....	30
(一) 系統內電場分佈情況.....	30
(二) 系統內熱流場分佈情況.....	34
二、不同腔體尺寸對電漿腔體內熱流場之影響.....	36
三、最佳化之腔體尺寸與參數及其應答曲面圖.....	38
(一) 初步最佳化：找其主導因素.....	38
(二) 腔體尺寸與參數最佳化及其應答曲面.....	39
(三) 模擬驗證.....	42
四、結論.....	45
肆、參考文獻.....	46

圖 目 錄

圖 2-1 直流放電型態圖.....	8
圖 2-2 非傳輸型電弧電漿火炬示意圖.....	9
圖 2-3 程式計算流程圖.....	15
圖 2-4 計算模型之幾何尺寸.....	16
圖 2-5 數值模型的網格分佈.....	16
圖 2-6 計算模型之邊界.....	18
圖 2-7 控制體積範圍示意圖.....	18
圖 2-8 應答曲面示意圖.....	23
圖 2-9 應答曲面理論示意圖.....	25
圖 2-10 進行最佳化之五個因素.....	26
圖 3-1 電位差為 3V 時之電場強度圖.....	31
圖 3-2 電位差為 0V 時之電場強度圖.....	31
圖 3-3 電位差為-2V 時之電場強度圖.....	32
圖 3-4 電位差為 3V 時之焦耳熱作用圖.....	32
圖 3-5 電位差為 0V 時之焦耳熱作用圖.....	33
圖 3-6 電位差為-2V 時之焦耳熱作用圖.....	33
圖 3-7 電位差為 3V 時之溫度分佈圖.....	34
圖 3-8 電位差為 0V 時之溫度分佈圖.....	35
圖 3-9 電位差為-2V 時之溫度分佈圖.....	35

圖 3-10 噴嘴與靶材間距為 0.024m 時之腔體溫度分佈圖.....	36
圖 3-11 噴嘴與靶材間距為 0.027m 時之腔體溫度分佈圖.....	37
圖 3-12 噴嘴與靶材間距為 0.03m 時之腔體溫度分佈圖.....	37
圖 3-13 五個因素在實驗中所佔之權重.....	39
圖 3-14 欲進行最佳化分析之兩因素.....	40
圖 3-15 兩個因素三個水準所構成之九組實驗.....	40
圖 3-16 計算所得之權重.....	41
圖 3-17 最佳化過程中所得之應答曲面圖 1.....	41
圖 3-18 最佳化過程中所得之應答曲面圖 2.....	42
圖 3-19 最佳腔體尺寸及設定參數所得之流場溫度分佈圖.....	43
圖 3-20 最佳腔體尺寸及設定參數所得之電場圖.....	44
圖 3-21 最佳腔體尺寸及設定參數所得之焦耳熱作用圖.....	44

表 目 錄

表 2-1 邊界條件之設定.....	19
表 2-2 氮氣物理性質表.....	20
表 2-3 銅物理性質表.....	20
表 2-4 不銹鋼物理性質表.....	21
表 2-5 五個因素兩水準之數值表.....	26
表 2-6 五個因素兩水準構成 32 組實驗.....	26

中文摘要

本研究針對電漿輔助化學氣相沉積之鍍膜系統整體進行熱流模擬及分析；著眼點在忽略其中化學及電漿效應的情況下，利用計算流體力學軟體 Ansys-Fluent 進行流場、溫度場之計算研究。在數值方法上聯立求解連續方程式、動量方程式、能量方程式以及電位能方程式，來求得電漿腔體內流場與溫度場；並探討不同電磁強度及腔體尺寸下對電漿熱流場的影響。利用電腦模擬結果進行參數最佳化，能夠使靶材面溫度分佈均勻。本計畫之模擬結果可作為電漿腔體設計之參考。

Abstract

This project analyzed the temperature distribution for plasma enhanced chemical vapor deposition (PECVD) systems via numerical simulations. Under ignoring plasma and chemical reaction effects, the velocity and temperature solutions were numerically simulated using Ansys-Fluent package. First for the mass transfer, the numerical simulations solve velocity fields by the momentum equation. After that, the temperature fields are solved in the use of velocity solutions. The temperature results were then applied into optimization process with response surface method. The temperature simulation using the optimal parameters confirmed the predicted results. The results provided in this project can be useful for the PECVD chamber design.

壹、計畫緣起與目的

一、計畫緣起

自從真空蒸鍍設備被開發出來，在真空環境中將各種不同材料沉積在基板表面的技術蓬勃且多元地進步，也引發了薄膜複合材料的廣泛應用與深度研究[1]。在成膜的技術方面，目前主要有濺鍍、蒸鍍、熱氧化、沉積、塗佈等；其中化學氣相沉積由於具備多方面的優點，在半導體、光電、太陽能晶片等相關產業的製程中被大量地使用[2]。利用電漿來輔助化學氣相沉積，使其反應所需的活化能主要來自外加射頻電源；使反應氣體離子化並產生輝光，藉活性的反應基加速反應而達成沉積固體薄膜的目的。因此電漿輔助化學氣相沉積中化學反應所需的能量主要來自電漿催化而非熱能，故而相較於化學氣相沉積能在較低溫的情況下成長薄膜。低溫成膜是一個極大的製程優點；高溫下容易破壞元件而限制基板的選擇範圍，除此之外製程中也會造成較大的殘餘應力。整體而言，電漿輔助化學氣相沉積的製程大致具有下列優點：可以沉積在熔點低的基板上、薄膜厚度有較佳的均勻度、沉積速率快、成膜覆蓋性佳、孔隙密度與顆粒尺寸低、平整度良好等。由於低溫特性，電漿製程也應用在生醫材料的製作方面；電漿可用於矽膠或多種高分子表面處理，再以化學反應固定生醫相容性的蛋白質或功能性分子[3-5]。無疑地，成膜溫度的下降是電漿製程應用範圍的重要指標；因此熱流分析、

腔體設計必是製程開發重要且關鍵的一環。基於此，本研究將利用數值模擬建立電漿製程腔體的熱流分析模型，計算成膜溫度；在此熱流分析模型的基礎上，探討各種電漿製程腔體結構的熱、質傳效應以作為設計參考。

二、研究目的

雖然電漿輔助化學氣相沉積相較於化學氣相沉積能在較低溫的情況下成長薄膜，但由於電漿源產生過程中依然會使電漿成膜溫度升高，此熱流問題在電漿製程中容易造成較大的殘餘應力及破壞元件而限制基板的選擇範圍。故本研究擬以計算流體力學軟體進行系統的熱流分析評估，並利用實驗計畫法之理論最佳化此電漿腔體結構與製程參數，提出有效降低腔體溫度與均勻靶材面溫度分佈之解決方法，做為電漿腔體設計之參考。

三、研究內容

本研究利用計算流體力學軟體Ansys-Fluent模擬高溫電弧電漿在腔體內之溫度及速度分佈，藉由使用者定義函數（UDF）掛載MHD模組，計算求得電漿中的電磁場強度；再根據計算結果代入流場之統御方程式進行電漿速度場與溫度場的計算，並探討不同電漿腔體尺寸與邊界條件對於靶材面上熱流分佈所造成之影響。最後利用實

驗計畫法中應答曲面之理論基礎來最佳化此電漿腔體結構與製程參數，提出有效降低腔體溫度與均勻靶材面溫度分佈之解決辦法。

四、文獻回顧

對於應用電漿技術的製程而言，電漿本身的流場特性是製程中一個極為重要的參數。因此為了了解電漿的流場特性，許多國內外學者利用數值模擬的方式進行研究與討論。學者McKelliget[6]在1982年首先利用K- ϵ 模型進行模擬非傳輸型電弧電漿的二維流場之計算；文中利用原子放射光譜量測電漿之溫度，並比較計算結果與量測值之誤差來印證模擬結果的正確性。但由於在模擬過程中必須以噴嘴出口處的溫度及速度當做邊界條件，這會使得模擬結果受到邊界條件的限制而產生誤差；另外在Dilawari及Lee等學者[7,8]的研究中亦有此問題的存在。

1989年Scott[9]利用電磁流體力學(Magnetohydrodynamics, MHD)之理論結合K- ϵ 模型進行包含噴嘴出口外的自由噴流區、噴嘴內部電弧及電漿產生區的非傳輸型電漿火炬模擬；此模擬解決了邊界條件對於模擬結果的限制問題，因而增加了模擬的精確性。Westhoff等學者[10]在1991年模擬電漿火炬中的速度場、溫度場以及電磁場時發現，依據不同的電流密度，電漿流場中的速度及溫度會受到不同程度的勞倫茲力(Lorentz force)以及焦耳熱(Joule heat)的影響

而變化，因此理解了電磁場效應在電漿流場中所給予的影響。

在進行傳輸型與非傳輸型直流電漿火炬之模擬時，陽極電弧弧根位置的決定，是很重要的一項工作。因此Paik等學者[11]在1993年進行了二維非傳輸型電弧電漿的模擬研究，利用Steenbeck最小法則來判定陽極電弧根部位置。研究結果顯示：當增加電漿中氣體的流量時，會因為氣流所產生的拖曳力而導致電弧弧根的位置往下游的方向移動；當增加電漿電流時，其電弧弧根的位置會因為受到電漿電磁場的影響而往上游的方向移動。

1996年時Nishiyama[12, 13]針對直流電弧電漿與射頻電漿混合之電漿反應器進行流場模擬，由模擬結果可知此反應器所呈現的電漿溫度場最高溫可達10000K以上，且噴流速度在調頻線圈之作用下可達2000 m/s以上。另外學者Zagorski[14]利用模擬熱噴塗製程中的電漿速度場與溫度場之控制項，計算電漿狀態下粒子的運動和熱傳的變化，進而討論在電漿製程中粒子的尺寸、溫度及運動軌跡對鍍製薄膜結構的影響。因此本研究將針對電漿輔助化學氣相沉積之鍍膜系統整體進行熱流模擬及分析；著眼點在忽略其中化學及電漿效應的情況下，探討整體腔體與製程參數之設計與靶材面上所受熱流分佈均勻性之評估。

貳、研究方法與過程

一、基礎理論

(一)電漿原理與特性

當氣體處於一高溫度或高熱通量之下，此物質會利用此高熱能發生游離化過程，此種游離化過後之物質狀態稱為電漿(plasma)或離子氣體(ionized gas)。基本上電漿是由離子、電子與中性粒子所組成，為物質之第四態。由於電子的質量相較於其他粒子較小，在電漿形成的初始階段電子與其他粒子的動能轉換較低，使得電漿中的氣體溫度(T_g)幾乎維持常溫；但因為電子本身受到環境電磁場之影響而加速運動，動能增加導致溫度上升，所以電漿內的電子溫度(T_e)高於氣體溫度，即為俗稱的冷電漿或非平衡電漿。隨著電磁場效應的增加，電子與其他粒子(中性粒子與離子)的碰撞次數與頻率會增加，造成動能的相互轉移，進而使氣體溫度上升；最終氣體溫度與電子溫度會達到熱力平衡狀態，此時的電漿狀態稱為熱電漿或平衡電漿[15]。

(二)電漿形成機制

電漿的生成方式分為高週波放電和直流放電兩種；其中直流放電的原理是在兩電極板間通以高壓來產生電流，此過程大致可分為三階段，如圖2-1所示[16]：

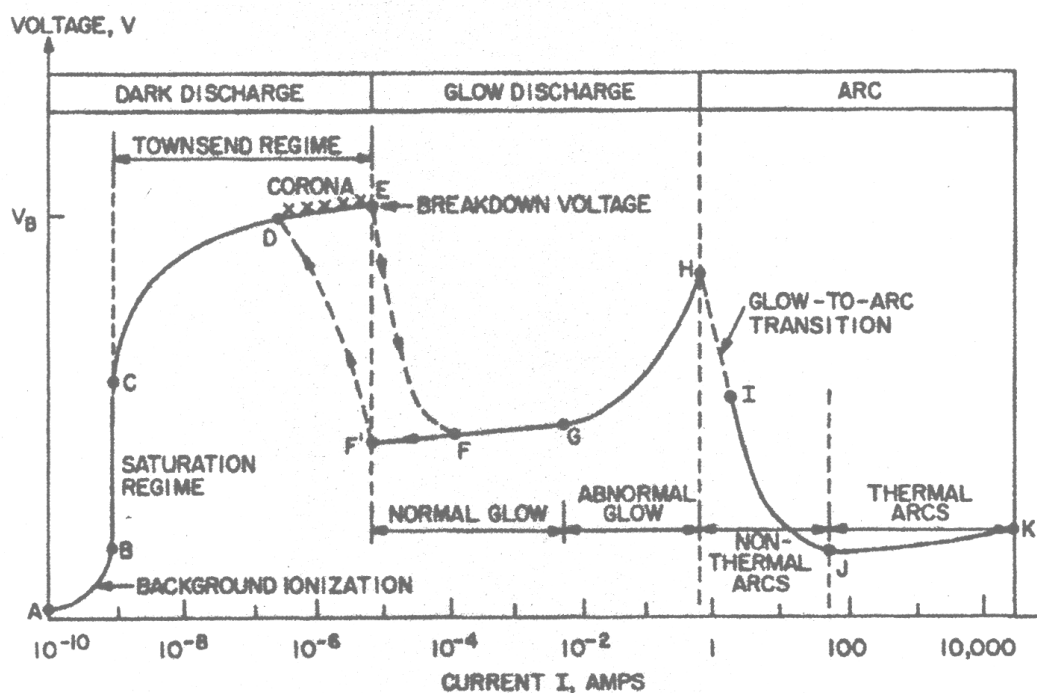


圖2-1 直流放電型態圖[16]

1. 湯生放電 (Townsend)：兩電極板通電後的初始階段，由於電壓較低，電子的動能還不足以使氣體發生離子化的現象，因此此時系統中的離子化程度很低，尚未有輝光產生。
2. 輝光放電 (glow discharge)：隨著電流密度的逐漸增加，離子碰撞陰極的次數也會增加，因此會使離子化的程度增加以及兩電極間的電阻降低和電壓下降（如圖2-1中，EF線段所示）。此時處在激發態的分子開始透過碰撞將能量轉移出去，而回到基態並放射出穩定的特定可見光，故稱為輝光放電。
3. 電弧放電：當電流密度持續的提升，則電壓開始隨便電流的增加而提升（如圖2-1中，GH線段所示）。此時陰極由於受到離子的

強烈撞擊而放射出大量的電子，溫度也因此大幅增加。受到電子密度增加的影響，兩電極間的電阻劇烈下降，因此形成了負電阻的情況（如圖2-1中，HJ線段所示）。此時處在高溫的陰極會放射出亮光，這稱為電弧。電弧放電會產生熱電漿，氣體的溫度接近於電子溫度（ 5000°C ）。

直流電弧電漿可依電極的結構分為兩種型式：傳輸型電弧電漿和非傳輸型電弧電漿。在本研究中所採用的電極模擬方式為非傳輸型電弧電漿產生源，如圖2-2所示：

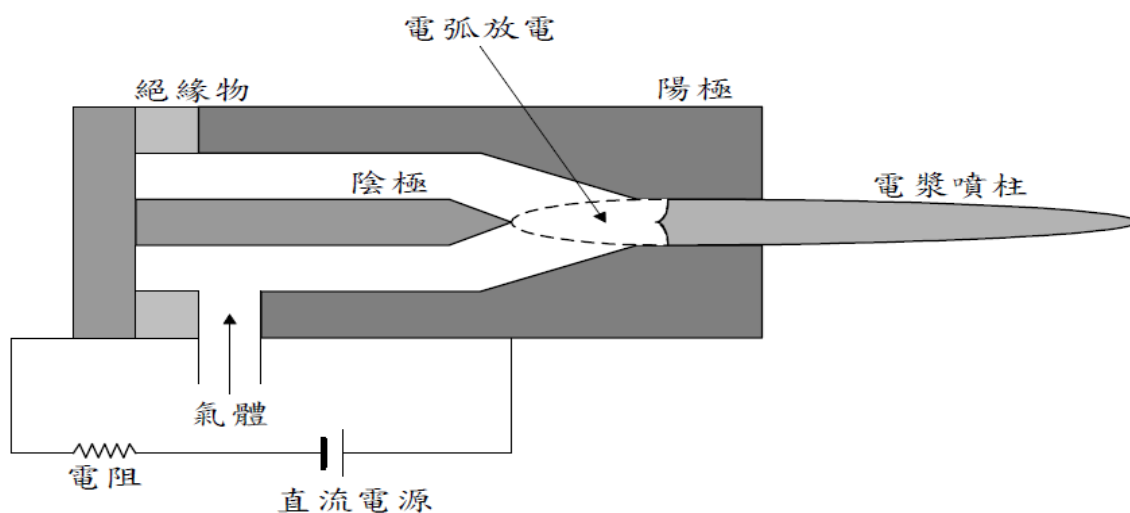


圖2-2 非傳輸型電弧電漿火炬示意圖

正負電極皆位於產生源本體上，通常以鎢或銅材質之金屬棒以及噴嘴分別當作陰極和陽極，當兩電極間產生電弧電漿後再藉由高壓氣體將電漿吹出，並可利用氣壓和電流的調整來控制輸出功率。

(三)電漿電磁場理論與控制方程式

分析電漿系統內熱流場之根據是利用電磁流體力學與熱力學之理論基礎，使系統在控制體積法之條件下滿足質量守恆、動量守恆與能量守恆等統御方程式。另外，依據電磁流體力學可知主導流場與電磁場間的相互影響因素為（1）導電流體在電磁場中運動所引起的誘發電流。（2）系統中電流和磁場間相互影響下所產生的勞倫茲力（Lorentz force）。

系統中的電磁場可藉由馬克斯威爾方程式（Maxwell's equations）來聯立求得[17~18]：

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2-1)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2-2)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = q \quad (2-3)$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2-4)$$

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_m} \cdot \vec{B} \quad (2-5)$$

$$\vec{D} = \epsilon_e \cdot \vec{E} \quad (2-6)$$

其中

\vec{B} ：磁場強度

\vec{E} ：電場強度

\vec{D} ：導電場

\vec{H} ：導磁場

q ：電荷密度

\vec{j} ：電流密度向量

μ_m ：導磁係數 (magnetic permeability)

ϵ_e ：介電係數 (electric permeability)

由電磁流體力學可知，判定流場與電磁場的交互關係，必須先求解系統之電流密度；而電流密度可由導磁方程式 (magnetic induction equations) 或是電位能方程式 (electric potential equations) 求得。

(1) 導磁方程式 (magnetic induction equations)

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + (\vec{U} \cdot \nabla) \vec{B} = \frac{1}{\mu_m \sigma} \nabla^2 \vec{B} + (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{U} \quad (2-7)$$

其中

σ ：電導率 (electrical conductivity)

導磁方程式是馬克斯威爾方程式與歐姆定律聯立所得的表示式；利用導磁方程式先求得磁場強度後，可再利用安培定律計算出電流密度，公式如 (1-8) 所示。

$$\vec{j} = \frac{1}{\mu_m} (\nabla \times \vec{B}) \quad (2-8)$$

(2) 電位能方程式 (electric potential equations)

$$\nabla^2 \varphi = \nabla \cdot (\vec{U} \times \vec{B}_0) \quad (2-9)$$

其中

φ : 純量位能 (scalar potential)

\vec{U} : 速度向量

\vec{B}_0 : 外加磁場強度

在假設系統處於穩態磁場 (steady magnetic field) 以及導磁場遠小於外加磁場之條件下，將電場表示式聯立歐姆定律與電荷守恆定理可得電位能方程式與電流密度表示式：

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} = \sigma (-\nabla \varphi + \vec{U} \times \vec{B}_0) \quad (2-10)$$

本研究是利用以上所論述之電磁方程式來計算系統中的電磁場分佈情況，之後再代入電漿流場之質量、動量與能量方程式，相互疊代直至收斂獲得流場與電磁場之共同解。

(四) 統御方程式

(1) 連續方程式 (continuity equation)

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho r v)}{\partial r} = 0 \quad (2-11)$$

其中

u : 軸向速度分量

v : 徑向速度分量

ρ : 流體密度

(2) 電流連續方程式 (current continuity equation)

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\sigma \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \sigma \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = 0 \quad (2-12)$$

(3) 動量方程式 (momentum equation)

軸向 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u^2)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho r u v)}{\partial r} = \\ - \frac{\partial P}{\partial z} + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] + q E_z \end{aligned} \quad (2-13)$$

徑向 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u v)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho r v^2)}{\partial r} = \\ - \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right] + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(\frac{\partial v}{\partial r} \right) \right] - \mu \frac{2v}{r^2} - q E_r \end{aligned} \quad (2-14)$$

(4) 能量方程式 (energy equation)

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u h)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho r v h)}{\partial r} = \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{k}{C_p} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r k}{C_p} \frac{\partial h}{\partial r} \right) + \frac{j_z^2 + j_r^2}{\sigma} - S_R \\ + \frac{5}{2} \frac{k_b}{q} \left(\frac{j_z}{C_p} \frac{\partial h}{\partial z} + \frac{j_r}{C_p} \frac{\partial h}{\partial r} \right) + u \frac{\partial P}{\partial z} + v \frac{\partial P}{\partial r} \end{aligned} \quad (2-15)$$

其中

h ：系統焓 (enthalpy)

C_p ：比熱

k_B ：波茲曼常數 (1.38065×10^{-23} J/K)

j_r ：徑向電流密度

j_z ：軸向電流密度

二、數值模擬

(一) 模擬流程

本研究首先利用數值模型繪製軟體 GAMBIT 建立計算電漿火炬與腔體模型的幾何外觀及作網格畫分，再使用計算流體力學軟體根據流體力學控制體積之求解理論進行材料與邊界條件之設定，聯立求解連續方程式、動量方程式、能量方程式以及電位能方程式，並考慮紊流效應下之流場影響以求解電漿腔體內速度場和溫度場之分佈。

在模擬時首先會求解系統的動量方程式以獲得流場速度值，再由求得之速度值求解質量方程式，進而得到流場內壓力分佈；之後再將求解值與邊界條件代入能量方程式及電位能方程式求得系統的溫度場及電磁場分佈。最後依據計算的結果更新流場內之物理參數來判斷計算後的殘值是否符合所設定的收

斂條件，若是計算殘值大於設定收斂值，則軟體會將計算結果疊代回系統之動量方程式持續計算直至收斂為止，程式計算之流程如圖 2-3 所示。

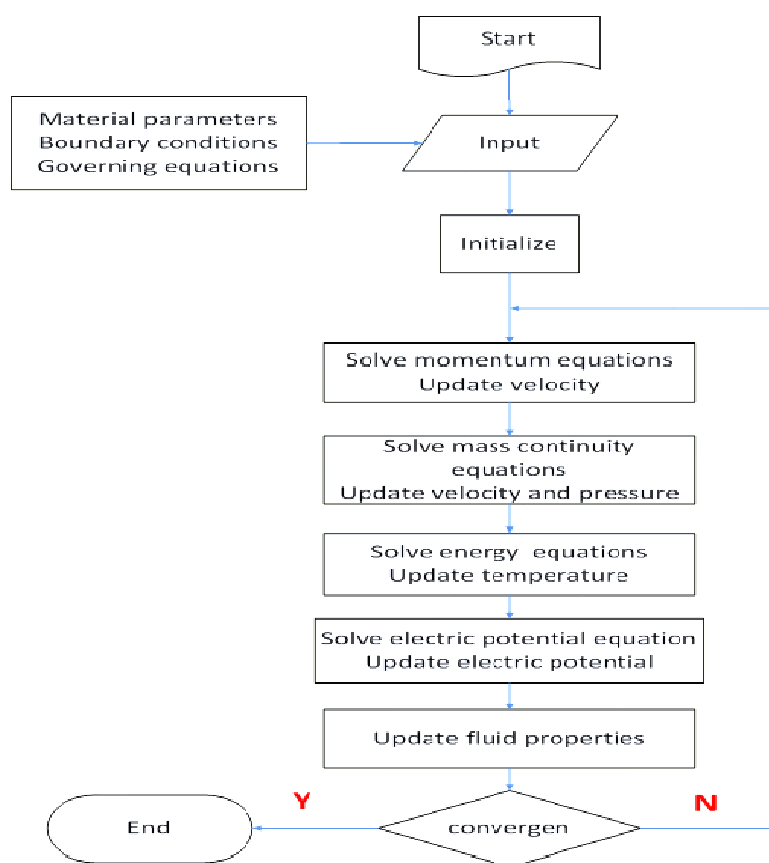


圖2-3 程式計算流程圖

(二)物理模型與假設

由於非傳輸型電漿之電弧產生於噴嘴內部，故在模擬上須考慮噴嘴內部結構與範圍；同時為了避免計算時所發生無法收斂之現象，因此在建構噴嘴模型時做了適當的幾何簡化。簡化後的模型如圖2-4所示。

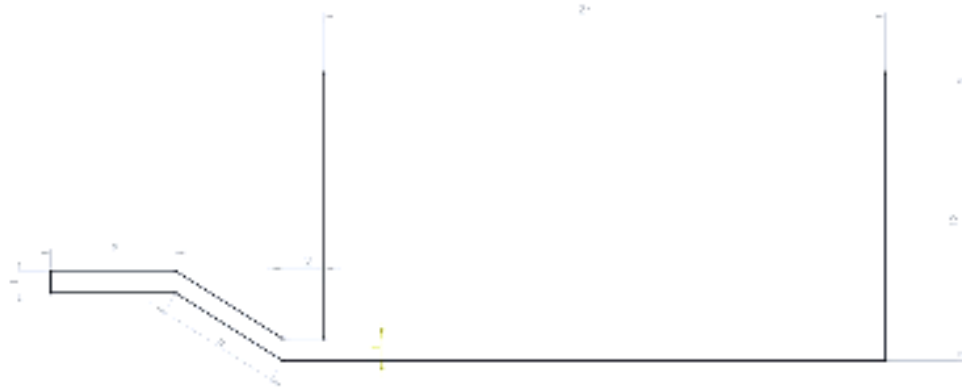


圖2-4 計算模型之幾何尺寸

在計算上較密的網格分佈可使模擬結果的準確性提升，但同時也使計算時間升高許多，而較疏散的網格分佈可節省其計算時間；所以本研究針對重點區域佈以非均勻網格結構以達模擬準確性與計算時間之平衡。所建構出並畫分網格後之模型如圖2-5所示。

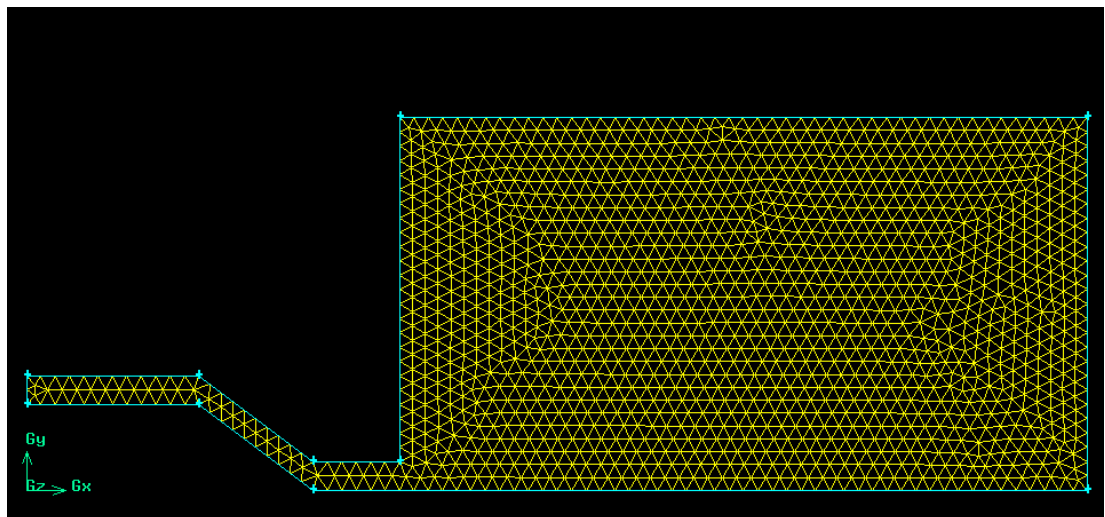


圖2-5 數值模型的網格分佈

其中噴嘴模型是以銅做為電極材料，腔體是以不銹鋼為材料，腔體內部填充之氣體為氮氣；噴嘴出口直徑為1mm，而後進入長達27mm的自由噴流區，藉由文氏管效應將激發之氮離子順利引導至電漿流場中，增加鍍膜的效率。利用此模型進行計算模擬，可成功模擬出電漿在噴嘴與腔體內部所產生之熱能分佈與流動狀況，並由此數據進行電漿熱流場分析，以完成能量在鍍膜沉積過程之溫度累積效應的最佳化設計。在本研究所進行之模擬中，依據電磁流體力學應用於電漿系統之狀態作了以下六點假設：

1. 假設流場為軸對稱。
2. 假設流場內為穩態之紊流，且氣體性質會隨溫度而改變。
3. 流體為可壓縮流，且處於局部熱平衡狀態。
4. 氮氣在入口處僅沿著軸向方向移動，無旋流情形發生。
5. 在系統的能量方程式中，忽略熱輻射所造成的能量損失。
6. 相對於電場強度 E 的影響，因速度所引起的導電場可忽略不計。

(三)邊界條件與材料參數

模擬時邊界設定方式如圖2-6所示。其中，Inlet為噴嘴入口與流體進入端、Cathode1與Cathode2為噴嘴與電極之陰極、Anode1

與Anode2為噴嘴與電極之陽極、Outlet為流體流出端、Wall_Up為電漿腔體之壁面、Wall_Down為放至靶材之腔體壁面以及Axis為模擬軸對稱所必需之中心線。

此種建模方式是為了將腔體底部設定為封閉端，以符合在自由噴流區內電漿無法穿透靶材所產生之流場變化，如圖2-7所示。



圖2-6 計算模型之邊界

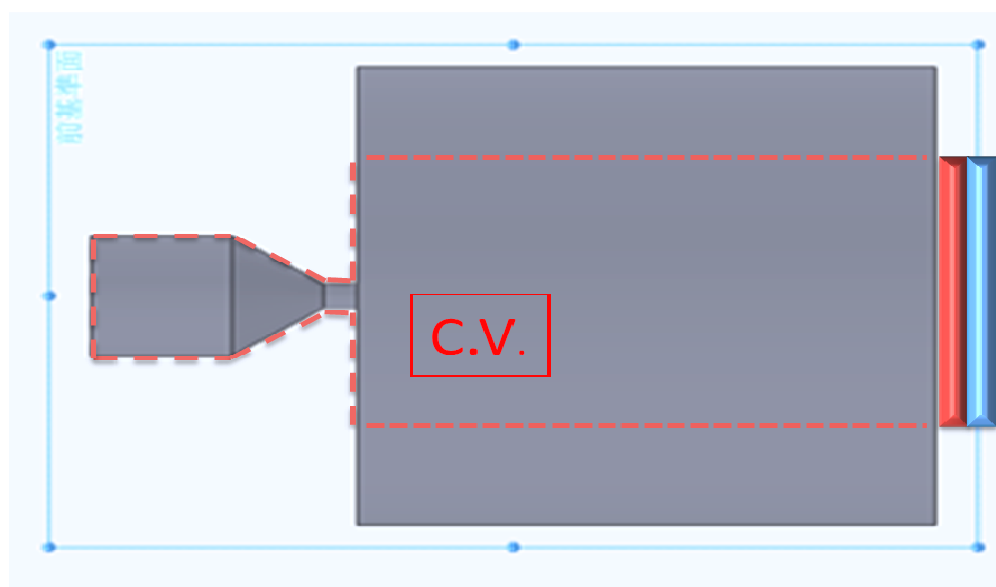


圖2-7 控制體積範圍示意圖

由於非傳輸型電弧電漿噴嘴在電弧產生的部分受到極大電

磁場效應影響，其它部份相較之下所受之電磁場小了許多，故模擬時假設電極壁面上之電位能為常數，腔體壁面部位假設為絕緣狀態。本研究將以不同電位勢在不同電漿腔體尺寸下的計算模擬結果來進行熱流場與電場之比較，並輔以最佳化分析來進行電漿與腔體尺寸之討論；詳細邊界條件與材料參數設定如表2-1至表2-4所示。

而在計算過程中假設氮氣為理想氣體，故密度隨溫度變化之關係式如下：

$$\rho'' = \rho \cdot \frac{R_u}{M_w} \cdot T \quad (2-16)$$

其中

R_u ：通用氣體常數 (8.314 kJ/kmol · K)

M_w ：氮氣莫耳數

表2-1 邊界條件之設定

	T	ϕ	P
Anode	$T=2000K$	Specified value = 9、10、11	
Cathode	$T=3000K$	Specified value = 8	

Inlet	$T=2000K$	Specified flux = 1	2 Pa
Outlet	$T=500K$	Specified flux = 0	0 Pa
Wall_Up	$T=800K$	$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$	/
Wall_Down	$heat\ flux=0$	$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$	
Axis	Axis		

表2-2 氮氣物理性質表

Physical property	Value	Unit
Density	1.138	kg/m ³
C _p	1040.67	J/kg-k
Thermal conductivity	0.0242	W/m-k
Viscosity	1.663 x10 ⁻⁵	kg/m-s
Electrical conductivity	10 ⁶	1/ohm-m

表2-3 銅物理性質表

Physical property	Value	Unit
Density	8978	kg/m ³

C_p	381	j/kg-k
Thermal conductivity	387.6	W/m-k
Electrical conductivity	5.8×10^7	1/ohm-m

表2-4 不銹鋼物理性質表

Physical property	Value	Unit
Density	7818	kg/m ³
C_p	460	j/kg-k
Thermal conductivity	16.9	W/m-k
Electrical conductivity	1.34228×10^4	1/ohm-m
Magnetic permeability	1.257×10^{-6}	h/m

三、最佳化分析

(一)實驗計劃法之基礎理論

實驗計劃法又稱實驗設計 (Design of Experiments) [19]，是一套富有經濟效益的系統性實驗程序，目的在於協助工程師有系統地進行實驗設計與配置，並於實驗完成後利用統計解析，企圖在節省時間以及經費的狀態下執行實驗性研究。因此實驗

計劃法包含二個主要程序，（1）實驗設計：規劃進行最少實驗次數，並期望能獲得充分且重要的實驗數據。（2）結果解析：分析實驗結果以獲取有效且客觀之結論。

以往實驗法經常執行固定環境條件的單一因素實驗，因此獲得的結果僅在這一個環境條件之下所成立；當環境條件改變後是否還能成立相同實驗結果則毫無保證，故其效果缺乏客觀性。另外固定環境條件並不經濟，限制其所有的因素條件幾乎不可能做到。基於此英人費舍（R. A. Fisher）於1920年提出多因素配置的實驗計劃法；他將兩種以上因素同時計劃在一個實驗之內，然後在實驗結果的統計解析過程上把兩個因素的效果用統計的方法加以分離。使用這樣的方法可以把若干因素配置在同一實驗內，進行所謂的多因素實驗，再將結果加以解析以分離各因素在實驗中所占之效果。實驗計劃法的多元配置法，依據不同因素數與不同水準數之搭配，在實驗結果所對應數據內以統計方法找出其規律。

後來實驗計劃法傳至日本後，由於工業界對品質管制的要求，此方法在日本獲得普遍應用。在1950年田口玄一倡導使用直交表的實驗計劃法，並領導一群研究人員開發各種直交表。田口玄一所提出的著眼實驗結果再現性、改進配置實驗伸縮性等作法稱為田口方法，使配置更容易，解析方法更為簡便。

(二) 應答曲面法 (Response Surface Method)

1951年學者Box 和 Wilson [20]首先提出應答曲面法的概念：將操作因素和目標值以曲線擬合、迴歸分析找出其函數關係，並以曲面表示如圖2-8所示。另外他們也提出循著實驗數據分佈的最大傾斜 (steepest ascent) 方向找出影響判斷最佳化與否之數值望的方法。

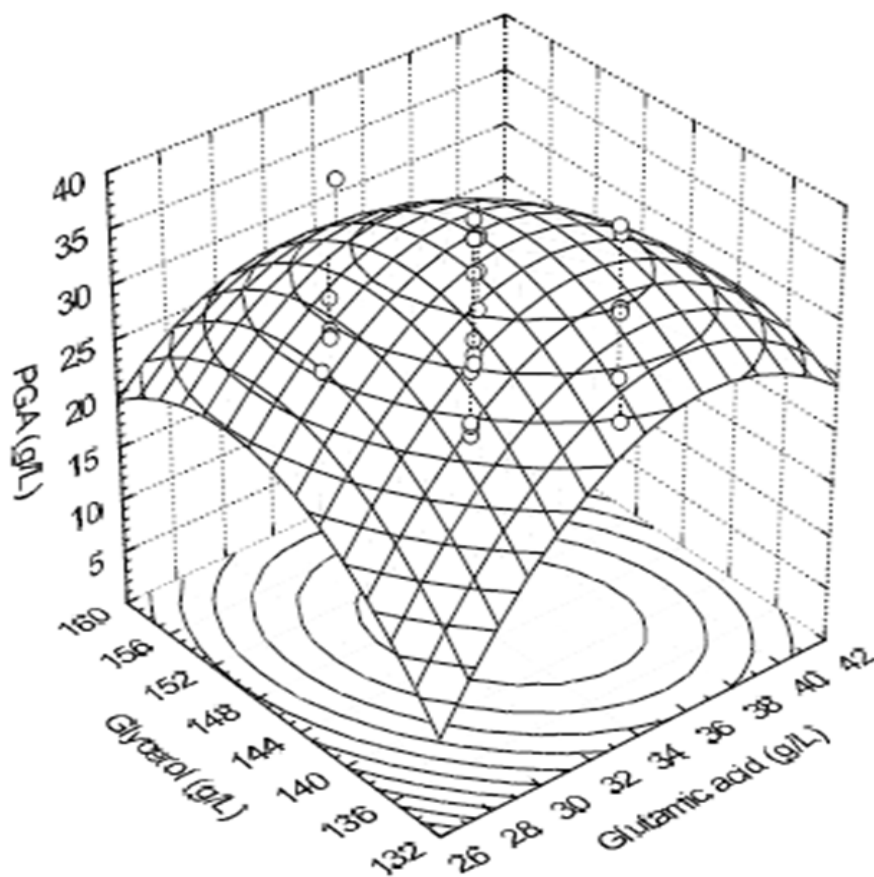


圖2-8 應答曲面示意圖

其方法步驟是先選擇一組實驗條件配置，此配置或許並不接

近最佳點，如圖2-9中的第一點(Design 1);在此局部的曲面(local surface)利用一階模式 $y = \beta_0 + \sum \beta_i x_i$ 描述，然後再由此一階模式找出一最大斜率的方向，使得實驗進行的方向能很快的到達最佳點附近。接著在最佳點附近，經由中心組合法找出完整的二階曲面來描述系統的變化，再配合典型分析(Canonical Analysis)來觀察各因素的變化對曲面的影響情形及找出真正的最佳值。一般而言，應答曲面法具有以下優點如下：

1. 經濟性原則：應答曲面法可以使用部分因子設計或特殊反應曲面設計(如混種設計)，以較少的實驗成本及時間獲得不錯且有效的資訊。
2. 深入探討因子間交互作用影響：應答曲面法可以經由分析與最佳模式來研究因子間的交互作用，並且進而討論多因子對反應變數影響的程度。
3. 獲得最佳化的條件：根據數學理論求得最佳的實驗情況，同時利用最佳反應方程式繪出模式三度空間曲面圖與等高線圖，觀察並分析出最好的操作條件。
4. 減少模擬時間：可獲得模擬獨立變數與反應變數關係之數學模型，藉此將實驗次數及時間降低。

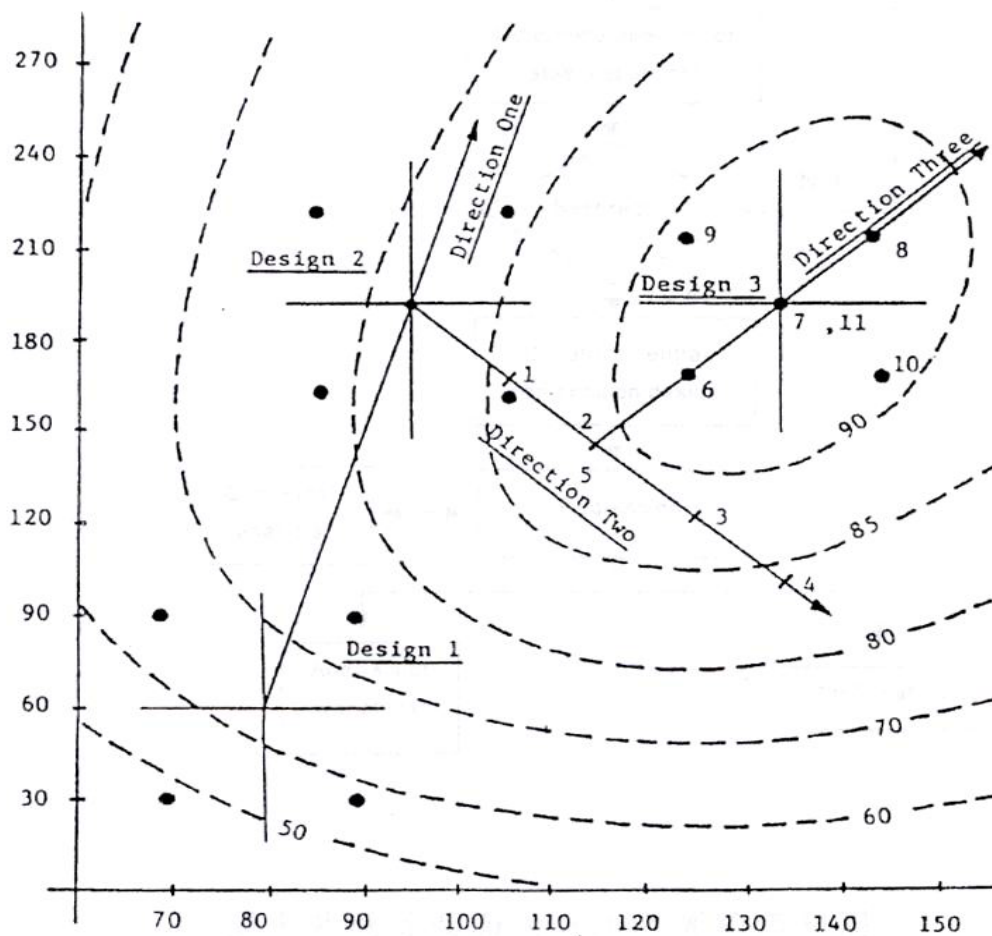


圖2-9 應答曲面理論示意圖[20]

(三)最佳化過程

本研究所模擬之電漿噴嘴與腔體模型尺寸及參數設定等變因許多，故最佳化進行第一步為利用實驗設計法中直交表全因子實驗 (general full factorial design) 所述，由此欲最佳化之問題中擷取出五個因素，並各實施兩個水準，因此全實驗共可搭配成 32 組實驗數，如圖 2-10、表 2-5 和表 2-6 所示。

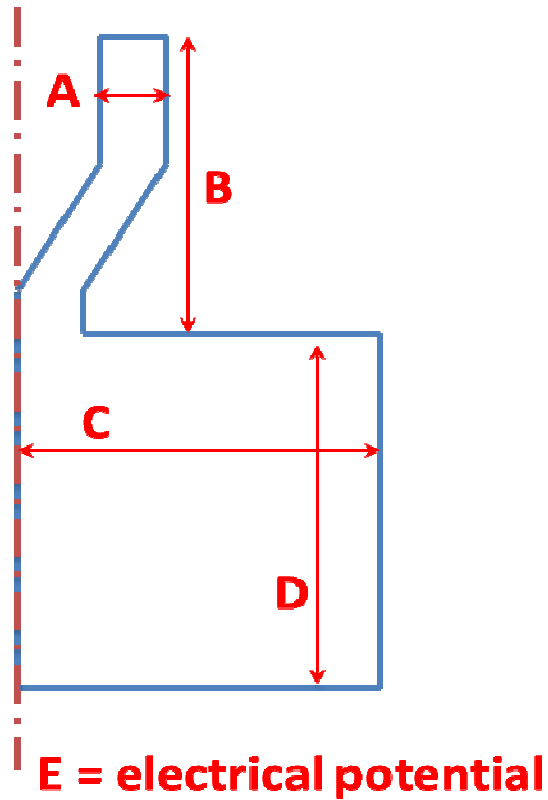


圖 2-10 進行最佳化之五個因素

表 2-5 五個因素兩水準之數值表

	A	B	C	D	E
水準 1	1 mm	10 mm	13 mm	27 mm	3V
水準 2	1.5 mm	9 mm	15 mm	30 mm	-2V

表 2-6 五個因素兩水準構成 32 組實驗

Case1	A1	B1	C1	D1	E1
Case2	A1	B1	C1	D1	E2
Case3	A1	B1	C1	D2	E1

Case4	A1	B1	C1	D2	E2
Case5	A1	B1	C2	D1	E1
Case6	A1	B1	C2	D1	E2
Case7	A1	B1	C2	D2	E1
Case8	A1	B1	C2	D2	E2
Case9	A1	B2	C1	D1	E1
Case10	A1	B2	C1	D1	E2
Case11	A1	B2	C1	D2	E1
Case12	A1	B2	C1	D2	E2
Case13	A1	B2	C2	D1	E1
Case14	A1	B2	C2	D1	E2
Case15	A1	B2	C2	D2	E1
Case16	A1	B2	C2	D2	E2
Case17	A2	B1	C1	D1	E1
Case18	A2	B1	C1	D1	E2
Case18	A2	B1	C1	D2	E1
Case20	A2	B1	C1	D2	E2
Case21	A2	B1	C2	D1	E1
Case22	A2	B1	C2	D1	E2
Case23	A2	B1	C2	D2	E1
Case24	A2	B1	C2	D2	E2
Case25	A2	B2	C1	D1	E1
Case26	A2	B2	C1	D1	E2
Case27	A2	B2	C1	D2	E1
Case28	A2	B2	C1	D2	E2
Case28	A2	B2	C2	D1	E1
Case30	A2	B2	C2	D1	E2
Case31	A2	B2	C2	D2	E1
Case32	A2	B2	C2	D2	E2

由表 2-5 中的五個因素之數值可看出依據變因的相異，變因的一次變動量會有很大的落差，而在數值方法上可利用正規化 (normalize) 此步驟將數據的階數化簡在同一階級之內。正規化在進行實驗計劃法中是重要且必須的一個過程，因為在同階級之內所計算出的數據權重較為客觀。舉例說明如下：

$$A = 9, 10, 11 \quad \rightarrow \quad A' = -1, 0, 1$$

$$B = 90, 100, 110 \quad \rightarrow \quad B' = -1, 0, 1$$

其中

$$A \text{ 組數據正規化公式為 } A - 10 = A'$$

$$B \text{ 組數據正規化公式為 } (B - 100) \div 10 = B'$$

本研究之目的為使電漿腔體中靶材面上在電漿源的影響下之溫度分佈較為均勻，在數值上所選定最佳化優缺之評定值為靶材面上溫度之全距；理論公式如式 2-17 所示。

$$y = \beta_0 + \beta_1 \cdot A' + \beta_2 \cdot B' + \beta_3 \cdot A'^2 + \beta_4 \cdot B'^2 + \beta_5 \cdot A' \cdot B' \quad (2-17)$$

其中

y ：在本研究中此為溫度全距值

$\beta_0 \sim \beta_5$ ：各變因於實驗問題中之權重

此公式為判斷各變因對溫度全距影響所佔權重之依據，並可以矩陣運算式表示，如式 2-18 所示。

$$\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \\ Y_5 \\ Y_6 \\ Y_7 \\ Y_8 \\ Y_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \beta_4 \\ \beta_5 \end{bmatrix} \quad (2-18)$$

得出這五個變因對於溫度全距影響之權重後，挑選其權重值較大對溫度全距影響較多的兩個變因，再進行下一階段的最佳化；第二階段的兩個因素各取三個水準，並且這次判斷權重之公式更改為靶材面上之溫度平均值除以靶材面上之溫度均方根，如式 2-19 所示。

$$\frac{\frac{\sum_{i=1}^n X_i}{n}}{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n X_i^2}{n}}} \quad (2-19)$$

以此找出其權重值之後繪出所對應之應答曲面，並藉由應答曲面找其資料範圍內之極值；並由此條件配置再以軟體進行模擬驗證。

參、主要發現與結論

一、不同電磁條件對電漿腔體內熱流場之影響

首先在固定的腔體尺寸結構內施以不同的電磁場作用強度之下，探討電漿火炬與腔體內部的熱流場之變化，並討論其電磁條件給予電漿腔體的熱流影響。

(一) 系統內電場分佈情況

在非傳輸型電弧電漿火炬生成過程中，通常假設電流密度在陰極表面是以指數型態分佈，陰極尖端會有最大的電流通過。電場強度會由陽極向陰極方向釋放，因此本研究亦考慮轉換兩極的配置；電場強度在電磁條件改變下之分佈情形圖 3-1 至圖 3-3 所示。電流密度的大小會對電磁場以及熱流場造成影響；從統御方程式可知，電流會使能量方程式中多出焦耳熱的熱源項另一方面在動量方程式中多出勞倫茲力項，進而造成電漿流場中溫度與速度之變異。其中焦耳熱分佈情形如圖 3-4 至圖 3-6 所示，可知焦耳熱的作用範圍是在高電位差的區域，作用範圍會隨著電位差的提升而增加，進而提升電漿溫度。

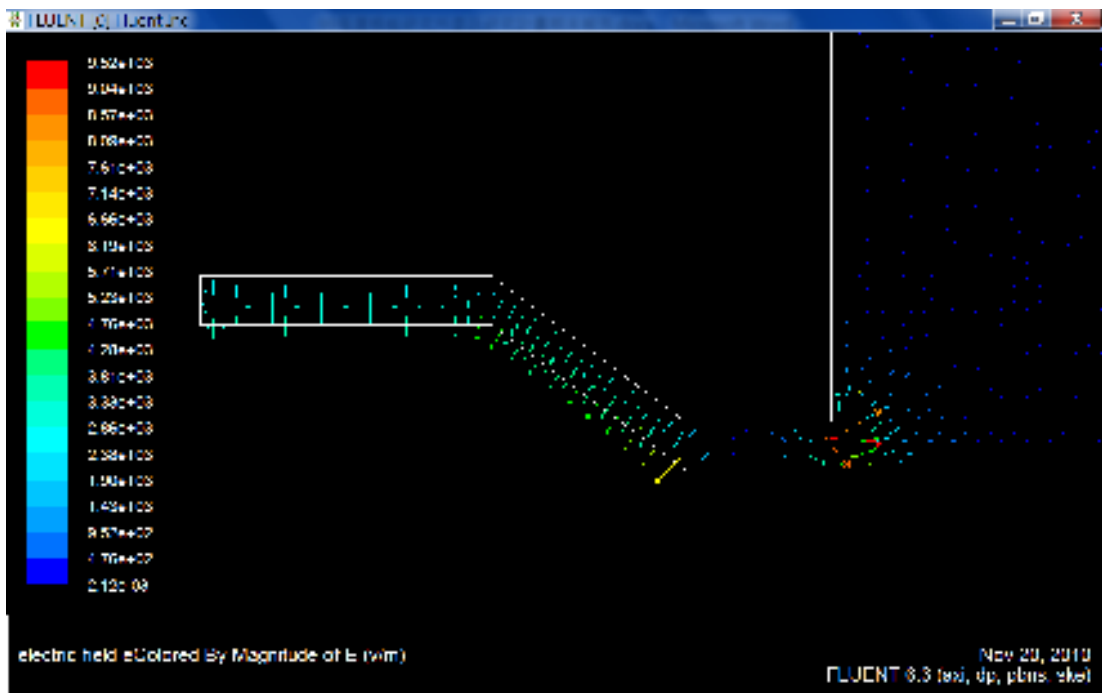


圖 3-1 電位差為 3V 時之電場強度圖

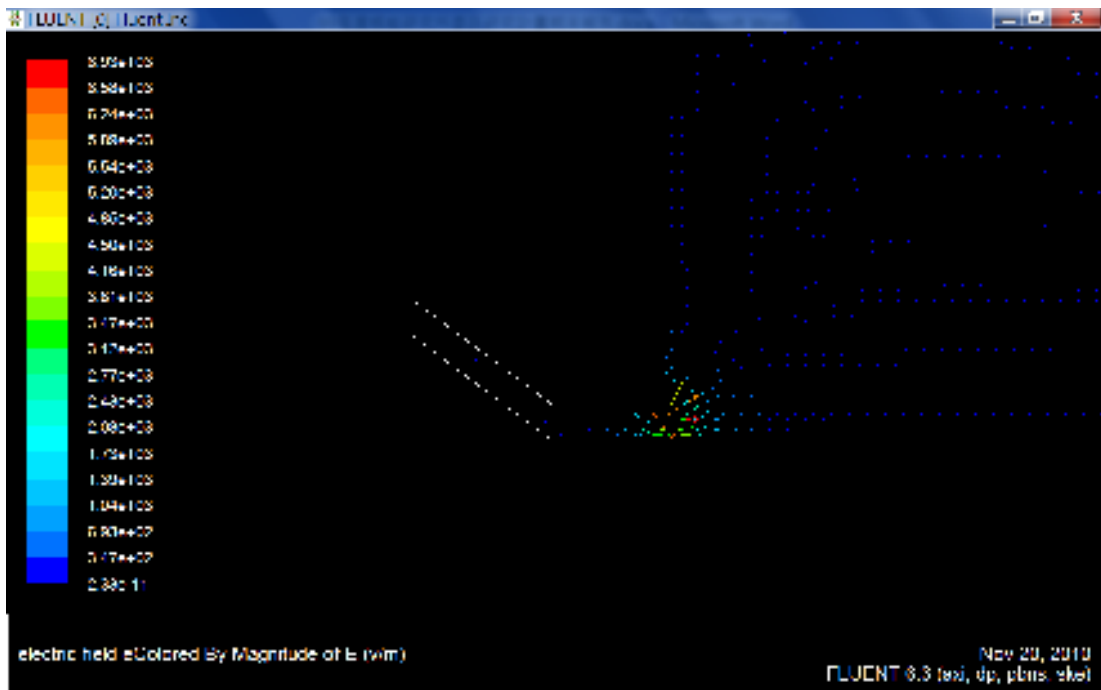


圖 3-2 電位差為 0V 時之電場強度圖

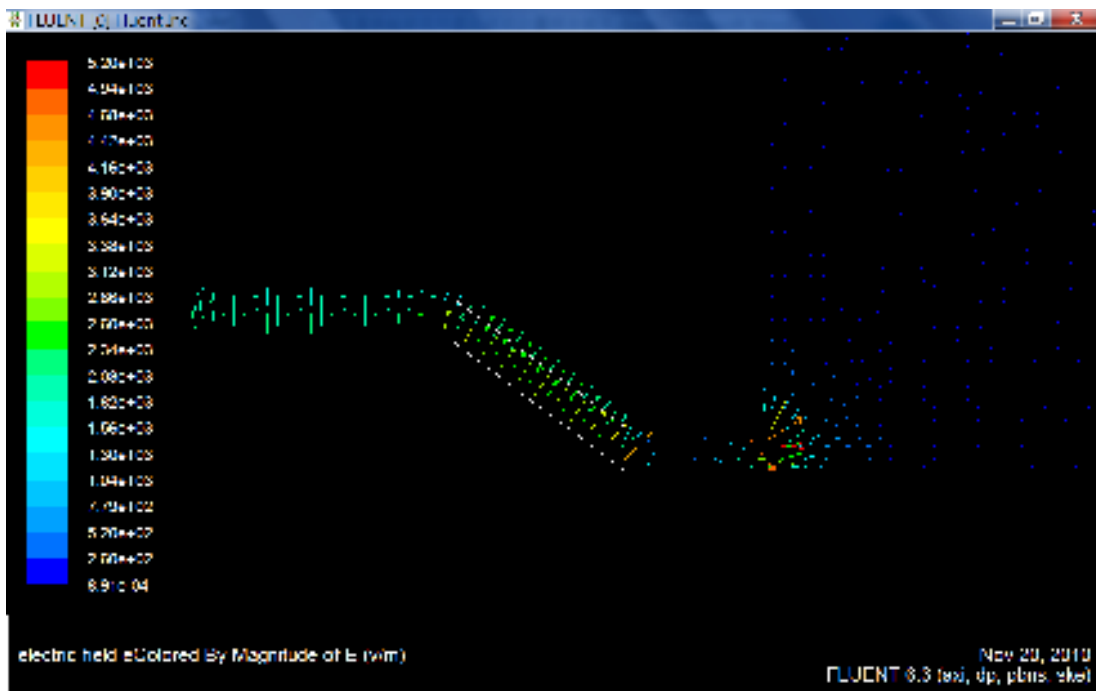


圖 3-3 電位差為-2V 時之電場強度圖

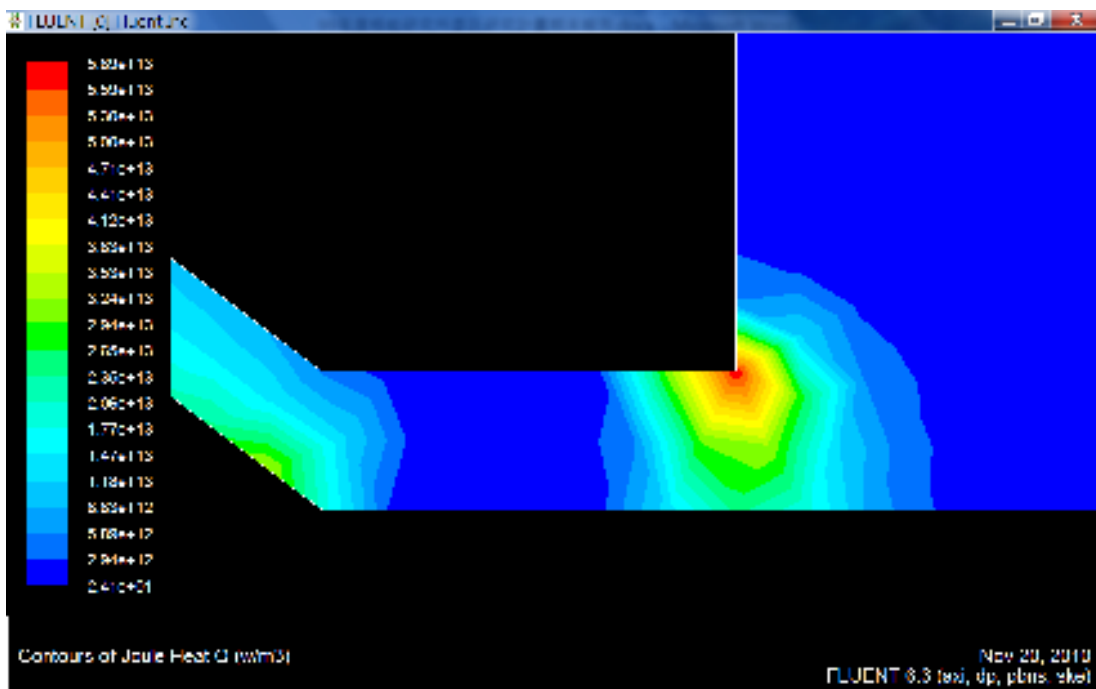


圖 3-4 電位差為 3V 時之焦耳熱作用圖

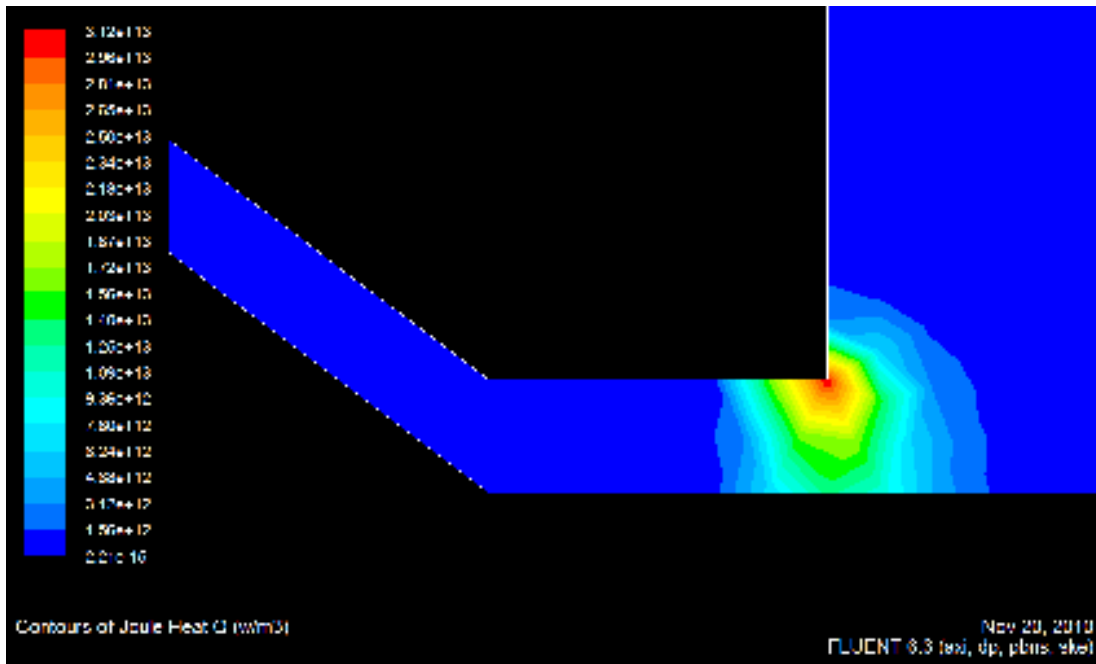


圖 3-5 電位差為 0V 時之焦耳熱作用圖

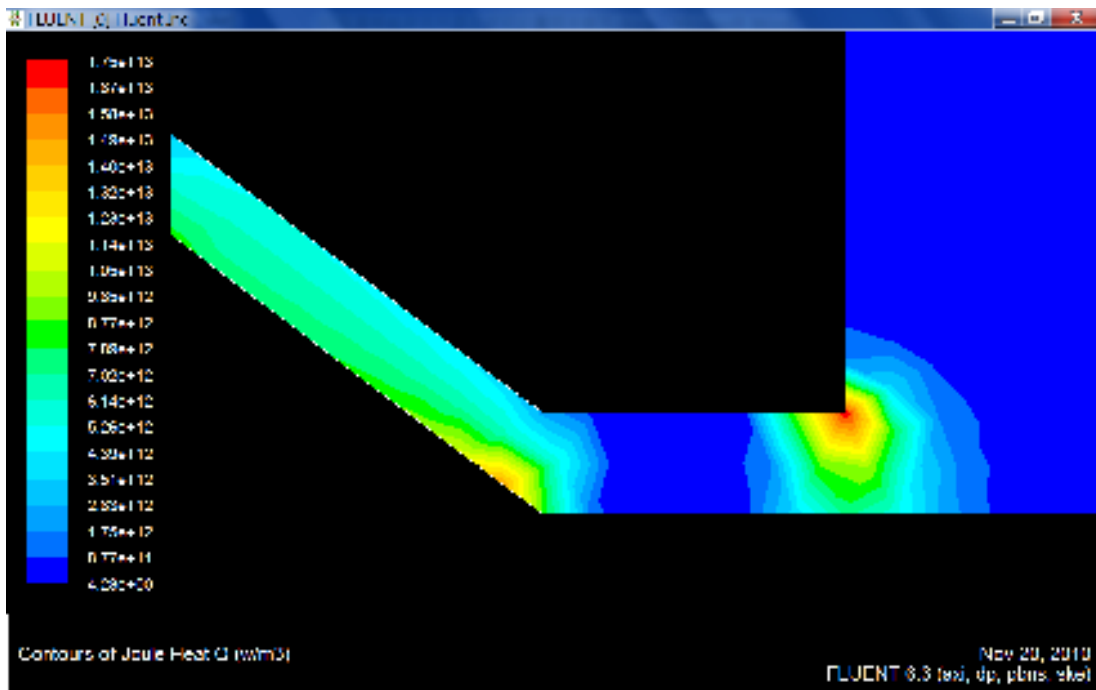


圖 3-6 電位差為 -2V 時之焦耳熱作用圖

(二) 系統內熱流場分佈情況

圖 3-7 至圖 3-9 為電漿腔體內部溫度模擬結果；由此結果可看出電漿的極高溫發生在噴嘴內部與出口，主要是焦耳熱源項的效應。由圖中可知高溫電漿噴射的長度與溫度會隨著所設定的電磁強度增加而上升，當電漿進入自由噴流區後溫度會急遽的下降。由這些模擬結果可看出隨著電磁強度的差異，底材的溫度分佈是相當不均勻的。

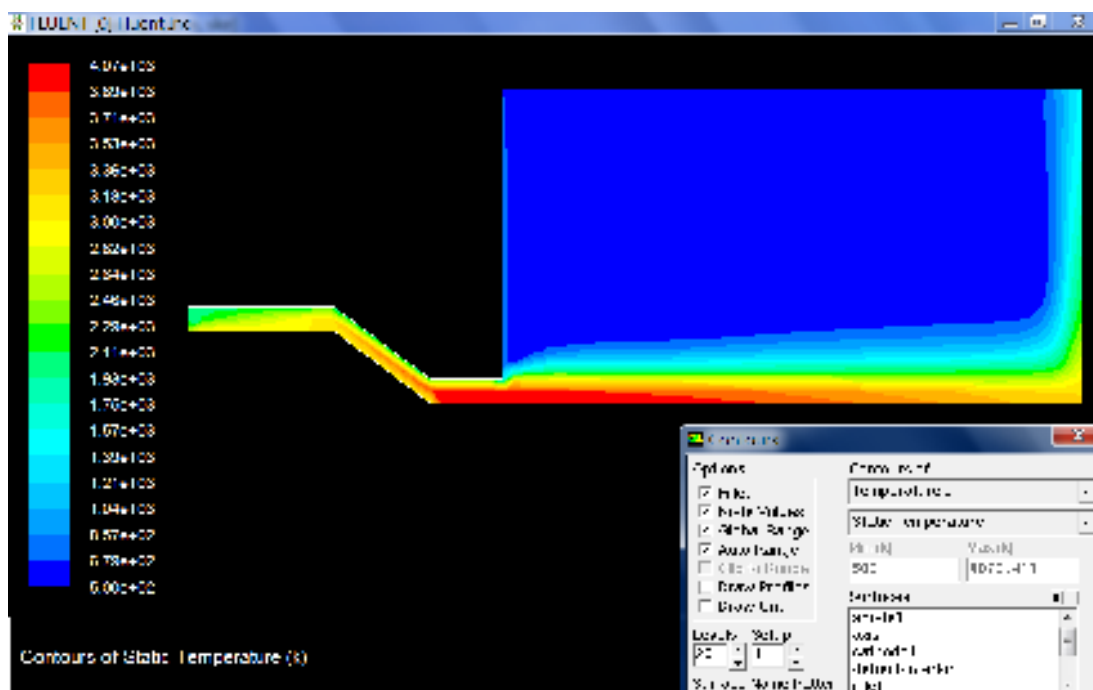


圖 3-7 電位差為 3V 時之溫度分佈圖

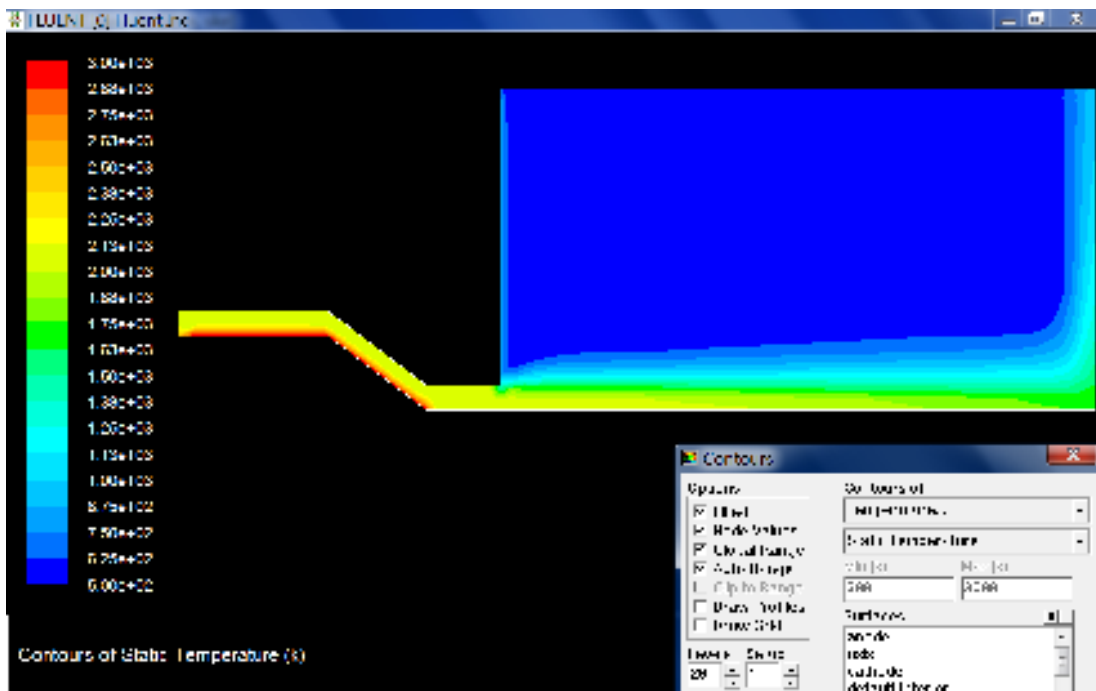


圖 3-8 電位差為 0V 時之溫度分佈圖

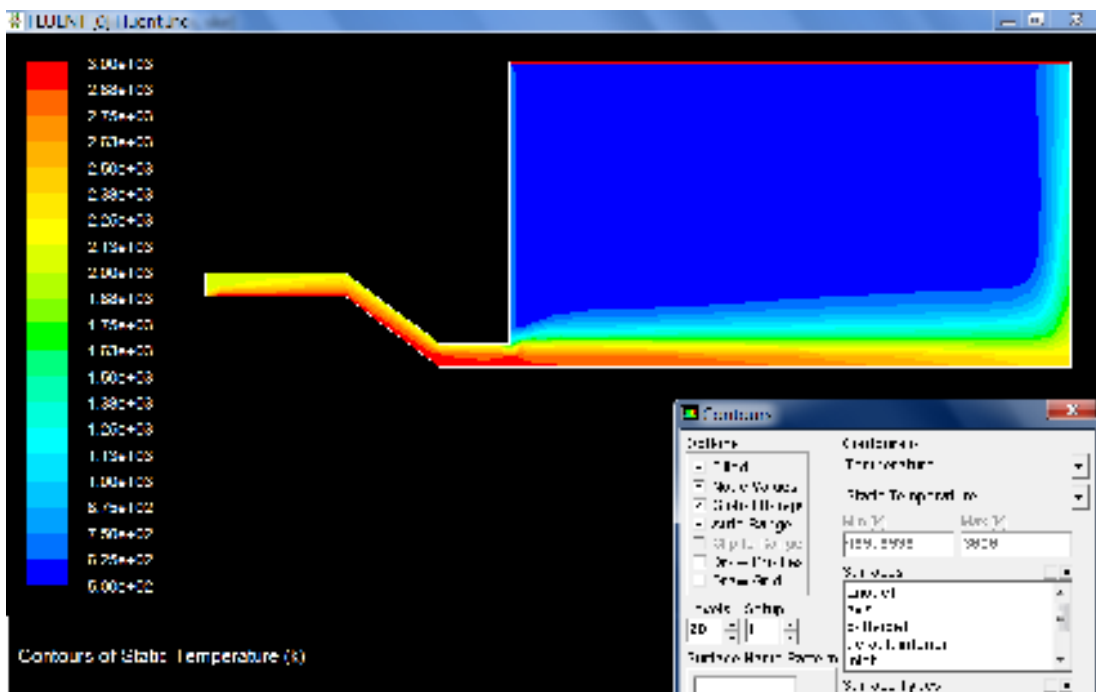


圖 3-9 電位差為 -2V 時之溫度分佈圖

二、不同腔體尺寸對電漿腔體內熱流場之影響

接著在固定邊界條件與電磁設定參數下，改變其腔體尺寸結構，觀察電漿火炬與腔體內部的熱流場變化。並探討腔體尺寸對於靶材面所受熱流分佈影響。

圖 3-10 至圖 3-12 分別為噴嘴與靶材間距為 0.024m、0.027m、0.03m 時之腔體溫度分佈圖。從圖上不容易分辨出溫度場的細微差異，所以放入計算模擬得知的流場中最低溫與最高溫標示。在模擬完成後可將流場中所劃分的網格各節點之各項結果匯出；匯出之溫度數據即為進行後處理與最佳化之依據。

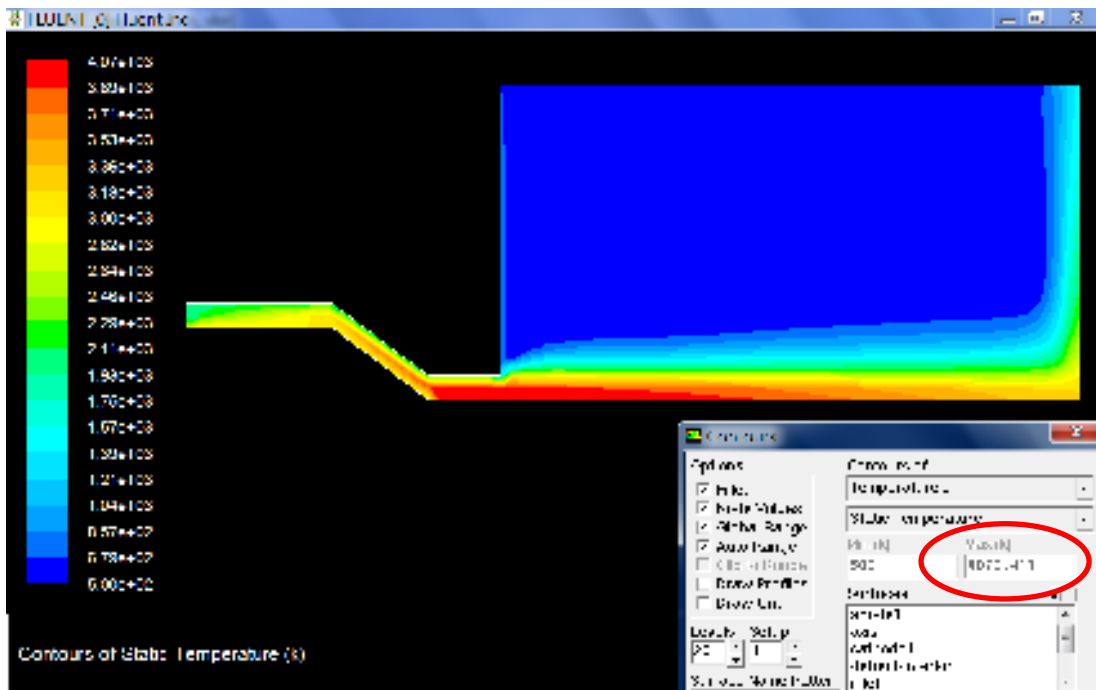


圖 3-10 噴嘴與靶材間距為 0.024m 時之腔體溫度分佈圖

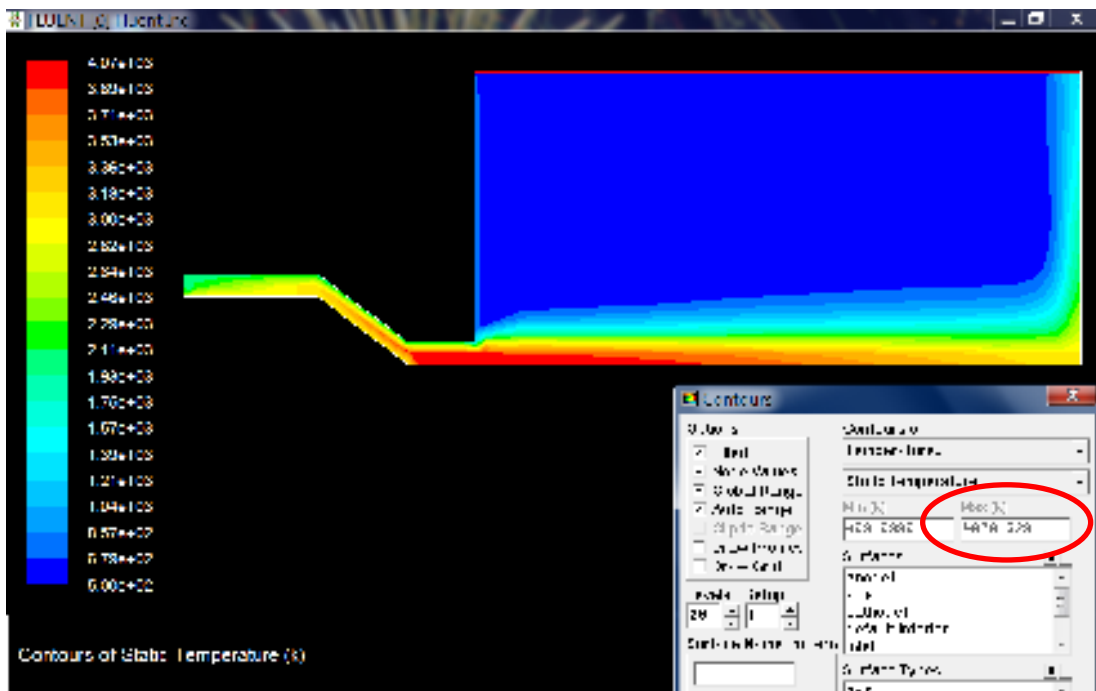


圖 3-11 噴嘴與靶材間距為 0.027m 時之腔體溫度分佈圖

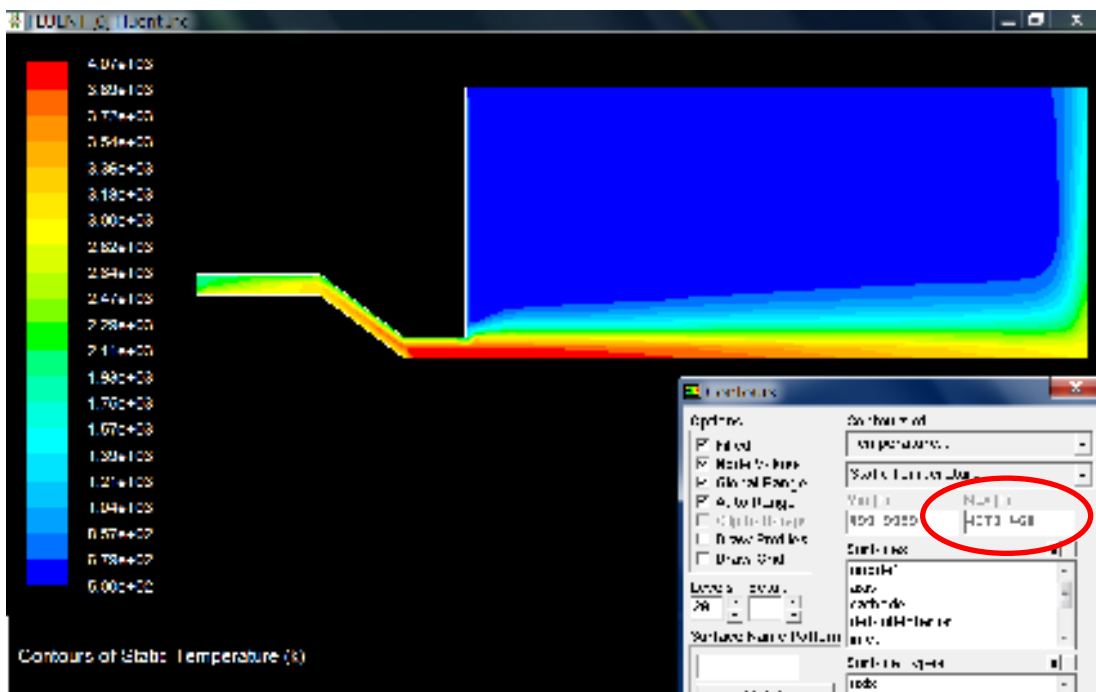


圖 3-12 噴嘴與靶材間距為 0.03m 時之腔體溫度分佈圖

三、最佳化之腔體尺寸與參數及其應答曲面圖

(一) 初步最佳化：找其主導因素

由實驗計劃法之觀念可知，在進入腔體尺寸與邊界參數最佳化前，必須先找出對於靶材面上熱流分佈不均勻之主導參數。將模擬之 32 組計算結果配合實驗計劃法之基礎理論進行運算；如式 2-20 與 2-21 所示：

$$[Y]_{32 \times 1} = [X]_{32 \times 16} [\beta]_{16 \times 1} \quad (2-20)$$

其中

Y：模擬結果所得之靶材面上溫度全距

X：正規化後之變因

β ：本實驗各變因之權重

$$\begin{aligned} Y = & \beta_1 + \beta_2 \cdot A' + \beta_3 \cdot B' + \beta_4 \cdot C' + \beta_5 \cdot D' + \beta_6 \cdot E' \\ & + \beta_7 \cdot A' B' + \beta_8 \cdot A' C' + \beta_9 \cdot A' D' + \beta_{10} \cdot A' E' \\ & + \beta_{11} \cdot B' C' + \beta_{12} \cdot B' D' + \beta_{13} \cdot B' E' + \\ & \beta_{14} \cdot C' D' + \beta_{15} \cdot C' E' + \beta_{16} \cdot D' E' \end{aligned} \quad (2-21)$$

由運算後所得之變因權重可知所探討之五個因素（見圖 2-10）中，變因 D 和 E 所對應的 β_5 和 β_6 數值較其它三值為大，表示在此實驗問題中 D 和 E 這兩個因素對實驗結果之影響權重較大，如圖 3-13 所示。

$$\begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \\ \beta_4 \\ \beta_5 \\ \beta_6 \\ \beta_7 \\ \beta_8 \\ \beta_9 \\ \beta_{10} \\ \beta_{11} \\ \beta_{12} \\ \beta_{13} \\ \beta_{14} \\ \beta_{15} \\ \beta_{16} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1187.1 \\ 181.4 \\ 240.47 \\ 32.2 \\ 838.4 \\ 263.3 \\ 9.1324 \\ -0.3823 \\ 0.0257 \\ -0.0006 \\ -1.2714 \\ -6.285 \\ 0.283 \\ 1.9648 \\ 0.0146 \\ -0.1778 \end{bmatrix}$$

圖 3-13 五個因素在實驗中所佔之權重

(二) 腔體尺寸與參數最佳化及其應答曲面

經過初步最佳化分析後，得知在五個因素中權重較重的兩個變因為 (1) D：噴嘴與靶材間距 (2) E：電極的電位勢，如圖 3-14 所示，兩個因素配上三個水準所組成之九組實驗如圖 3-15 所示。其計算式如式 2-21 所示。

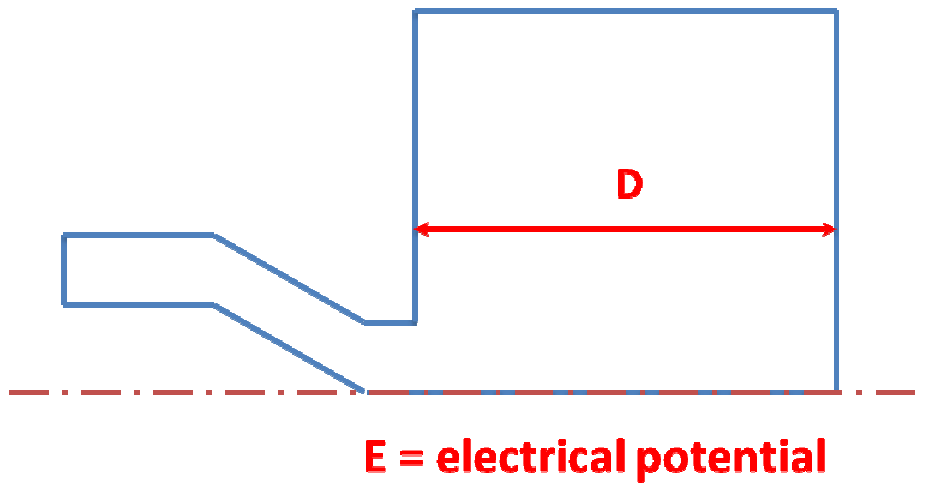


圖 3-14 欲進行最佳化分析之兩因素

	D1 = 0.024	D2 = 0.027	D3 = 0.03
E1 = 3	ΔT_{11}	ΔT_{12}	ΔT_{13}
E2 = 0	ΔT_{21}	ΔT_{22}	ΔT_{23}
E3 = -2	ΔT_{31}	ΔT_{32}	ΔT_{33}

圖 3-15 兩個因素三個水準所構成之九組實驗

$$[Y]_{9 \times 1} = [X']_{9 \times 6} [\beta']_{6 \times 1} \quad (2-21)$$

其中

Y：所得之靶材面上溫度平均值除以溫度均方根值

X'：正規化後之變因

β' ：最佳化後各變因之權重

$$\beta' = \begin{bmatrix} 5.1517 \\ 0.1349 \\ 0.2580 \\ 0.2865 \\ -0.5357 \\ 0.0041 \end{bmatrix}$$

圖 3-16 計算所得之權重

將模擬結果繪出所對應之應答曲面，以正規化前後之因素為水平軸分別如圖 3-17 與圖 3-18 所示；可由曲面判斷其欲尋找之極值。

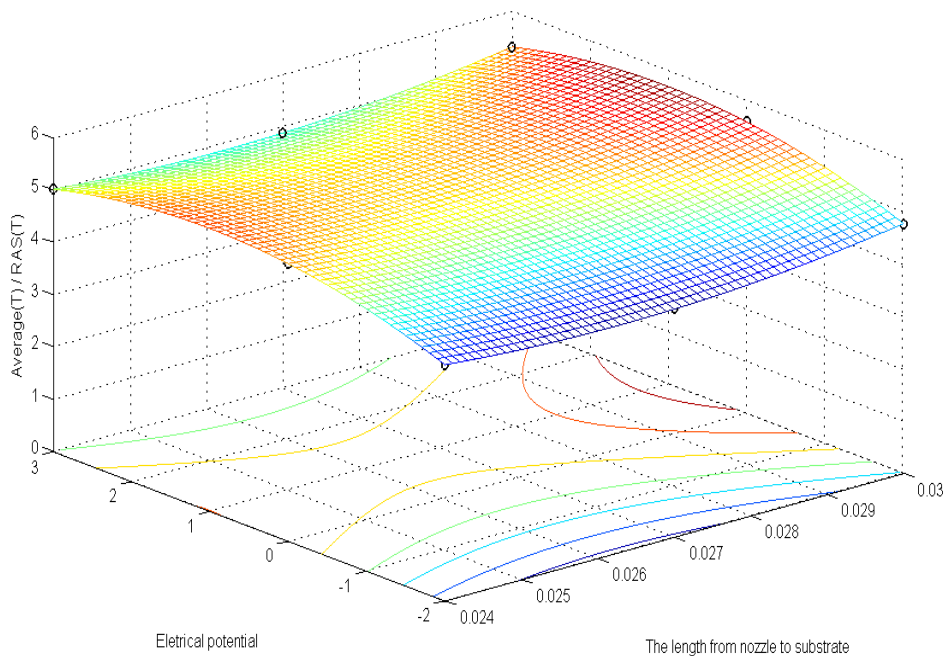


圖 3-17 最佳化過程中所得之應答曲面圖 1

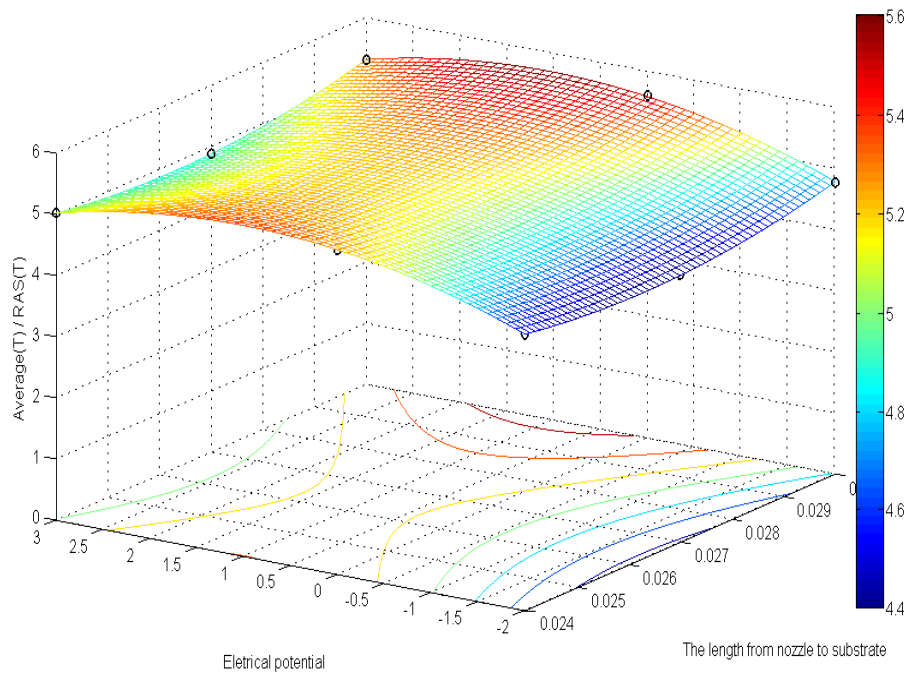


圖 3-18 最佳化過程中所得之應答曲面圖 2

(三) 模擬驗證

由迴歸後所得應答曲面，可運算得其經過最佳化分析後的電漿腔體尺寸及其電磁設定，如式 2-22 至式 2-24 所示：

$$\frac{\bar{T}}{RMS(T)} = \beta_0 + D \cdot \beta_1 + E \cdot \beta_2 + D^2 \cdot \beta_3 + E^2 \cdot \beta_4 + DE \cdot \beta_5 \quad (2-22)$$

$$\frac{\partial \left[\frac{\bar{T}}{RMS(T)} \right]}{\partial D} = \beta_1 + 2D \cdot \beta_3 + E \cdot \beta_5 \quad (2-23)$$

$$\frac{\partial \left[\frac{\bar{T}}{RMS(T)} \right]}{\partial E} = \beta_2 + 2E \cdot \beta_4 + D \cdot \beta_5 \quad (2-24)$$

上式兩偏微分值同時為零時即為極值發生條件，可得式 2-25 至式 2-26；進行聯立求解，以獲得最佳之 D 值與 E 值。

$$63656 \cdot D + 0.6785 \cdot E = 1673.7 \quad (2-25)$$

$$0.6785 \cdot D - 0.1964 \cdot E = -0.1821 \quad (2-26)$$

$$D = 0.0263 \quad \& \quad E = 1.018$$

以此值為依據進行熱流模擬可得結果如下：

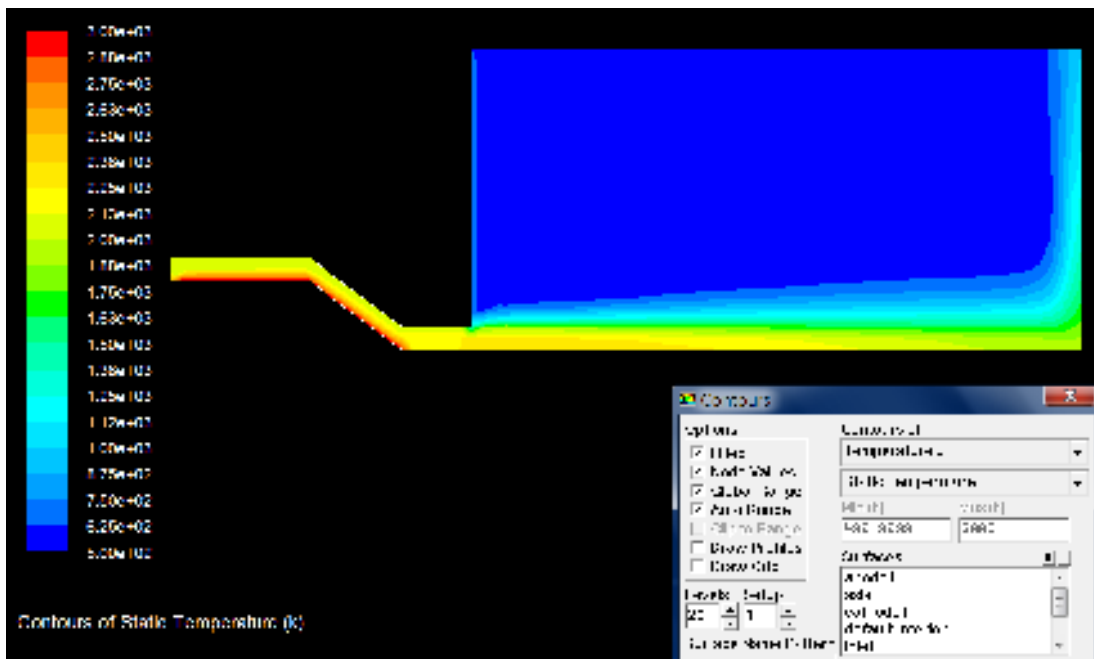


圖 3-19 最佳腔體尺寸及設定參數所得之流場溫度分佈圖

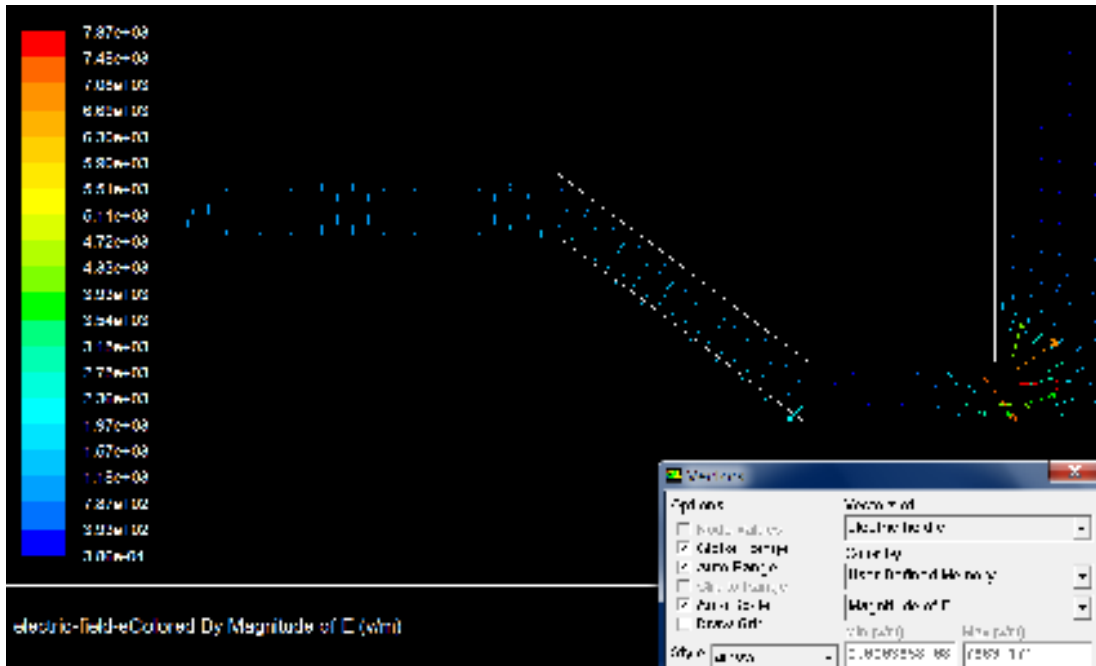


圖 3-20 最佳腔體尺寸及設定參數所得之電場圖

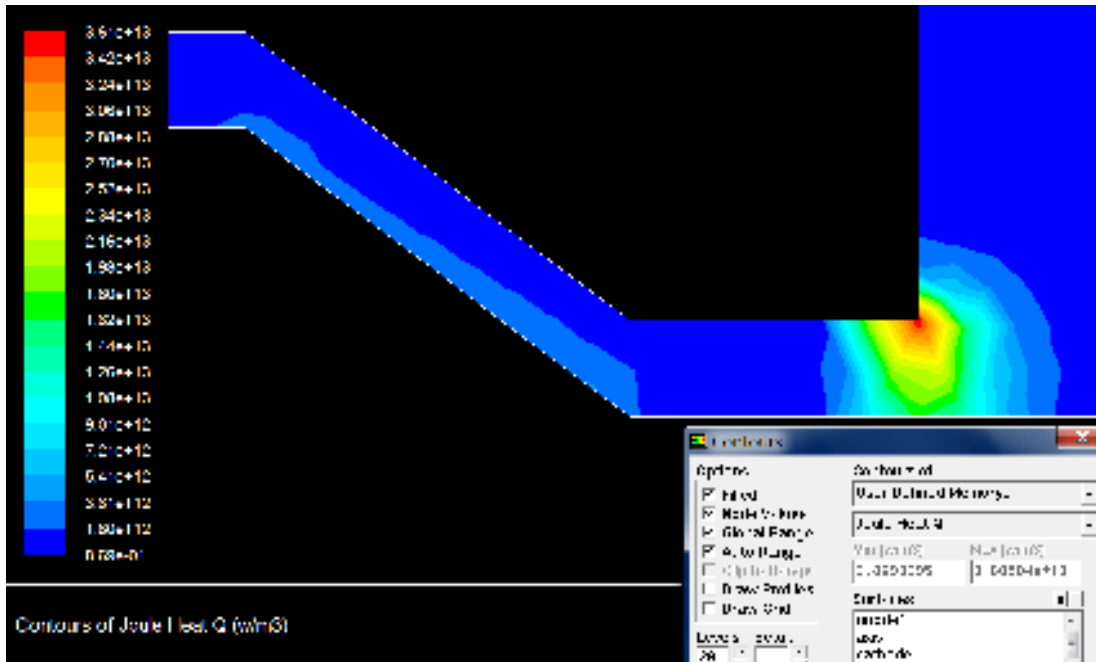


圖 3-21 最佳腔體尺寸及設定參數所得之焦耳熱作用圖

由模擬結果之靶材面溫度數據衍伸計算出靶材面上溫度全距、平均溫度、溫度均方根值以及平均溫度與均方根之比值，如下所示：

$$\Delta T = 934.9300441 \text{ K}$$

$$\bar{T} = 1319.226 \text{ K}$$

$$\text{RMS}(T) = 270.0776 \text{ K}$$

$$\frac{\bar{T}}{\text{RMS}(T)} = 4.884618$$

四、 結論

綜合以上模擬結果及分析可以發現，隨著邊界所設定的電極電位勢增加，流場中所受的電場強度以及焦耳熱所提供的熱源項能量也因此增加，進而使流場中的電漿溫度提升；同時因為靶材位於電漿自由噴流區之下方，故靶材面上溫度呈現不均勻分佈。採用實驗計劃法之理論進行系統的最佳化分析，由此電漿模擬系統中擷取五個因素分別實施兩個水準之操作，並由分析結果得知各因素對溫度全距之影響權重及斜率。此電漿系統中靶材面上溫度分佈不均勻問題的主要因素為噴嘴與靶材面之距離及電極間電位勢。

針對此兩變因進行三個水準的最佳化實驗，並以靶材面上之

平均溫度與靶材面上溫度均方根值之比值為判斷溫度均勻性之指標，得出此兩變因在此系統中最佳之尺寸及參數設定值；以此參數配置進行模擬所得確實是溫度分布均勻度最佳之結果。本研究驗證使用實驗計劃法進行配合模擬之程序，確實能達到電漿系統溫度分佈均勻最佳化分析之目的。期許此模擬系統及實驗計劃法之分析流程，能做為往後分析電漿製程之參考，達到控制鍍膜溫度及成膜品質之目的。

肆、參考文獻

1. M. Harting, S. Woodford., *Thin Solid Film* 430(2003) 153-6.
2. K. Schuegraf, *Thin Film Deposition Process and Techniques*, Noyes Publications, 1988.
3. Y.J. Kim, I.K. Kang, M.W. Huh, S.C. Yoon, *Biomaterials* 21(2000) 121-30.
4. Y.C. Tanya, J.D. Liao, R. Klauserb, I.D. Wua, C.C. Wenga, *Biomaterials* 23(2002) 65-76.
5. Z. Dinga, J. Chena, S. Gaoa, J. Changa, J. Zhang, E.T. Kang, *Biomaterials* 25(2004) 1059-67.
6. Mckelliget J., Szekely J., Vardelle M. and Fauchais P., "Temperature and velocity fields in a gas stream exiting a plasma torch. A

- mathematical model and its experimental verification”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, Vol. 2, No. 3, p. 317-332, 1982.
7. Dilawari A. H. and Szekely J., “Some perspectives on the modeling of plasma jets”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, Vol.7, No. 3, p. 317-339, 1987.
 8. Lee Y. C. and Pfender E., “Particle dynamics and particle heat and mass transfer in thermal plasmas. Part III. Thermal plasma jet reactors and multiparticle injection”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, Vol. 7, No. 1, p. 1-27, 1987.
 9. Scott D. A., Kovitya P. and Haddad G. N., “Temperatures in the plume of a dc plasma torch”, *J. Appl. Phys.*, Vol. 66, No. 11, p. 5232-5239, 1989.
 10. Westhoff R. and Szekely J., “A model of fluid, heat flow, and electro-magnetic phenomena in a non-transferred arc plasma torch”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 70, No. 7, p. 3455-3466, 1991.
 11. Paik S., Huang P.C., Heberlein J. and Pfender E., “Determination of the arc-root position in a DC plasma torch”, *Plasma Chemistry and Plasma Processing*, Vol. 13, No. 3, p. 379-397, 1993.
 12. Sato T. , Solonenko O. P. and Nishiyama H., “Numerical simulation of a particle-laden plasma flow in a complex configuration under an

- electromagnetic field”, International Journal of Multiphase Flow, Vol. 29, No. 3, p. 461-474, 2003.
13. Nishiyama H., Kuzuhara M., Solonenko O.P. and Kamiyama S., “Numerical modeling of an impinging and compressible dusted plasma jet controlled by a magnetic field”, Plasma Chemistry and Plasma Processing, Vol. 19, No. 3, p. 363-381, 1999.
 14. Zagorski A.V. and Stadelmaier F., “Full-scale modelling of a thermal spray process”, Surface and Coatings Technology, Vol. 146-147, p. 162-167, 2001.
 15. 高正雄譯, 超 LSI 時代: 電漿化學, 工業調查會電子材料編集部, 1984
 16. Roth J. R., “Industrial plasma engineering – volume 1: principles”, Institute of physics publishing, 1995.
 17. FLUENT 12.0 User Guide, Fluent Inc, 2009.
 18. Rajeev Bansal., “Fundamentals of engineering electromagnetics”, CRC/Taylor & Francis, 2006.
 19. 吳玉印著, 新版實驗計劃法, 中國經營管理叢書, 1988
 20. G. E. P. Box, W. G. Hunter and J. Roy. Statist. Soc., B13, 1 (1951).