



Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla

Centro Interdisciplinario de Posgrados

e Investigación

Escuela de Ingeniería

Maestría en Sistemas Integrados de Manufactura y Estrategias de
Calidad

DISEÑO Y SIMULACION DE UN REACTOR DE DEPOSICION QUIMICA DE
VAPOR (CVD) PARA RECUBRIMIENTOS DE ARSENIURO DE GALIO.

Tesis que para obtener el Grado de Maestro
en Sistemas Integrados de Manufactura y Estrategias de Calidad

Presenta

Allan Joseph Ayala Lara

Director

Dr. Alex Toledo Vázquez

Puebla, México.

Noviembre, 2018



UPAEP – Secretaría General

Dirección General de Apoyos Académicos

Dirección del Centro de Recursos para el Aprendizaje y la Investigación.

Biblioteca Central - **Karol Wojtyla**

Tesis Digitales Restricciones de uso:

DERECHOS RESERVADOS ©

PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de textos, imágenes, gráficas, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente de donde la obtuvo mencionando el autor o autores involucrados en el documento.

Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla

Centro Interdisciplinario de Posgrados

e Investigación

Escuela de Ingeniería

Maestría en Sistemas Integrados de Manufactura y Estrategias de
Calidad

Se aprueba la Tesis:

DISEÑO Y SIMULACION DE UN REACTOR DE DEPOSICION QUIMICA DE
VAPOR (CVD) PARA RECUBRIMIENTOS DE ARSENIURO DE GALIO.

Comité de Revisión.

Dr. Alex Toledo Vázquez

Director

Dr. Omar Aguilar Mejía

Asesor

Dr. Prudencio Fidel Pacheco García

Asesor

Puebla, México.

Noviembre, 2018

RESUMEN

El presente trabajo hace uso de herramientas informáticas CAD y CAE para simular el proceso de recubrimiento de arseniuro de galio (GaAs), sobre un sustrato dentro de un reactor de deposición química de vapor CVD.; mediante el uso de software de diseño asistido por computadora (CAD), plantear un modelo de reactor que mejore las condiciones para la deposición de capas delgadas ya que a través de la herramienta CAD es posible modelar tomando en cuenta parámetros geométricos de un reactor CVD. En el software CAE se integran los módulos de dinámica de fluidos computacional (CFD), transferencia de calor, reacciones químicas y transporte de especies diluidas, en los que se incluyen gran parte de los parámetros y variables físicas y químicas que intervienen en el proceso, obteniendo como resultado un modelo físico-químico con el principal objetivo de minimizar las pruebas que resultan costosas en el diseño de un reactor.

Palabras clave: Deposición química de vapor (CVD), Diseño asistido por computadora (CAD), Ingeniería asistida por computadora (CAE), Dinámica de fluidos computacional (CFD).

Keywords: Chemical vapor deposition (CVD), Computer aided design (CAD), Computer aided engineering (CAE), Computational fluid dynamics (CFD).

ÍNDICE

RESUMEN	2
1. INTRODUCCIÓN	6
1.1 DESCRIPCION DE LA COMPAÑÍA.....	7
1.1.1 INFRAESTRUCTURA	8
1.1.2 OFERTA EDUCATIVA.....	8
1.1.3 VINCULACIÓN.....	9
1.1.4 MISIÓN	10
1.1.5 VISIÓN	11
1.1.6 ORGANIGRAMA GENERAL DEL INSTITUTO TECNOLÓGICO DE ORIZABA.....	11
1.2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	12
1.3 JUSTIFICACIÓN	13
1.4 OBJETIVO GENERAL.	15
1.5 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.	15
2. MARCO TEÓRICO	16
2.1 ANTECEDENTES	16
2.2 GENERACIÓN DE RECUBRIMIENTOS.....	21
2.2.1 TÉCNICAS DE DEPOSICIÓN EN FASE VAPOR	22
2.2.2 DEPOSICIÓN FÍSICA DE VAPOR (PVD)	23
2.2.3 DEPOSICIÓN QUÍMICA DE VAPOR (CVD)	24
2.2.3.1 REACTOR CVD	26
2.2.3.2 VENTAJAS Y DESVENTAJAS	28
2.2.3.3 FUNDAMENTOS DEL PROCESO.....	30
2.2.3.4 TERMODINÁMICA.....	32
2.2.3.5 CINÉTICA	34
2.2.3.6 FENOMENOS DEL TRANSPORTE	36
2.2.3.7 DINÁMICA DE FLUIDOS.....	37
2.2.3.8 INSTRUMENTACIÓN EN UN REACTOR CVD.....	38
2.2.3.9 PRECURSORES Y VARIABLES	39
2.3 METODO DE ELEMENTO FINITO (FEM).....	40

2.3.1	PROCESO DE ANALISIS POR ELEMENTOS FINITOS.....	41
2.4	SIMULACION COMPUTACIONAL	42
2.4.1	DISEÑO ASISTIDO POR COMPUTADORA (CAD)	43
2.4.2	INGENIERIA ASISTIDA POR COMPUTADORA (CAE).....	44
2.4.2.1	DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD).....	45
3.	CASO DE ESTUDIO (DEPOSITOS DE ARSENIURO DE GALIO GaAs).....	50
3.1	CONSTRUCCIÓN DEL MODELO EN SOFTWARE CAE	51
3.1.1	MODELADO CAD DE REACTOR CVD	51
3.1.2	MÓDULO CAE DE REACCIONES QUÍMICAS	52
3.1.3	MÓDULO CAE DE TERMODINÁMICA	56
3.1.4	MÓDULO CAE DE TRANSPORTE DE ESPECIES DILUIDAS	57
3.1.5	MÓDULO CAE DE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL CFD	58
3.1.6	MALLADO	60
4.	SIMULACIONES Y ANÁLISIS DE RESULTADOS	62
4.1	PERFILES DE TEMPERATURA	63
4.2	PERFILES DE VELOCIDAD	65
4.3	CONCENTRACIONES MOLARES	67
4.3.1	CONCENTRACIÓN MOLAR DEL PRECURSOR TRIMETIL DE GALIO	67
4.3.1.1	CONCENTRACIONES MOLARES DE ESPECIES INTERMEDIAS DEL PRECURSOR TRIMETIL-GALIO	69
4.3.2	CONCENTRACIÓN MOLAR DE PRECURSOR ARSANO	71
	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	73
	REFERENCIAS.....	76
	ANEXOS	81
	CARTA DE ACEPTACIÓN DE LA EMPRESA.....	81
	CARTA DE LIBERACIÓN DE LA EMPRESA	83

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Organigrama general del Instituto Tecnológico de Orizaba.	11
Figura 2. Reactor CVD de pared caliente.	26
Figura 3. Reactor CVD (Universidad Tecnológica Nacional, Argentina)	27
Figura 4. Diferentes configuraciones de reactores CVD: horizontal, vertical y semicubierto.....	28
Figura 5. Principales fases en el proceso CVD (Choy, 2003).	32
Figura 6. Procesos que ocurren en la deposición química de vapor CVD (Bolívar, 2007).	35
Figura 7. Componentes principales en un reactor CVD.	39
Figura 8. Proceso de análisis por elemento finito.	42
Figura 9. Modelado CAD del reactor CVD.	52
Figura 10. Ventana de ajustes del módulo de química en software CAE.	56
Figura 11. Ventana de ajustes del módulo de transferencia de calor.	57
Figura 12. Ventana de ajustes del módulo de transporte de especies diluidas.	58
Figura 13. Ventana de ajustes del módulo dinámica de fluidos computacional CFD.	59
Figura 14. Mallado triangular libre para el modelo CAE del reactor CVD.	61
Figura 15. Perfil de temperatura [Sustrato a 3.5 in de la descarga].	64
Figura 16. Perfil de temperatura [Sustrato a 4 in de la descarga].	64
Figura 17. Perfil de velocidad [Sustrato a 3.5 in de la descarga].	66
Figura 18. Perfil de velocidad [Sustrato a 4 in de la descarga].	66
Figura 19. Concentración de $(\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3)$ [Sustrato a 3.5 in de la descarga].	68
Figura 20. Concentración de $(\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3)$ [Sustrato a 4 in de la descarga].	69
Figura 21. Concentración de especies del precursor $(\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3)$ [Sustrato a 3.5].	70
Figura 22. Concentración de especies del precursor $(\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3)$ [Sustrato a 4].	71
Figura 23. Concentración de arsano para diferentes distancias del sustrato de la descarga.	72

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Tipos de reacciones en un reactor CVD.	31
Tabla 2. Solucionadores y software CFD.	47
Tabla 3. Condiciones iniciales de modelo propuesto.	62

1. INTRODUCCIÓN

A lo largo de la historia la evolución del ser humano ha ido de la mano con el desarrollo de la tecnología, y esta a su vez con el uso y desarrollo de diversos materiales, tal ha sido el impacto, que algunas épocas del hombre son recordadas con el nombre de algún material. En los últimos años, la constante actualización en tecnología, para diferentes aplicaciones, ha generado la necesidad de contar con materiales con mejores características o que tengan ciertas especificaciones dependiendo las áreas de aplicación de dichas tecnologías.

El desarrollo de materiales nano estructurados ha sido de gran importancia en los últimos años debido a las propiedades que estos pueden poseer, por lo que numerosas investigaciones se han ido generado recientemente. Un ejemplo de esto, es la deposición de arseniuro de galio (GaAs) sobre un sustrato, que para la industria de los semiconductores ha demostrado un cambio drástico en sus propiedades electrónicas y ópticas (Vambol, y otros, 2017).

En este trabajo, se estudia un proceso de manufactura, que mejora las características de algunos materiales, a través de la deposición de capas delgadas a un sustrato dentro de la cámara de reacción, el tipo de reactor que se desea analizar es uno de deposición química de vapor, que por sus siglas en ingles se le denomina CVD. Este es un proceso de microfabricación ampliamente utilizado para depositar materiales en diversas formas, como monocristalinos, policristalinos, amorfos y epitaxiales en sustratos (Powell M. , 2017).

En este tipo de procesos de deposición capas delgadas, del orden de nanómetros, ocurren numerosos fenómenos físicos y químicos, de los cuales, su comportamiento depende de diversos factores, tales como la presión y temperatura del proceso, diseño del reactor, geometría del sustrato, tipo de precursores, compuesto que se desea depositar, etc., entre algunos otros. Debido a que la deposición de capas delgas, la tasa de crecimiento,

homogeneidad, etc., dependen de numerosas variables, no existe una guía o regla que nos determine el ambiente idóneo para el recubrimiento o generación de películas delgadas en un sustrato.

Este método de deposición se ha estudiado constantemente durante las últimas dos décadas, pero debido a que el proceso es un tanto complejo, en el cual intervienen diferentes disciplinas de estudio, que incluyen parámetros y variables desde geométricos, como físicos y químicos, no existe una manera única de diseñar o construir un reactor CVD que garantice el estado óptimo de funcionamiento para la generación de películas delgadas. El problema se complica por el hecho de que la mayoría de los reactores CVD comerciales tienen geometrías complejas que dificultan la separación de los efectos de las reacciones químicas de los efectos del calor y la transferencia de masa (Ho, Coltrin, & Breiland, 1994).

1.1 DESCRIPCION DE LA COMPAÑÍA

El desarrollo de este trabajo de investigación se llevó a cabo dentro del Instituto Tecnológico de Orizaba, en el departamento de Metal-Mecánica, en la licenciatura en ingeniería mecánica; la siguiente información general de la institución, una breve reseña historia, infraestructura, vinculación, oferta académica, etc., fue obtenida de la página web del Tecnológico Nacional de México (TecNM), (TecNM, 2018).

Un trece de marzo de 1957, nace el Instituto Tecnológico de Orizaba, teniendo como antecedente sus raíces en la escuela Textil de Río Blanco, fundada en 1933, aunque desde el año de 1926 el entonces presidente Plutarco Elías Calles habría autorizado la construcción de este edificio en que actualmente se imparte cátedra y cuyo costo fue de \$150,000.00 de aquel entonces.

El profesor Pedro Ramírez Rendón director de dicha institución, acompañado por el grupo de maestros y estudiantes, se trasladaron ese 13 de marzo a las instalaciones que hoy ocupa el Tecnológico de Orizaba, edificio que originalmente fue construido para un centro de investigación Azucarero, pero la historia cambió con la llegada de los visionarios hombres encabezados por el finado Prof.. Pedro Ramírez Rendón.

1.1.1 INFRAESTRUCTURA

Actualmente el Instituto Tecnológico ocupa un área total de 82,165 m² de los cuales 32,219.34 m² corresponden a una superficie construida que consta de 20 edificios. Su infraestructura está integrada por 73 aulas, 6 laboratorios ligeros, 9 laboratorios pesados, 3 talleres, 8 instalaciones deportivas, 5 edificios para actividades administrativas, 1 centro de cómputo, 2 salas audiovisuales, 2 bibliotecas, 26 cubículos para profesores, 1 cafetería, 3 subestaciones eléctricas, 2 estacionamientos y diversas áreas verdes.

1.1.2 OFERTA EDUCATIVA

El Instituto oferta actualmente 8 carreras profesionales: Ingeniería Industrial (carrera acreditada por CACEI con vigencia hasta 14 de agosto de 2013), Ingeniería Mecánica (carrera acreditada por CACEI con vigencia hasta 01 de junio de 2011), Ingeniería Química (carrera acreditada por CACEI con vigencia hasta 14 de agosto de 2013), Ingeniería Electrónica (carrera acreditada por CACEI con vigencia hasta 05 de marzo de 2010), Ingeniería Eléctrica, Ingeniería en Sistemas Computacionales (carrera acreditada por CONAIC con vigencia hasta 19 de febrero de 2013), Ingeniería en Gestión Empresarial y Licenciatura en Informática (carrera acreditada por CONAIC con vigencia hasta 19 de febrero de 2013).

En el nivel de posgrado se ofrece: Maestría en Ingeniería Industrial (Maestría registrada en el Programa Nacional de Posgrados de Calidad), Maestría en Ingeniería Electrónica, Maestría en Ingeniería Administrativa (Maestría registrada en el Programa Nacional de Posgrados de Calidad), Maestría en Sistemas Computacionales (Maestría registrada en el Programa Nacional de Posgrados de Calidad), Maestría en Ciencias en ingeniería Industrial, Maestría en ciencias en Ingeniería Química (Maestría registrada en el Programa Nacional de Posgrados de Calidad), Maestría en Ciencias en Ingeniería Electrónica, Doctorado en Ingeniería Industrial.

La división de estudios de posgrado e Investigación, es parte fundamental de la estructura organizacional del Instituto Tecnológico de Orizaba, ofrece servicios a los sectores productivos y educativos de calidad en los rubros de docencia, actualización profesional de sus investigadores en la innovación, diversificación, adaptación, adquisición y difusión de la tecnología.

1.1.3 VINCULACIÓN

Entre otras actividades, el Instituto Tecnológico de Orizaba, mantiene acercamiento importante con las empresas de la región, en el ámbito estatal y Nacional mediante la firma de convenios y el gran número de alumnos que realizan sus residencias profesionales en la industria. Ofrece asesorías de capacitación para trabajadores y mandos administrativos, así como servicios e investigación en áreas de la agroindustria, entre otros.

A fin de incorporar a los estudiantes con su realidad profesional durante el tiempo que permanecen en las aulas, la Dirección General de Educación Superior Tecnológica, auspicia desde años atrás, eventos de innovación que son vitales para los tecnológicos. Los alumnos del ITO han tenido importantes logros a nivel nacional en los Concursos de Creatividad, de Ciencias Básicas, Ciencias Económico-Administrativas y Emprendedores.

En los eventos deportivos el ITO inicia su participación en el año de 1958, pasando por los 50 Eventos Nacionales Deportivos que se han realizado en el país, sin olvidar que en los años de 1963 y 1997 fueron anfitriones. Las disciplinas en las que se participa cada año son: atletismo, fútbol, básquetbol, béisbol, tenis, ajedrez y natación, en ambas ramas.

En esta fascinante travesía, en 1990 nace como mascota el Búho, que identifica al Tecnológico de Orizaba, no únicamente en el deporte, sino también en lo académico y cultural.

Destaca además la gallardía y disciplina de nuestra banda de guerra y escolta, quienes han participado en el Encuentro de Bandas y Escoltas que se realiza cada año. Cabe mencionar que el tecnológico cuenta con una Casa de Cultura, que proporciona diversos servicios a la comunidad en sus instalaciones tales como: talleres libres, inglés, manualidades, talleres especiales como: Literatura y declamación, talleres de artes plásticas: como dibujo, pintura y modelado, Talleres de danza: como aeróbicos, danza folklórica, jazz; talleres de música: acordeón, guitarra, piano, solfeo.

Se realizan exposiciones, eventos artísticos, obras de teatro, conciertos, concursos de ofrendas de Todos Santos y un sin número de eventos para todo público. Proporciona asistencia a personas de la tercera edad y niños con síndrome de Down, en los periodos vacacionales se ofrecen "Campamentos Infantiles" a niños de edades de 4 a 12 años con una cuota de gastos de operación.

1.1.4 MISIÓN

Fortalecer los servicios educativos a través de la cobertura, equidad, promoción e inclusión, en la formación integral de los estudiantes impulsando la innovación, ciencia y tecnología; para consolidar la vinculación con pertinencia en los diferentes sectores

estratégicos, modernizando la gestión institucional con transparencia y rendición de cuentas en un ámbito sustentable.

1.1.5 VISIÓN

Ser una institución sustentable comprometida en la formación de líderes competentes para responder a los retos y expectativas internacionales.

1.1.6 ORGANIGRAMA GENERAL DEL INSTITUTO TECNOLÓGICO DE ORIZABA

La estructura organizacional está integrada por: 1 Dirección, 3 subdirecciones, 21 Departamentos que atienden las cinco funciones básicas: Docencia, Investigación, Vinculación, Extensión y Administración.

El perfil académico del personal docente incluye a 12 doctores, 7 doctores en formación, 95 maestros en ciencias, 75 candidatos a grado de maestría, 163 con grado de licenciatura.

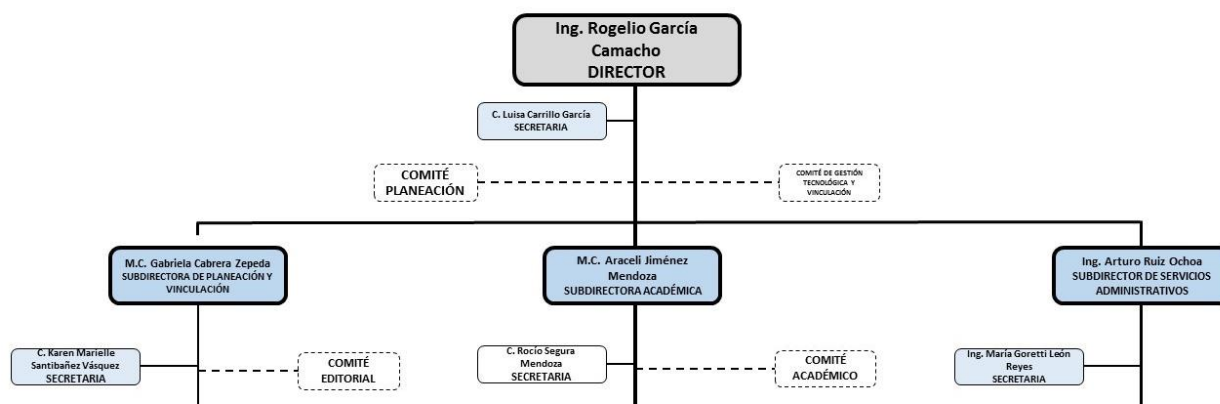


Figura 1. Organigrama general del Instituto Tecnológico de Orizaba.

1.2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.

Como se describe posteriormente en el apartado de antecedentes, no existe en la literatura, alguna solución óptima en el proceso de deposición de capas en un reactor CVD, este tipo de procesos tiene una amplia aplicación en diferentes industrias dependiendo el tipo de deposición que se trata de obtener, como por ejemplo, carburo de silicio (SiC), Arseniuro de Galio (GaAs) y sulfuro de zinc (ZnS), por mencionar algunos, entre las principales industrias encontramos la de semiconductores, la cual es el principal enfoque que han tenido la mayoría de las investigaciones que se han realizado hasta hoy en día, pero no es la única, la industria herramental, petroquímica y de generación de energía son algunas preocupadas por el desarrollo óptimo de este tipo de tecnología.

El enfoque de la problemática lo centramos en los recubrimientos de arseniuro de galio, GaAs es un semiconductor utilizado en la fabricación de dispositivos tales como circuitos integrados de frecuencia de microondas, circuitos integrados de microondas monolíticos, diodos emisores de luz infrarroja, diodos láser, células solares y ventanas ópticas. Las propiedades del arseniuro de galio (GaAs) ofrecen ventajas sobre el silicio para crear dispositivos de bajo ruido, alta potencia y alta frecuencia. Impulsada significativamente por el crecimiento de los dispositivos portátiles de comunicaciones, la demanda de GaAs ha seguido aumentando y continúa la investigación sobre la integración de GaAs en una amplia variedad de estructuras (Engelhard, Lyubinetsky, & Baer, 2016).

El recubrimiento de materiales es un proceso de alto impacto en la reducción de costos al momento de querer obtener un producto que cumpla ciertos requerimientos de propiedades mecánicas, ópticas, eléctricas, etc., debido a que no es necesario el 100% de un material que cubra estas necesidades, sino que solo es necesario la generación de capas ultra delgadas en un sustrato.

En muchas ocasiones, el tratar de generar avances en los procesos, en la composición de los materiales, o en algunas otras áreas de investigación, resulta ser bastante costoso obtener conocimiento por medio de la aplicación experimental, construir diversos prototipos o adquirir en el mercado un reactor CVD da como resultado una inversión elevada, y al no existir, como se mencionó al principio de este apartado, reglas generales en la deposición de capas delgadas, en el diseño del reactor, geometría de los sustratos, hay una brecha de investigación para mejorar este tipo de procesos, etc., la cual debe apoyarse con el uso de diferentes fuentes o herramientas tecnológicas, una de ellas, la simulación.

Resulta difícil generar recursos humanos con los conocimientos necesarios en este tipo de procesos de manufactura, la falta de equipos en los laboratorios para estudiantes de ingeniería y ciencias, debilita significativamente el desarrollo de los mismos; realizar una inversión económica para adquirir este tipo de equipos o generar numerosos prototipos tiene muchos obstáculos, y el Instituto Tecnológico de Orizaba no es la excepción, los alumnos muchas veces no cuentan con acceso a este tipo de tecnologías, las cuales como ya se mencionó en párrafos anteriores de este apartado, es de gran importancia conocer su desarrollo, generación, manipulación, etc.

1.3 JUSTIFICACIÓN

Como se ha descrito en el apartado anterior, para una gran diversidad de industrias, y especialmente a la de microelectrónica, les es de gran interés el desarrollo de este tipo de tecnologías, con el único propósito de reducir costos de producción, pruebas y prototipos.

A nivel mundial, el mercado de los semiconductores alcanzó un valor de ventas de 408,000 millones de dólares (mdd) el año pasado (2017), lo que implicó un crecimiento de 20% frente a 2016; México, que se ha consolidado como un jugador global en la fabricación de

productos electrónicos, teniendo también una oportunidad en los semiconductores, por mencionar algunas, en México operan algunas de las marcas más importantes a nivel global como Foxconn, Pegatron, Flextronics, Jabil, New Kinpo Group, Sanmina, Celestica, Benchmark Electronics, Universal Scientific Industrial (Ortiz, 2018).

En los párrafos anteriores se observa la importancia de generar conocimiento en esta disciplina, el incremento de las inversiones de empresas de diferentes giros y la necesidad de generar el recurso humano lo suficientemente capacitado, exige a estudiantes en áreas de ingeniería y ciencias a desarrollar este tipo de capacidades, vinculando los conocimientos teóricos, principalmente en termofluidos y algunas otras disciplinas presentes en el proceso de deposición de capas delgadas, como son: instrumentación y control, química, física, ingeniería de materiales, matemáticas, y muchas más, genera la necesidad de complementar a través del conocimiento experimental, por lo que crear un prototipo o diseñar un reactor CVD justifica el estudio que se pretende realizar en este proyecto.

La aplicación de arseniuro de galio en la industria microelectrónica no es reciente, a pesar de ello, se sigue manteniendo como uno de los materiales más importantes. Sus ventajas específicas se centran en la velocidad con que los electrones se mueven, en las operaciones con señales débiles y en la generación y detección de la luz. Estas ventajas revisten especial interés en muchas aplicaciones relacionadas con los ordenadores, con la recepción de señales de televisión y con la transmisión optoelectrónica de datos a través de redes de fibras ópticas. Los láseres y diodos emisores de luz de arseniuro de galio, que se utilizan en los equipos de reproducción de discos de audio y en las técnicas de producción de imágenes visuales, alcanzan una importante cifra de ventas (Brodsky, 1990).

1.4 OBJETIVO GENERAL.

- Modelar y simular el proceso físico en un reactor de deposición química de vapor CVD horizontal para deposición de capas delgadas de diferentes tipos de materiales a través de simulación en CAD y CAE.

1.5 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.

- Modelar un reactor de deposición química de vapor CVD horizontal.
- Simular el proceso de un reactor de deposición química de vapor CVD, correlacionando las diferentes variables físicas, químicas y geométricas que intervienen en el proceso; como temperatura, presión, velocidades, concentraciones o caudales volumétricos iniciales y posición del sustrato, etc.
- Analizar e identificar los parámetros o variables físicas, químicas y geométricas que tienen un mayor impacto en el desempeño óptimo de un reactor en la deposición de compuestos químicos en un sustrato.

2. MARCO TEÓRICO

2.1 ANTECEDENTES

La deposición de capas delgadas por medio de un reactor, es un proceso de gran importancia en la manufactura, con una amplia aplicación en la industria microelectrónica, herramental, automotriz, por mencionar algunas; razón por la cual estudios se han realizado para entender, analizar y mejorar el comportamiento químico y físico dentro de un reactor de deposición química de vapor CVD, o deposición física de vapor PVD, por sus siglas en inglés, que son algunos de los procesos existentes para la formación de recubrimientos.

Algunos investigadores han descrito que es complicado saber de manera experimental las transferencias de calor y masas durante el proceso de deposición de SiC en un reactor CVD para aplicaciones en microelectrónica, por lo que muestran algunos resultados apoyándose con modelación 3D, utilizando software computacional llamado CFDACE. Variando las posiciones de los sustratos, los autores muestran algunos de los parámetros que utilizaron en su investigación, como en el caso del caudal de los precursores, 12 sccm de silano (SiH_4), 4 sccm de propano (C_3H_8), y 60 sLm de hidrogeno (H_2) como gas portador, así como temperatura de operación de 1850 K y una presión de 250 mbar y dimensiones de los sustratos (obleas de 2" de diámetro) (Meziere, y otros, 2004).

Varios investigadores han resaltado la importancia de incluir modelos y simulación con ayuda de software CFD (Nishizawa & Pons, 2006), quienes intentan simular y variar las condiciones de entrada de los gases al reactor CVD para deposición de carburo de silicio (SiC), silano (SiH_4) como gas precursor y caudal de 6.67 sccm, hidrogeno (H_2) como gas portador y caudal de 40 sLm; que, por medio de esta clase de simulación resuelven ecuaciones de continuidad en el transporte de las fases gas en un reactor horizontal de

pared caliente y cuyo modelo numérico fue capaz de explicar casos experimentales en los procesos de crecimiento en las capas del sustrato.

Las simulaciones numéricas, nos permiten, desde un punto de vista teórico, analizar el impacto que tiene cada una de las variables que intervienen en el proceso de deposición de capas (Van Veldhuizen, Vuik, & Kleijn, 2007), quienes comparan diferentes métodos numéricos para una simulación de un proceso de CVD propuesto por otros autores de deposición de silicio a partir del silano (SiH_4) en una proporción de 0.001% como precursor, y He como gas portador en una proporción de 0.999% y una velocidad de entrada al reactor de 0.10 m/s (Coltrin, Kee, & Evans, 1989); principalmente se centran en el tiempo de resolución de un sistema de ecuaciones de define el transporte de masas en el proceso CVD, por medio de diferentes métodos numéricos, así como algunos resultados numéricos transitorios.

Como se mencionó anteriormente, uno de los enfoques en los que no se ha prestado mucha atención, es en la geometría del sustrato así como del reactor, uno de los pocos estudios que encontramos en la literatura (Sharafi & Achenie, 2007), que estudian el efecto de la geometría del sustrato en la tasa o crecimiento de la deposición de capas de sulfuro de zinc (ZnS) en un reactor CVD, al no existir en la literatura abierta una geometría estándar para el sustrato, simulan diferentes longitudes de sustratos para diferentes números de Reynolds, resolviendo un sistema de ecuaciones bidimensionales de conservación de masa y calor, por el método de elemento finito usando el software COMSOL Multiphysics; una velocidad inicial de 0.10 m/s, temperatura inicial de 298 K y del sustrato de 973 K, presentando algunos resultados y concluyendo, que la forma del sustrato cambia los patrones de flujo, creando una recirculación, variando la velocidad o tasa de deposición.

Al principio del apartado, se mencionó que pocos investigadores se han ocupado por el efecto de las geometrías, tanto del sustrato como del reactor (Cheng & Hsiao, 2008),

quienes a través de simulación, que incluye la resolución de ecuaciones diferenciales parciales, observan que el grado de inclinación del sustrato, así como una inclinación en la pared superior del reactor y en algunos casos, la incorporación de un nervio (pared saliente desde la parte superior del reactor), mejora la transferencia de calor, aumentando la velocidad de deposición pero la uniformidad en las capas no es la mejor; número de Reynolds de 100, presión de trabajo de 101 KPa, temperatura inicial de 300 K y dimensiones del reactor son algunos de los parámetros presentados por los autores.

Se puede encontrar en la literatura quienes obtienen buenos resultados en cuanto a los recubrimientos exigidos para ciertas aplicaciones, siguiendo una metodología o en muchas ocasiones de forma empírica (Di Lalla, Lasorsa, Morando, Morales, & Laferrara, 2010), que mencionan algunos parámetros para obtención de recubrimientos de nitruro de silicio (Si_3N_4) con la técnica de PECVD (Plasma enhanced chemical vapor deposition), en sustratos de acero AISI 410 de 2cm x 2cm x 1mm a 700 °C, para aplicaciones fotovoltaicas en la generación de energías, hexametildisilazano (HMDS) como gas precursor con un caudal de 350 cm³/min y gas reactivo nitrógeno N_2 con un caudal de 50 cm³/min.

Otros autores proponen un modelo multiescala en la deposición química de vapor CVD de carburo de silicio (SiC) (Moritz & Haussdorffstr, 2013), simulan un modelo microscópico y uno macroscópico; para el aspecto microscopio, resuelven un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias con ayuda de software matemático (MATLAB) para un modelo que incluye un gas precursor reactivo (tetrametilsilano), y para el modelo macroscópico lo simulan y resuelven con ayuda de software computacional de dinámica de fluidos CFD; temperaturas entre 400°C y 700°C y presiones entre 4.5×10^{-2} y 9.7×10^{-2} son algunos de los parámetros utilizados por los autores. Es importante señalar que resuelven para velocidades de reacción rápidas, lo cual para la vida real, las reacciones lentas resultan ser óptimas para una mejor deposición de capas delgadas.

Como se ha descrito, hay muchos parámetros que influyen en las reacciones para la formación de capas delgadas en los sustratos, como la temperatura, presión, el flujo de las fases de gas y la geometría del reactor, etc., por lo que resulta difícil diseñar un proceso óptimo, y el uso de modelado y simulación computacional se vuelve de vital importancia (Skibinski, Wejrzanowski, Teklinska, & Kurzydowski, 2015), presentaron un trabajo para mejorar el rendimiento del reactor AIXtron VP508 de deposición de películas de carburo de silicio (SiC), para aplicaciones en la industria microelectrónica, utilizando ANSYS, software que usa el método de volumen finito, a través de este software resuelven las ecuaciones diferenciales que describen la transferencia de masas y energía, para la cinemática del flujo, se apoyaron de ANSYS FLUENT, logrando simular diferentes caudales volumétricos para el gas portador (Hidrogeno H_2), manteniendo constantes los caudales de los precursores (Silano $SiH_4=20$ ml/min y propano $C_3H_8=12$ ml/min), temperaturas y presión de operación de 1893 K y 200 mbar respectivamente, así como la distribución de temperatura, lo cual observan, influye enormemente en la reacción química adecuada en la superficie del sustrato y en la velocidad de deposición de capas.

El desarrollo de reactores de CVD ha sido ampliamente estudiado, pero se sabe poco sobre su comportamiento dinámico de fluidos y los efectos asociados de transferencia de calor y masa (Passosa, Binellib, Jardini, Diasc, & Filho, 2015). Analizan el impacto de las condiciones de operación en la calidad y características del material a depositar, a través de un modelado con uso de la herramienta CFD de ANSYS CFX, simularon perfiles de velocidad y temperatura en un reactor CVD vertical, con el cual lograron definir un rango de temperatura de operación con el objetivo de obtener un flujo uniforme.

Se ha presentado un proceso de deposición de carburo de silicio SiC, en un reactor de deposición química de vapor vertical, con aplicación en la industria nuclear, simulan con apoyo de software computacional (COMSOL Multiphysics) (Kaushal, Prakash, Dasgupta, & Chakravartty, 2016), los patrones de flujo, transferencia de calor y concentración de especies, enfocándose únicamente en el régimen del flujo idóneo para una deposición de

capas uniformes, obteniendo que con un valor de numero de Reynolds $Re=54$ y una temperatura de 900 K se obtienen las mejores condiciones en la tasa de crecimiento.

Se ha visto hasta el momento, autores enfocados en encontrar los parámetros óptimos para reactores CVD, resaltando la importancia de mejorar estas condiciones, para las necesidades en las diferentes áreas o industrias de aplicación (Bernal, y otros, 2016) y (Bernal, y otros, 2017), ambos casos de aplicación de recubrimientos con la técnica PVD, el primero caso para deposición de capas nitruro de titanio TiN y carburo de silicio SiC, el segundo caso para recubrimientos de nitruro de cromo CrN y carburo de silicio SiC, en ambas investigaciones recubren un sustrato de acero de aleación 4140, resaltando las condiciones con las que se obtuvieron los resultados, por ejemplo, la temperatura de operación del reactor (450 °C), tiempo de operación (2 horas), hexametildisilazano (HMDS) como gas precursor y argón como gas de proceso, obteniendo evidencia de la deposición de los recubrimientos deseados así como una tasa de deposición de $1\mu\text{m} / \text{h}$ aproximadamente.

Uno de los trabajos más recientes, igual hace uso de la dinámica de fluidos computacional CFD, para simular un proceso de deposición de carburo de silicio en un reactor vertical, algunos autores obtienen datos de perfiles de flujo y temperatura, que junto con el diámetro de entrada de flujo, posición del sustrato y temperatura inicial de la pared del reactor, determinan factores clave para obtener recubrimientos deseados (Mollick, Venugopalan, & Srivastava, 2017).

Existe una gran variedad de enfoques en los estudios que se han realizado en este tipo de reactores, algunos se han ocupado por estudiar los fenómenos que se presentan en las reacciones químicas de las especies o precursores que se introducen al reactor. Se puede encontrar dentro de la literatura quienes analizan los métodos o formas de activación, el impacto de la temperatura en el proceso de las reacciones y deposición de las capas. De igual manera, se pueden visualizar estudios que se han enfocado en el sustrato, en su

composición o hasta en la posición dentro del reactor. Todos estos enfoques, por mencionar algunos, se han validado en su gran mayoría a través de aplicación de métodos numéricos, simulación numérica, entre algunos otros métodos encontrados en la literatura.

Con esta revisión bibliográfica, sobre los avances e investigaciones que se han realizado en el proceso de deposición de capas delgadas, se identifica la importancia del desarrollo en los últimos años en esta disciplina, a pesar de no ser una técnica nueva los procesos CVD o PVD, entendemos que no hay un conocimiento exacto que nos permita saber de qué manera obtendremos un recubrimiento óptimo, como se mostró, algunos se han preocupado por entender las variables o parámetros que intervienen, y muy pocos sobre la geometría del reactor o del sustrato y su impacto en la deposición de capas delgadas, por lo que se propone realizar una investigación acerca de estos últimos factores en un proceso CVD haciendo uso de herramientas computacionales que nos permitan simular esta técnica de recubrimientos y de esta manera, en un trabajo posterior lograr diseñar y construir un prototipo óptimo de un reactor CVD.

2.2 GENERACIÓN DE RECUBRIMIENTOS

En los últimos años, la tecnología de recubrimientos y capas delgadas ha alcanzado un fuerte desarrollo debido a la gran variedad de aplicaciones, que van desde los recubrimientos protectores y decorativos utilizados en la industria mecánica y del automóvil hasta las capas selectivas empleadas en paneles arquitectónicos, filtros ópticos, incluyendo las películas semiconductoras, optoelectrónicas y magnéticas, etc. Todo este desarrollo ha sido posible gracias a los avances recientes, tanto en la tecnología de vacío como en las técnicas de deposición, de análisis de superficies y de caracterización eléctrica, mecánica y óptica (Albella, 2003).

El objetivo fundamental de los recubrimientos es la modificación de las superficies de los sustratos, ya que como es sabido, muchas de las utilidades de los materiales dependen de las características y propiedades de su superficie, tales como: el desgaste, la fricción y su resistencia a la oxidación/corrosión. Por ejemplo en el caso de los aceros inoxidable, la formación de una pequeña monocapa de óxido es capaz de proteger el material frente a la corrosión en ciertos ambientes agresivos (Gómez & Castañeda, 2003).

Los recubrimientos en las últimas décadas, como se ha ido mencionando, han sido de gran importancia, por el simple hecho de mejorar las propiedades de un material, o mejor dicho del conjunto de un sustrato y un recubrimiento, ampliando de esta manera las características de este. Dicho de otra forma, este nuevo material compuesto, contará con las propiedades o características base del sustrato, que en ocasiones puede solo servir como soporte mecánico, y características o propiedades que normalmente superan a las del sustrato, del recubrimiento.

2.2.1 TÉCNICAS DE DEPOSICIÓN EN FASE VAPOR

Las técnicas de deposición en vacío a veces también se conocen como técnicas de deposición en fase vapor, ya que están basadas bien sea en la condensación física de un gas o vapor del material a depositar en una cámara de vacío (técnicas de deposición física o PVD), o bien en la reacción misma de gases o vapores introducidos en un reactor (técnicas de deposición químicas o CVD), para dar en ambos casos un producto sólido en forma de lámina delgada sobre un sustrato (Albella, Gomez-Aleixandre, & Ojeda, 1995).

Las tecnologías para la obtención de recubrimientos en fase vapor, han ocupado un lugar muy importante en muchos sectores de la industria tales como: la fabricación de componentes electrónicos, la óptica, industria aeronáutica, en el campo de las herramientas con altas durezas, catalizadores, implantes e instrumental y en el campo de la medicina entre otros (Bolívar, 2007).

2.2.2 DEPOSICIÓN FÍSICA DE VAPOR (PVD)

La deposición física de vapor (PVD) es una de las tecnologías básicas en microelectrónica y su aplicación a la deposición de biomoléculas permite utilizar de manera sencilla las propiedades únicas de los nanomateriales supramoleculares de péptidos y su integración en diversas aplicaciones amplias. La técnica de PVD se basa en el proceso de vaporización a partir de una fuente sólida en forma de átomos o moléculas. El flujo vaporizado se transporta a través del vacío, el medio ambiente gaseoso a baja presión o el plasma hacia el sustrato donde se condensa. En un proceso de evaporación de vapor térmico, el material fuente se calienta a una temperatura en la que hay una presión de vapor apreciable. El proceso requiere condiciones de vacío (al menos 10^{-4} mbar) para evitar colisiones del flujo de vapor con moléculas de gas cuando se transporta en una trayectoria de línea de vista desde la fuente hasta el sustrato. Típicamente, los procesos de PVD se usan para depositar películas con espesores en el rango de unos pocos nanómetros hasta docenas de micrómetros; sin embargo, también se pueden usar para formar recubrimientos multicapa, depósitos de composición gradual, depósitos muy gruesos y estructuras alineadas (Handelman, Beker, Amdursky, & Rosenman, 2012).

Una de las técnicas más versátiles para disponer de piezas con propiedades superficiales mejoradas, manteniendo inalteradas las del resto del material, se conoce como PVD (Physical Vapor Deposition). Esta técnica permite obtener depósitos submicrométricos de distintos metales o aleaciones sobre cualquier tipo de sustratos (Egidi, Mendive, Corengia, Quinteiro, & Ybarra, 2000).

Las técnicas de PVD más usadas se podrían agrupar en dos categorías:

- Técnicas de evaporación.

➤ Técnicas de pulverización o “sputtering”

Las primeras se caracterizan por la evaporación del material de partida, normalmente un material metálico, mediante un calentamiento muy intenso producido por resistencias eléctricas o corrientes inducidas, láseres, o por el bombardeo de un haz de electrones (EB-PVD, electrón “beam” -PVD). Entre estas técnicas suelen distinguirse la evaporación propiamente dicha (como EB-PVD) y la llamada “ion-plating” cuya principal diferencia es que la superficie a recubrir es bombardeada por los iones del gas residual. Esto permite una mayor limpieza del sustrato, por lo tanto se logra una mayor adhesión de la capa y además se obtienen capas con mejores propiedades mecánicas. El segundo grupo importante dentro de las técnicas de PVD está formado por los procesos de pulverización o “sputtering” que, a diferencia de los primeros, los átomos que constituyen el recubrimiento se obtienen mediante el bombardeo de unos blancos metálicos o cerámicos con iones de un gas inerte (argón) a baja energía (500-1000eV). Estos átomos que se desprenden del blanco viajan hasta la superficie de la muestra y se depositan sobre la misma en proporciones similares a la del blanco. Este proceso también permite la deposición simultánea de dos o más materiales, mediante la pulverización simultánea de los mismos, permitiendo de esta manera la obtención de recubrimientos binarios o ternarios (Albella, 2003).

2.2.3 DEPOSICIÓN QUÍMICA DE VAPOR (CVD)

La deposición química de vapor (CVD) ha crecido muy rápidamente en los últimos veinte años y las aplicaciones de este proceso de fabricación ahora son elementos clave en muchos productos industriales, como semiconductores, optoelectrónica, óptica, herramientas de corte, fibras refractarias, filtros y muchos otros. La CVD ya no es una curiosidad de laboratorio, sino una tecnología importante a la par de otras disciplinas

tecnológicas importantes, como la electrodeposición, la metalurgia del polvo o el procesamiento convencional de cerámica (Pierson, 1992).

Las razones del éxito de CVD son simples:

- CVD es una tecnología relativamente sencilla y flexible que puede adaptarse a muchas variaciones.
- Con CVD, es posible cubrir casi cualquier forma de casi cualquier tamaño.
- A diferencia de otras técnicas de película delgada, como la pulverización catódica, CVD también se puede utilizar para producir fibras, monolitos, espumas y polvos.
- CVD es económicamente competitivo.

La deposición química en fase de vapor (CVD) es un proceso muy versátil para la fabricación de recubrimientos, polvos, fibras, y componentes monolíticos. Esta técnica ha alcanzado su esplendor en la década de los años 70, debido a la gran variedad de posibilidades que ofrece, por ejemplo en el campo de la microelectrónica. Ha sido aplicado tradicionalmente, con el objetivo de producir gran número de capas de diferentes tipos de materiales conductores, semiconductores y aislantes. En la actualidad, existe una gran diversidad de elementos y compuestos que pueden ser depositados mediante esta técnica.

El CVD se podría definir como un proceso mediante el cual se deposita un sólido, como producto de las reacciones químicas entre los reactivos en estado gaseoso sobre una superficie que se encuentra a una elevada temperatura. Este tipo de reacciones pueden activarse por diferentes vías (calor, luz, plasma etc.), lo que conlleva a la formación de un producto sólido estable. Las reacciones que tienen lugar pueden ser de carácter homogéneo, en fase gaseosa, y/o heterogéneo, si se producen cerca de la superficie caliente, conduciendo la formación de polvos o películas respectivamente (Choy, Chemical vapour deposition of coatings, 2003).

Frente a otros métodos de deposición, el CVD tiene como ventaja el poder controlar con relativa facilidad la composición del material depositado, permitiendo, incluso, la preparación de materiales compuestos. Sin embargo, en muchos casos es difícil fijar la estequiometría del compuesto, ya que no es posible evitar que alguno de los subproductos quede incluido en el producto final.

2.2.3.1 REACTOR CVD

En general, un reactor de CVD consiste en una cámara de reacción equipada con un bloqueo de carga para el transporte y la colocación del sustrato en la cámara, un soporte de sustrato y un sistema de calefacción con control de temperatura. La función principal de la cámara del reactor CVD es calentar el sustrato a la temperatura de deposición.

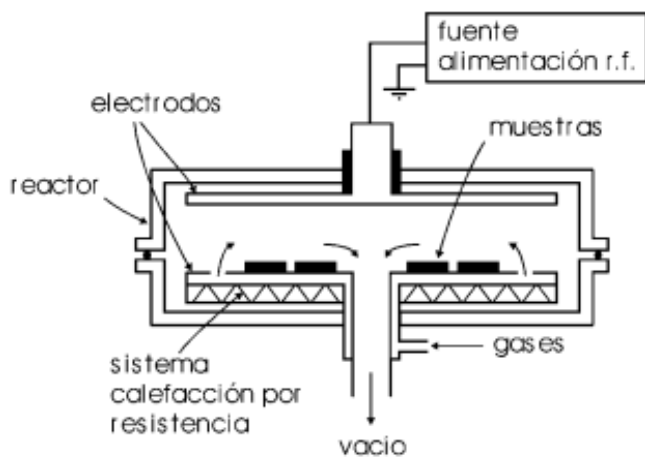


Figura 2. Reactor CVD de pared caliente.

El reactor de CVD puede ser una pared caliente o una pared fría. Un reactor de pared caliente utiliza un horno calentado en el que los sustratos se colocan para calentamiento indirecto. Se usa comúnmente un horno de calefacción de tres zonas resistiva para facilitar

el control de las zonas exteriores y permitir que se mantenga un perfil de temperatura uniforme en la zona central de deposición como se muestra en la figura 2. Aunque el reactor de pared caliente puede proporcionar un control de temperatura muy preciso, el interior del reactor de pared caliente también está recubierto, lo que da como resultado problemas de mantenimiento y una menor eficiencia de deposición. Además, también se produce el agotamiento de los reactivos gaseosos a lo largo del reactor.

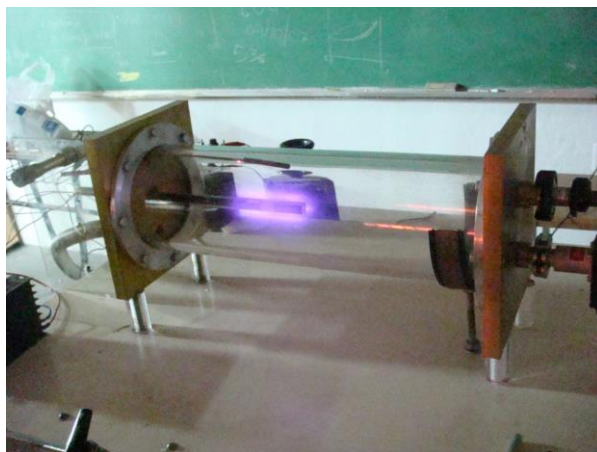


Figura 3. Reactor CVD (Universidad Tecnológica Nacional, Argentina)

Sin embargo, en un reactor de pared fría como el que se muestra en la figura 3, solo el sustrato se calienta, ya sea de forma inductiva o resistiva, y la pared del reactor se mantiene a una temperatura baja. La mayoría de las reacciones CVD son endotérmicas. Por lo tanto, la reacción de deposición ocurrirá en el sustrato calentado, y la deposición insignificante en la pared del reactor. Aunque estos reactores son más complejos, permiten un mayor control sobre el proceso de deposición y minimizan la deposición en las paredes del reactor y el agotamiento de los reactivos. Sin embargo, la convección térmica que se produce en un reactor de pared fría puede crear un gradiente de concentración de la especie reactiva y dar como resultado revestimientos no uniformes. Esta limitación puede superarse realizando la deposición de pared fría de CVD a una presión reducida.

Los factores que determinan el método de calentamiento son el tamaño y la geometría del sustrato, y si es conductor o no conductor. Hay varias configuraciones de reactor. Por ejemplo, oblea horizontal, vertical, semicubierto, barril y múltiple como se muestra en la figura 4.

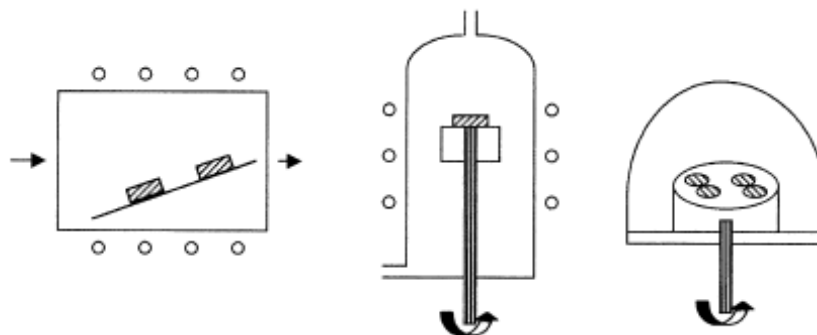


Figura 4. Diferentes configuraciones de reactores CVD: horizontal, vertical y semicubierto.

2.2.3.2 VENTAJAS Y DESVENTAJAS

Aunque el proceso CVD es un sistema químico complejo, tiene las siguientes ventajas distintivas (Choy, 2003):

- a) La capacidad de producir materiales altamente densos y puros.
- b) Produce películas uniformes con buena reproducibilidad y adhesión a tasas de deposición razonablemente altas.
- c) CVD es un proceso sin línea de vista con buen poder de lanzamiento. Por lo tanto, se puede usar para revestir uniformemente componentes de forma compleja y depositar películas con buena cobertura de conformación. Tal característica distintiva es mayor que el proceso de PVD.
- d) Tiene la capacidad de controlar la estructura cristalina, la morfología de la superficie y la orientación de los productos CVD controlando los parámetros del proceso.

- e) La tasa de deposición se puede ajustar fácilmente. La baja tasa de deposición se ve favorecida por el crecimiento de películas delgadas epitaxiales para aplicaciones microelectrónicas. Sin embargo, para la deposición de revestimientos protectores gruesos, se prefiere una alta velocidad de deposición y puede ser mayor que decenas de mm por hora. Esto se excede sustancialmente solo mediante técnicas tales como la pulverización de plasma.
- f) Costo de procesamiento razonable para la técnica de CVD convencional.
- g) La flexibilidad de utilizar una amplia gama de precursores químicos tales como haluros, hidruros, compuestos organometálicos que permiten la deposición de un amplio espectro de materiales, incluidos metales, carburos, nitruros, óxidos, sulfuros, materiales III-V y II-VI .
- h) Temperaturas de deposición relativamente bajas dependiendo del tipo de material de depósito (por ejemplo, entre 900 K y 1100 K en depósitos de arseniuro de galio), y las fases deseadas pueden depositarse in situ a bajas energías a través de reacciones en fase de vapor, y nucleación y crecimiento en la superficie del sustrato. Esto permite la deposición de materiales refractarios a una pequeña fracción de sus temperaturas de fusión.

Por el contrario, la deposición química de vapor CVD, tiene las siguientes desventajas:

- a) Peligros químicos y de seguridad causados por el uso de gases precursores tóxicos, corrosivos, inflamables y/o explosivos. Sin embargo, estos inconvenientes se han minimizado usando variantes de CVD tales como Deposición de vapor asistido por pulverización electrostática (ESAVD) y Deposición química de vapor de combustión (CCVD) que usan precursores más respetuosos con el medio ambiente.
- b) Difícil depositar materiales con estequiometría bien controlada usando precursores multifuente debido a que los precursores tienen diferentes tasas de vaporización. Sin embargo, esta limitación se puede superar usando precursores químicos de fuente única.

- c) El uso de un reactor y/o sistema de vacío más sofisticado mediante variantes de CVD tales como CVD a baja presión o ultra alta vacío, CVD asistido por plasma y CVD fotoasistido tiende a aumentar el costo de fabricación. Sin embargo, también existen otras variantes de CVD tales como la deposición de vapor químico asistido por aerosol (AACVD) y la deposición de vapor químico asistido por llama (FACVD) que no usan un reactor sofisticado y/o sistema de vacío. Tales variantes pueden proporcionar alternativas para aplicaciones donde el costo de producción es un problema.

2.2.3.3 FUNDAMENTOS DEL PROCESO

El CVD es una síntesis de procesos en la cual los constituyentes químicos reaccionan en la fase vapor cerca de una superficie caliente para formar un depósito sólido. En el proceso de CVD se combina varias disciplinas de la ciencia y la ingeniería, algunas de las más importantes son: la termodinámica, la física de plasma, la cinética, la fluido-dinámica y la química.

Un análisis teórico es, en la mayoría de los casos, un paso esencial que, si se lleva a cabo correctamente, debe predecir cualquiera de los siguientes:

- Química de la reacción (pasos intermedios, subproductos).
- Mecanismo de reacción.
- Composición del depósito (es decir, estequiometría).
- Estructura del depósito (es decir, la disposición geométrica de sus átomos).

Este análisis puede proporcionar una guía para un programa experimental y reducir considerablemente su alcance y ahorrar una gran cantidad de tiempo y esfuerzo. Tal análisis requiere una comprensión clara del proceso de CVD y una revisión de varias consideraciones fundamentales en las disciplinas de termodinámica, cinética y química. En

un reactor CVD se pueden llevar a cabo diferentes tipos de reacciones químicas, la tabla 1 muestra un ejemplo de ellas.

Tabla 1. Tipos de reacciones en un reactor CVD.

Reacción	Ejemplo
Pirolisis	$\text{CH}_{4(g)} \rightarrow \text{C}_{(s)} + 2\text{H}_{2(g)}$
Reducción	$\text{WF}_{6(g)} + 3\text{H}_{2(g)} \rightarrow \text{W}_{(s)} + 6\text{HF}$
Oxidación	$\text{SiH}_{4(g)} + \text{O}_{2(g)} \rightarrow \text{SiO}_{2(s)} + 2\text{H}_{2(g)}$
Hidrolisis	$2\text{AlCl}_{3(g)} + 3\text{H}_2\text{O}_{(g)} \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_{3(s)} + 6\text{HCl}_{(g)}$
Formación de un nitruro	$3\text{SiH}_{4(g)} + 4\text{NH}_{3(g)} \rightarrow \text{Si}_3\text{N}_{4(s)} + 12\text{H}_{2(g)}$
Formación de un carburo	$\text{TiCl}_{4(g)} + \text{CH}_{4(g)} \rightarrow \text{TiC}_{(s)} + 4\text{HCl}_{(g)}$
Dismutación	$2\text{GeI}_{2(g)} \rightarrow \text{Ge}_{(s)} + \text{GeI}_{4(g)}$
Reacciones organometalicos	$(\text{CH}_3)_3\text{Ga}_{(g)} + \text{AsH}_{3(g)} \rightarrow \text{GaAs}_{(s)} + 3\text{CH}_{4(g)}$

En general, el proceso de CVD implica los siguientes pasos clave (Choy, 2000):

- 1) Generación de especies reactivas gaseosas activas.
- 2) Transporte de la especie gaseosa a la cámara de reacción.
- 3) Los reactivos gaseosos experimentan reacciones en fase gaseosa formando especies intermedias.
- 4) Absorción de reactivos gaseosos en el sustrato calentado, y la reacción heterogénea se produce en la interfaz gas-sólido (es decir, sustrato calentado) que produce el depósito y las especies de subproductos.
- 5) Los depósitos se difundirán a lo largo de la superficie del sustrato calentado formando el centro de cristalización y el crecimiento de la película.

- 6) Los subproductos gaseosos se eliminan de la capa límite por difusión o convección.
- 7) Los precursores gaseosos sin reaccionar y los subproductos se transportarán lejos de la cámara de deposición.

La figura 5 muestra las fases clave que intervienen en un proceso de deposición de capas delgadas en un reactor CVD.

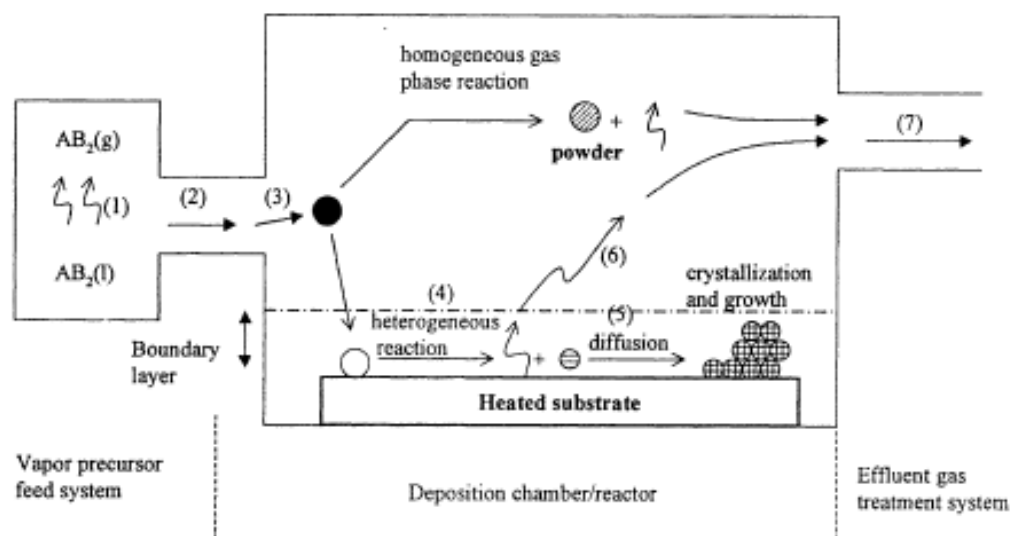


Figura 5. Principales fases en el proceso CVD (Choy, 2003).

2.2.3.4 TERMODINÁMICA

El estudio de la termodinámica en un proceso de CVD nos da información de las fases que se forman en el equilibrio, lo que permite tener un entendimiento previo de los procesos y de esta forma, realizar un diseño adecuado de los experimentos que permita la deposición y que además sirvan de guía para seleccionar las mejores condiciones a las cuales se pueda llevar a cabo el proceso de deposición. Antes de efectuar cualquier experimento de deposición mediante CVD es muy importante conocer la viabilidad de las reacciones, la naturaleza y cantidad de las especies sólidas y gaseosas presentes en el

sistema (Bolívar, 2007). Éstas pueden lograrse a partir de los cálculos de los equilibrios termodinámicos a determinadas condiciones del proceso tales como temperatura de deposición, presión y concentración de reactivos (Choy, 2003).

La viabilidad de una reacción CVD se puede determinar calculando la energía libre de Gibbs ΔG_r de la reacción para la temperatura y presión dadas. Para calcular la energía de reacción libre de Gibbs, ΔG_r , primero tenemos que determinar la energía libre de formación, ΔG_f , de las especies individuales de los reactivos y los productos, utilizando la siguiente ecuación (1) a una temperatura T , y seguido por la ecuación (2), donde ΔH_f^0 y S^0 son entalpía estándar de formación y entropía a 298 K, respectivamente, y C_p es la capacidad calorífica (Hunt, 1987).

$$\Delta G_f(T) = \Delta H_f^0(298) + \int_{298}^T C_p dT - T(298) - \int_{298}^T \left(\frac{C_p}{T}\right) dT \quad (1)$$

$$\Delta G_r = G_f(\text{productos}) - G_f(\text{reactivos}) \quad (2)$$

Los datos termoquímicos para muchas especies se pueden encontrar en la literatura (Bernard, 1981), (Kubachewski, Alcock, & Raynor, 1979), (Vandelbucke, 1981), así como en las tablas JANAF (JANAF Thermochemical tables, 1990), CRC Handbook of Chemical data (CRC, 1987). Una reacción ocurrirá cuando el valor de ΔG_r sea negativo, mientras que un ΔG_r positivo significa que la reacción no ocurrirá. Bajo ciertas circunstancias donde hay varias reacciones posibles, que son todas, termodinámicamente factibles, la reacción con el valor ΔG_r más negativo dominará porque tiene los productos de reacción más estables. La constante de equilibrio, K se puede determinar a partir de la ecuación 3, donde R es la constante de los gases y T es la temperatura de deposición.

$$K = \exp(\Delta G_r/RT) \quad (3)$$

2.2.3.5 CINÉTICA

La deposición química de vapor tiende a ser un proceso de no equilibrio; es decir, es un sistema químico complejo. La cinética de un proceso de CVD implica reacciones químicas en la fase gaseosa, en la superficie del sustrato, quimisorción y desorción. Idealmente, la relación de la cinética química de un proceso de CVD podría derivarse del análisis de todas las vías de reacción posibles, incluidas las reacciones secuenciales y competitivas (Choy, 2003). Los fundamentos de la cinética de deposición y las posibles vías de reacción se han estudiado en detalle solo en sistemas químicos industriales importantes y limitados, como del silicio (Si), (Jensen, *Micro-reaction engineering applications of reaction engineering to processing of electronic and photonic materials*, 1987) y (Gates, 1992), y arseniuro de galio (GaAs), (Omstead, Van SicklePeter, Lee, & Jensen, 1988), para la industria de los semiconductores. Por lo tanto, no existe un modelo predictivo para analizar el crecimiento dominado en la superficie, las órdenes de reacción y la energía de activación obedecen a un amplio rango de temperatura y presión.

En los procesos de CVD tienen lugar una secuencia de eventos que se pueden resumir de la siguiente forma y que se muestran en la figura 6 (Pierson, 1992):

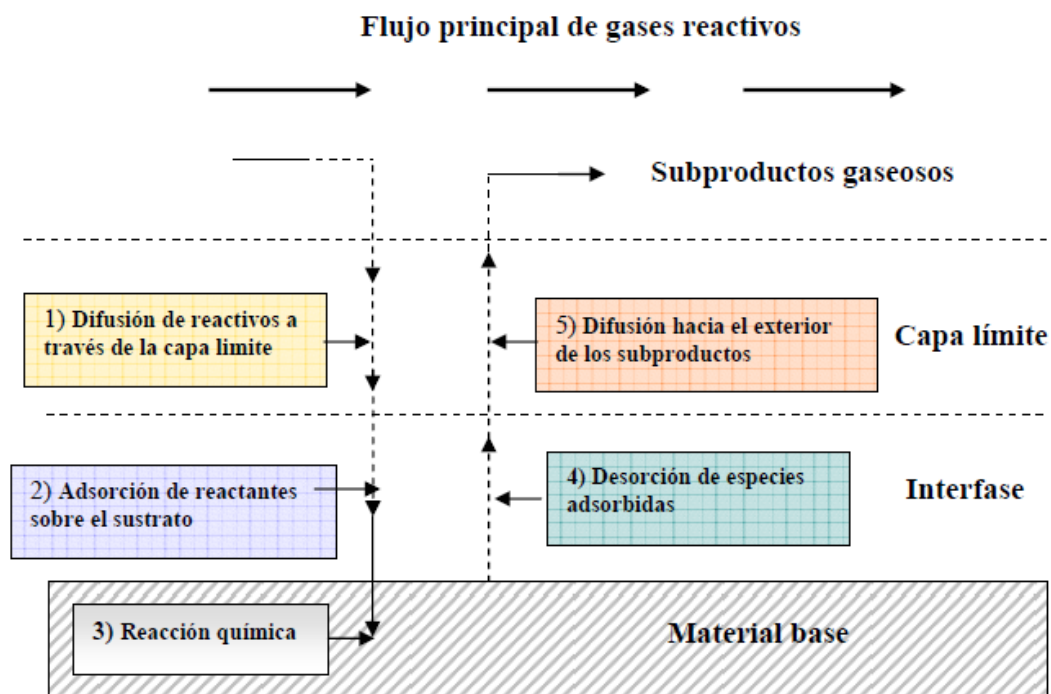


Figura 6. Procesos que ocurren en la deposición química de vapor CVD (Bolívar, 2007).

- Los reactivos gaseosos son introducidos dentro del reactor mediante un flujo forzado.
- Los gases difunden a través de la capa límite.
- Los gases entran en contacto con la superficie del sustrato.
- Las reacciones de deposición tienen lugar sobre la superficie del sustrato.
- Los subproductos de la reacción difunden desde la superficie, hacia el exterior a través de la capa límite.

Como resultado de los costosos instrumentos analíticos de superficie in situ (especialmente aquellos que requieren el uso de UHV), hay datos limitados sobre los mecanismos de reacciones superficiales de la mayoría de los procesos de CVD, energía de activación o adsorción y los factores pre exponenciales. Un método ampliamente utilizado para obtener datos cinéticos de CVD es determinar la velocidad de deposición

experimentalmente en función de los parámetros del proceso (por ejemplo, temperatura de depósito, presión, concentración de reactivos) y relacionarlos con las posibles reacciones limitantes de la velocidad. Una muestra de ello es la ecuación (4) de Arrhenius:

$$\text{Relación de deposición} = A \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (4)$$

En donde A es una constante, E_a es la energía de activación aparente, R es la constante universal de los gases y T es la temperatura de deposición.

2.2.3.6 FENOMENOS DEL TRANSPORTE

Los procesos de dinámica de fluido y transporte de masas se pueden expresar matemáticamente y se pueden obtener modelos realistas para usar en las predicciones de diseño y operación de un reactor CVD, (Jensen, 1984), (Rosenberger, 1987), (He & Sahai, 1987). Estos modelos están diseñados para definir los fenómenos y efectos complejos de convección que ocurren en un reactor y resuelven las ecuaciones completas de transferencia de calor, balance de masas y momento. Se pueden usar para optimizar los parámetros de diseño de un reactor de CVD, como la geometría del sustrato, el ángulo de inclinación, los caudales entre otros parámetros. Para obtener un análisis completo y exhaustivo, estos modelos se deben complementar con observaciones experimentales, como los patrones de flujo mencionados anteriormente, como por ejemplo, con la espectroscopia láser Raman (Breiland, Ho, & Coltrin, 1987).

Los fenómenos de transporte incluyen:

- Dinámica de fluidos, es decir, flujo de fluido, transferencia de masa y transferencia de calor de los reactivos.

- Transporte masivo de reactivos cerca de la superficie del sustrato, difusión a través de la capa límite del sustrato, y desorción de los subproductos de los sustratos, y transporte de los subproductos lejos del sustrato.

Los principales parámetros que afectan la naturaleza del flujo de gas en reactores de CVD son (Choy, 2003):

- Temperatura del reactor y distribución de temperatura en el sistema.
- Presión del reactor.
- Tasa de flujo de gas.
- Característica del gas (por ejemplo, densidad).
- Geometría del reactor.

2.2.3.7 DINÁMICA DE FLUIDOS

La geometría compleja del reactor y las grandes características de gradiente térmico entre la entrada y el reactor influyen en los fenómenos de transporte. Los conceptos básicos de la mecánica de fluidos se pueden aplicar para describir la dinámica del fluido y la transferencia de masa en la fase gaseosa. El flujo de fluido en un proceso de CVD se puede caracterizar por varios parámetros adimensionales como el número de Reynolds (Re) en la ecuación (5) y el número de Knudsen (Kn) en la ecuación (6) de la siguiente manera:

$$Re = \frac{\rho u}{\mu} \quad (5)$$

En donde ρ es la densidad, u es la velocidad del flujo y μ es la viscosidad.

$$Kn = \frac{\lambda}{L} \quad (6)$$

En donde λ es distancia promedio recorrida y L es la longitud.

El número de Reynolds Re define el límite entre los regímenes de flujo laminar y turbulento ($Re > 2100$) mientras que el número de Knudsen Kn define los límites entre flujo laminar, intermedio y molecular (Roth, 1990). La mayoría de los reactores de CVD operan en régimen laminar ($Re < 100$) debido a la baja velocidad de flujo del precursor. Otros parámetros adimensionales que son importantes en la caracterización de los procesos de transporte son los números de Prandtl, Schmidt, Grashof, Peclet y Damkohler (Jensen, 1993). Por ejemplo, los números de Rayleigh y Grashof indican la fuerza de la convección natural en el sistema; el número de Peclet predice cualquier difusión de impurezas en la zona de deposición; y el número de Damkohler en fase gaseosa estima el tiempo de residencia del reactante.

2.2.3.8 INSTRUMENTACIÓN EN UN REACTOR CVD

En todos los sistemas de CVD se pueden diferenciar de manera general, tres componentes principales como los mostrados en la figura 7.

- a) Sistema de suministro de precursores gaseosos.
- b) Reactor de CVD.
- c) Sistema de tratamiento de gases y subproductos residuales.

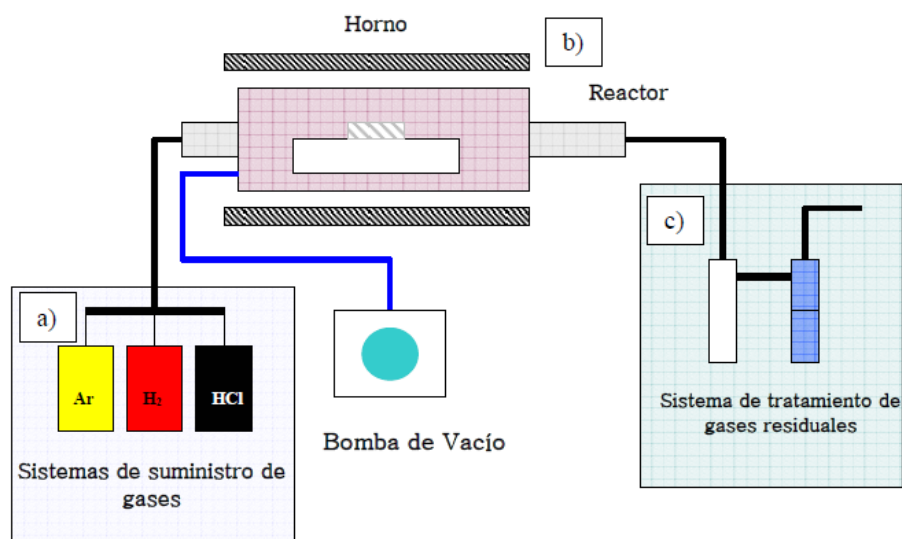


Figura 7. Componentes principales en un reactor CVD.

2.2.3.9 PRECURSORES Y VARIABLES

Los precursores comunes utilizados en el proceso de CVD son metales e hidruros metálicos, haluros y halohidruros y compuestos metalorgánicos. En general, los halogenuros metálicos y las halohiridas son más estables que los hidruros correspondientes. Los precursores metalorgánicos ofrecen la ventaja de menores temperaturas de reacción y deposición que los haluros e hidruros y son menos tóxicos y pirofóricos.

Los principales precursores químicos utilizados en CVD de películas y recubrimientos y las reacciones químicas asociadas pueden clasificarse en los siguientes tipos de reacciones: descomposición térmica (pirolisis), reducción, oxidación, hidrólisis, nitruración, desproporción y síntesis. La Tabla 1 proporciona ejemplos de los principales sistemas de precursores químicos y las reacciones químicas relacionadas. Las características generales de estas reacciones se destacan (Vescan, 1995).

La elección de un precursor se rige por ciertas características generales que se pueden resumir de la siguiente manera:

- Estabilidad a temperatura ambiente.
- Capacidad de reaccionar limpiamente en la zona de reacción.
- Suficiente volatilidad a baja temperatura para que pueda transportarse fácilmente a la zona de reacción sin condensarse en las líneas.
- Capacidad de ser producido en un alto grado de pureza.
- Capacidad de reaccionar sin producir reacciones secundarias o reacciones parasitarias.

2.3 MÉTODO DE ELEMENTO FINITO (FEM)

El método de los elementos finitos (MEF en castellano o FEM en inglés) es un método de cálculo utilizado en diversos problemas de ingeniería, que se basa en considerar al cuerpo o estructura dividido en elementos discretos, con determinadas condiciones de vínculo entre sí, generándose un sistema de ecuaciones que se resuelve numéricamente y proporciona el estado de tensiones y deformaciones. También se utiliza en matemáticas como método nodal aproximado para resolver ecuaciones diferenciales en forma numérica.

Es un procedimiento numérico aplicable a un gran número de problemas con condiciones de borde impuestas (en las estructuras las condiciones de borde serían: restricciones y cargas externas). Varios de estos problemas no tienen solución analítica o es muy difícil obtenerla, por lo que se convierte en la única alternativa de resolución. Con este método se pueden resolver sistemas los cuales no son fáciles de resolver mediante modelos matemáticos simples (Pezzotti & Antico, 2007).

Existen varios métodos para el análisis de este tipo de fenómenos que se llevan a cabo en el proceso deposición química de vapor, entre los cuales se encuentra el modelado matemático, mediante herramientas CAE, experimentalmente, entre otros métodos. Uno de los métodos mayormente utilizados en ingeniería es el modelado a través de herramientas computacionales CAE, volviéndose más efectivo cuando se integra con otras herramientas como software CAD. El diseño asistido por computadora permite a los diseñadores explorar múltiples conceptos más rápidamente, visualizar con mayor precisión y eliminar el error de los dibujos de ingeniería (Bryden, 2014). La integración CAD/CAE ofrece a los diseñadores y analistas la oportunidad de compartir datos durante todo el proceso análisis de algún fenómeno en específico. Tal integración reduce los costos de desarrollo y respalda el desarrollo de mejores resultados. Las aplicaciones de mallado de elementos finitos (FEM) integradas con datos de modelos sólidos de sistemas CAD representan un subconjunto importante de la integración CAD/CAE (Kirkwood & Sherwood, 2018).

2.3.1 PROCESO DE ANALISIS POR ELEMENTOS FINITOS

El proceso de análisis por elementos finitos se puede describir como:

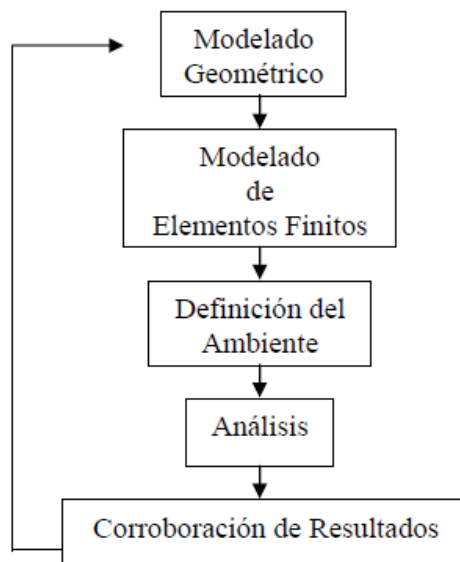


Figura 8. Proceso de análisis por elemento finito.

- Modelado Geométrico: Creación del modelo matemático del objeto o del conjunto. Reproducción del sólido en forma precisa y de la geometría de la superficie.
- Modelado de Elementos Finitos: Subdividir la geometría del modelo en elementos discretos. Asignar las propiedades del material y del elemento.
- Definición del Ambiente: Aplicar las cargas y las condiciones de borde para simular el ambiente de la operación.
- Análisis: Computar los resultados (tensiones, deformaciones, etc.) a partir de análisis estáticos, dinámicos o de transferencia de calor.
- Corroboración de Resultados: Comparar los resultados con los criterios de diseño. Rediseñar la estructura y repetir el proceso si fuese necesario.

2.4 SIMULACION COMPUTACIONAL

La simulación computacional ha probado ser una herramienta muy eficaz en casi todas las áreas de la ciencia moderna. En las diversas ramas de la ingeniería esto es innegable, por cuanto hoy no se concibe el diseño de ninguna instalación sin antes esta haber sido simulada y sus parámetros optimizados por este medio (Rosales, Andrade, Gámez, Rojas, & Pérez, 2008).

Los sistemas asistidos por computadora son sistemas dedicados principalmente a apoyar actividades en el área de proyección y creación de salida gráfica. Quizás se utilicen con mayor frecuencia en la industria de la ingeniería, donde se utilizan en todas las fases de producción, desde el diseño de piezas de la máquina hasta la planificación de la producción, el montaje, el almacenamiento y el transporte. Hoy en día también se utilizan en otros sectores industriales y en diferentes niveles de gestión. Permiten la realización de diferentes actividades de ingeniería, como dibujar, construir, dimensionar y proyectar,

pero también muchas actividades administrativas, como archivar, buscar, reproducir, etc., de forma más rápida y sencilla (Kuna, Hašková, Palaj, Skačan, & Záhorec, 2018).

Desde el principio, es importante definir y explicar cuáles de los sistemas asistidos por computadora se definen como CAD, es decir, sistemas de diseño asistido por computadora (Drawing) y cuáles se definen como CAE, es decir, sistemas de ingeniería asistida por computadora. Los sistemas CAD se definen como aquellos que soportan principalmente el campo del dibujo y la creación de documentación técnica, y los sistemas CAE son aquellos que admiten el modelado 3D y simulaciones en el entorno informático de la realidad virtual.

2.4.1 DISEÑO ASISTIDO POR COMPUTADORA (CAD)

CAD significa Diseño Asistido por Computador (del inglés Computer Aided Design) y representa el conjunto de aplicaciones informáticas que permiten a un diseñador “definir” el producto a fabricar (Brunet, 1986). Permite al diseñador crear imágenes de partes, circuitos integrados, ensamblajes y modelos de prácticamente todo lo que se le ocurra en una estación gráfica conectada a un computador. Estas imágenes se transforman en la base de un nuevo diseño, o en la modificación de uno previamente existente. A éstas se le asignan propiedades geométricas, cinéticas, químicas y físicas, entre otras, mejorando el diseño sobre papel. De esta manera, se consigue una mayor velocidad en el diseño, al existir la posibilidad de corregir, encargándose el computador de recalcular el dibujo. Existen sistemas CAD especiales para aplicaciones mecánicas, electrónicas y de arquitectura, los cuales permiten una mejor interrelación con sus respectivos sistemas CAE.

A continuación se enumeran algunas de las características de las aplicaciones CAD que permiten especificar y formalizar la representación inequívoca de una pieza o sistema:

- CAD 2D: sustitutivo básicamente del tablero de dibujo, la representación de los objetos es bidimensional; la información geométrica de que dispone el ordenador es bidimensional, es decir, está contenida en un plano. Las vistas son generadas de forma independiente y no existe capacidad de asociación entre las mismas. Su ámbito de aplicación es muy amplio.
- Modelado geométrico 3D: descripción analítica de la volumetría, contorno y dimensiones del objeto o sistema, incluyendo relaciones geométricas e incluso algebraicas entre los distintos componentes.

El uso de la tecnología CAD supone para el diseñador un cambio en el medio de plasmar los diseños industriales. Esta revolución en el campo del diseño ha venido de la mano de la revolución informática. Las mejoras que se alcanzan son:

- Mejora en la representación gráfica del objeto diseñado: con el CAD el modelo puede aparecer en la pantalla como una imagen realista, en movimiento, y observable desde distintos puntos de vista.
- Mejora en el proceso de diseño: se pueden visualizar detalles del modelo, comprobar colisiones entre piezas, interrogar sobre distancias, pesos, inercias, etc. En conclusión, se optimiza el proceso de creación de un nuevo producto reduciendo costes, ganando calidad y disminuyendo el tiempo de diseño.

En resumen, se consigue una mayor productividad en el trazado de planos, integración con otras etapas del diseño, mayor flexibilidad, mayor facilidad de modificación del diseño, ayuda a la estandarización, disminución de revisiones y mayor control del proceso de diseño (Serrano, 2012).

2.4.2 INGENIERIA ASISTIDA POR COMPUTADORA (CAE)

Una herramienta CAE se traduce como Ingeniería Asistida por Computador y es un conjunto de programas informáticos que permiten analizar y simular el comportamiento físico de un producto diseñado previamente mediante CAD.

Dentro del CAE, existe una metodología muy importante denominada MEF (Método de Elementos Finitos). Esta metodología ha sido generalizada hasta constituir un potente método de cálculo numérico, capaz de resolver cualquier problema de física como un sistema de ecuaciones, abarcando los problemas de la resistencia de materiales, mecánica de fluidos, transferencia de calor, magnetismo, etc.

2.4.2.1 DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (CFD)

La dinámica de fluidos computacional (CFD) combina teorías de continuidad y discretas para el modelado de fluidos con algoritmos computacionales para la simulación de fluidos. Es un área de investigación importante ya que existe una amplia gama de fenómenos naturales que se pueden modelar a través de la teoría de fluidos. Algunos ejemplos comunes de ingeniería son bombas, ventiladores, turbinas, aviones, barcos, ríos, molinos de viento, tuberías y, más recientemente, la hemodinámica del sistema arterial (Powell G. , 2016).

El punto de partida de cualquier método numérico es el modelo matemático del fenómeno físico que se estudiará, generalmente expresado como ecuaciones diferenciales o ecuaciones integro-diferenciales con condiciones de contorno. Para la dinámica de fluidos computacional (CFD), se utilizan las ecuaciones de Navier-Stokes.

Por lo tanto, para la solución del problema, después de definir el modelo matemático, se realiza la discretización temporal y espacial, y finalmente, se convierte en ecuaciones algebraicas para la solución numérica. Por lo tanto, la solución no será continua sino discreta en el espacio y el tiempo. Por lo tanto, es crítico que la discretización espacial

realizada se base en diferentes formulaciones del problema matemático tales como: diferencia finita, elemento finito y volumen finito. Por lo tanto, la geometría se representa como mallas: estructuradas, no estructuradas e híbridas.

Las ecuaciones de Navier-Stokes son las ecuaciones básicas que rigen para un fluido viscoso que conduce el calor. Es una ecuación vectorial formulada aplicando la segunda ley de Newton a un fluido, junto con la suposición de que la tensión en el fluido es la suma de un término viscoso difusivo y un término de presión. Esto también se llama la conservación de la ecuación de momento lineal (Ecuación 7). Se complementa con la ecuación de conservación de masa (Ecuación 8) (también llamada ecuación de continuidad) y la ecuación de conservación de energía (Ecuación 9). A menudo, el término ecuaciones de Navier-Stokes se utiliza para referirse a todas estas ecuaciones diferenciales.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}[\rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \tau_{ji}] = 0 \quad i = 1,2,3 \quad (7)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}[\rho u_j] = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \epsilon_0) + \frac{\partial}{\partial x_j}[\rho u_j \epsilon_0 + u_j p + q_j - u_i \tau_{ij}] = 0 \quad (9)$$

El método computacional CFD está en continua evolución y, en paralelo con los avances computacionales, lo permite numerosas mejoras, como el hecho de trasladar simulaciones 2D a 3D. Los campos son innumerables y algunas publicaciones muestran aplicaciones genéricas de ingeniería usando esta técnica (Ku Shaari & Awang, 2015).

Los sectores productivos donde se aplica incluyen aeroespacial, automoción, arquitectura, agricultura, medicina, ingeniería civil, química, física nuclear, cuestiones térmicas, hidráulica, cine, gráficos por computadora, procesos industriales, tecnologías de combustión para el medio ambiente, la industria del acero, fabricación de vidrio ,

semiconductores, turbo maquinaria, agua y alcantarillado, entre otros. En general, la mayoría de las simulaciones CFD existentes presentan soluciones a varios problemas: aspectos básicos de la mecánica de fluidos computacional, flujo compresible, transferencia de calor y radiación, combustión, flujo turbulento, flujo multifásico, cavitación, reacciones químicas, dinámica sólida, flujo supersónico, motores, turbo máquinas y acústica, entre otros.

Actualmente, existe una gama de diferentes opciones de software CFD y solucionadores, y son muy numerosas tanto en la elección del software comercial como en el software libre. Una ventaja adicional del software libre en comparación con el software comercial implica la personalización, es decir, puede producir nuevos solucionadores o modificar algunos de ellos al cambiar el código en el software de código abierto existente en el mercado; esto es, por lo tanto, un paso más hacia la optimización del proceso con el beneficio adicional de reducir los costos. La lista de software y/o solucionadores comerciales y gratuitos es muy amplia. La Tabla 2 muestra una selección de software y solucionadores, que indica el desarrollador, el tipo de licencia y el sitio web.

Tabla 2. Solucionadores y software CFD

Solucionador/Software	Desarrollador	Tipo de licencia	Website
Fluent/CFX/CFD/CFD-Flo/CFD-Professional/Polyflow	ANSYS	Comercial	http://www.ansys.com/Products/Fluids
Simulation CFD/CFD Advanced/CFD Motion	Autodesk	Comercial	http://www.autodesk.com/products/cfd/overview
Solidworks Flow Simulation	Dassault Systèmes	Comercial	http://www.solidworks.es/sw/products/simulation/flow-simulation.htm

NX Flow/NX Advanced Flow/NX Advanced Simulation/NX Thermal/NX Advanced Thermal/NX Advanced Fluid Modeling	Siemens PLM Software	Comercial	http://www.plm.automation.siemens.com/es_es/products/nx/for-simulation/flow/cfd-modeling.shtml
COMSOL Multiphysics CFD.	COMSOL Inc.	Comercial	https://www.comsol.com/comsol-multiphysics .
PowerFlow/PowerTHERM /PowerCOOL	Exa Corporation	Comercial	http://exa.com/product/powerflow
simFlow	Altizar Limited	Comercial/Free	https://sim-flow.com/
ELMER	IT Center for Science	Free	https://www.csc.fi/web/elmer Powell, G.
EPANET	EPA	Free	http://www.instagua.upv.es/Epanet/ (in Spanish)

La mayoría de las principales compañías que ofrecen software CAD (Computer-Aided Design) tienen su propio software CFD. Estos incluyen compañías como Autodesk, Dassault Systems, Siemens PLM o Altair Limited, que son como una herramienta múltiple que toca todas las ramas del diseño y la ingeniería. Las ventajas de este software CFD son su simplicidad y la posibilidad de realizar una prueba completa del elemento que acaba de diseñarse con el mismo software, e incluso hacer un análisis estructural con FEM (método de elementos finitos) en el mismo paquete. A veces, sin embargo, surge el problema de que estos tienden a ser demasiado simples para futuras investigaciones en el campo de la dinámica de fluidos.

Por otro lado, algunos software's se han especializado en un campo dado y ofrecen una excelente calidad en su área, con una variedad y cantidad extraordinaria. Por ejemplo, el

módulo mezclador de COMSOL se puede usar para calcular el flujo en mezcladores industriales, Star-CD para motores de combustión interna, ANSYS CFX para el cálculo del flujo en turbo máquinas, EPANET para software libre de análisis de redes hidráulicas, como agua redes de suministro, entre muchos otros.

3. CASO DE ESTUDIO (DEPOSITOS DE ARSENIURO DE GALIO GaAs)

El arseniuro de galio (GaAs), es un compuesto que tiene como principal fuente de aplicación la industria de los semiconductores, principalmente debido a sus propiedades eléctricas y electrónicas que éste posee.

Como se ha mencionado en los apartados anteriores, el recubrimiento de materiales con algún compuesto en específico es de vital importancia para mejorar ciertas propiedades físicas o químicas y reducir costos, evitando utilizar un material del compuesto deseado en todo su cuerpo. Un método para generar recubrimientos o crecimientos epitaxiales de capas delgadas en un sustrato, es la denominada deposición química de vapor (CVD). El modelo propuesto simula una primera fase del proceso de deposición en un reactor CVD, la fase de disociación, el ingreso de los precursores trimetil-galio ($\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$) y arsano o hidruro de arsénico (AsH_3), así como del gas transportador, hidrogeno (H_2), los cuales son los gases necesarios para la formación, en su última fase de especies intermedias generadas, de depósitos de arseniuro de galio GaAs.

El modelo que se presenta en este trabajo en el proceso de deposición de arseniuro de galio (GaAs) en un sustrato, resulta de la integración de las herramientas computacionales CAD y CAE, con el propósito de incluir de manera puntual los parámetros geométricos, físicos y químicos que intervienen en la generación optima de depósitos.

Posteriormente a la integración de las herramientas computacionales, junto con sus módulos de análisis necesarios, se presentarán los diferentes resultados obtenidos, esperando la presencia de concentraciones molares de las diferentes especies intermedias de las reacciones que permitan un posterior análisis en trabajos futuros de las tasas de deposición.

3.1 CONSTRUCCIÓN DEL MODELO EN SOFTWARE CAE

En la primera fase del modelo propuesto, es indispensable hacer uso del diseño asistido por computadora CAD, herramienta que permite interactuar con diferentes variables geométricas, las dimensiones y posición del sustrato, así como de las dimensiones del reactor; en el apartado 3.1.1 se especifican los valores de las dimensiones del sustrato y del reactor propuestos para la modelación y simulación del presente trabajo.

Una vez determinado el modelo geométrico del sustrato y reactor, se interactuará con ingeniería asistida por computadora CAE, mediante los diferentes módulos de análisis físicos y químicos en conjunto con el modelo CAD propuesto.

En cuanto a los módulos de análisis CAE que se presentarán a continuación encontramos los módulos de transferencia de calor, transporte de especies diluidas, reacciones químicas dinámica de fluidos computacional CFD.

La herramienta computacional que se utiliza para resolver el modelo propuesto desarrolla y resuelve sus ecuaciones gobernantes mediante el método de elementos finitos (MEF), por lo que se utiliza un mallado que se especificará más adelante en el apartado 3.1.6.

3.1.1 MODELADO CAD DE REACTOR CVD

La intención de este trabajo es aprovechar las herramientas CAD y CAE para el análisis de un proceso de depósitos de recubrimientos. Para ello, en primer lugar se genera una geometría propuesta para un reactor CVD horizontal basándonos en dimensiones aproximadas del propuesto por Ingle y otros (Ingle, Theodoropoulos, Mountziaris, & Smith, 1996), únicamente se considera las dimensiones del reactor, las dimensiones o geometría

del sustrato es más conveniente generarla en la herramienta CAE, con el fin de que el software pueda diferenciar una de otra.

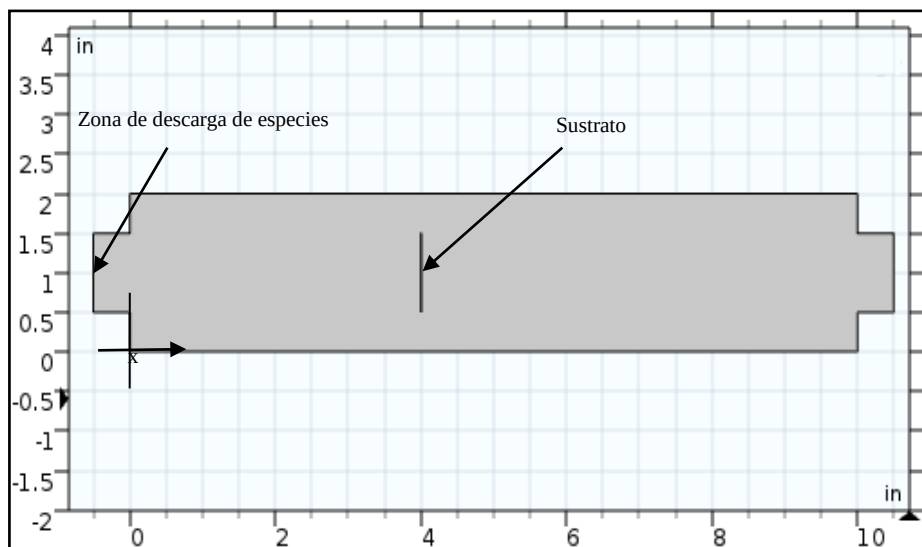


Figura 9. Modelado CAD del reactor CVD.

Como se muestra en la figura 9, es posible generar la geometría deseada para el reactor CVD, lo que permite que los resultados sean más cercanos a un caso real. La cámara principal del reactor es de 2 in de diámetro, y la entrada y salida de gases es de 1 in. El modelado del reactor mediante herramientas CAD, nos permite generar cualquier geometría deseada, y analizar con un alto rango, el impacto de este en la deposición de especies en un sustrato.

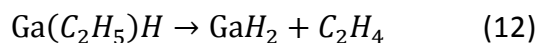
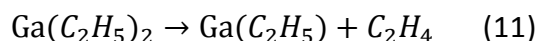
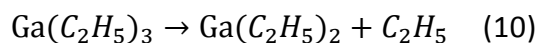
3.1.2 MÓDULO CAE DE REACCIONES QUÍMICAS

Para el módulo de ingeniería de reacciones químicas, se consideran como precursores trimetil-galio ($\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$) y arsano o hidruro de arsénico (AsH_3), además de hidrogeno (H_2) como gas transportador, ambos precursores se descomponen de su fase gaseosa en las diferentes especies intermedias hasta alcanzar la formación de arseniuro de galio (GaAs),

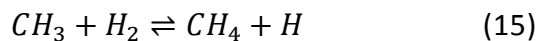
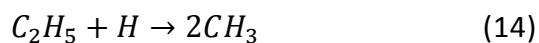
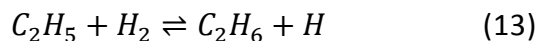
la fase final de reacción en su fase sólida. Estos productos o especies posteriormente se adsorben y reaccionan sobre un sustrato o muestra, para formar películas delgadas de arseniuro de galio (GaAs). Los valores para el modelo de balances de momento, energía y masa, así como la cinética de adsorción, para las diferentes especies generadas fueron obtenidos de una herramienta computacional de reacciones químicas.

A continuación se presentan las diferentes reacciones químicas, incluidas en el proceso de descomposición de ambos precursores, en sus diferentes especies intermedias, hasta su etapa final, la especie en su fase solida de arseniuro de galio (GaAs).

1) Descomposición en su fase gaseosa del precursor trimetil-galio ($\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$):

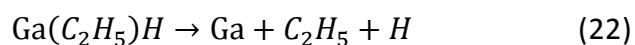
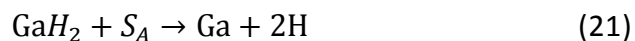
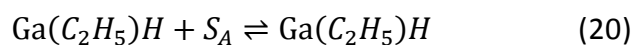
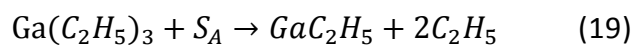


2) Descomposición en su fase gaseosa de especies intermedias:





- 3) Reacciones superficiales que involucran a las especies Ga y As. S_A y S_G representan sitios superficiales, que corresponden a enlaces con átomos de As o Ga, respectivamente.

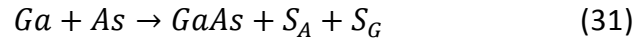
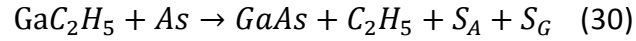


- 4) Reacciones superficiales de fragmentos de carbón e hidrogeno:





5) Reacciones superficiales que permiten el crecimiento de arseniuro de galio (GaAs):



La dependencia de la temperatura de las velocidades de reacción se incluye a través de las expresiones de Arrhenius como se muestra en la ecuación (32) para las constantes de velocidad:

$$k = AT^n \exp\left(-\frac{E}{R_g T}\right) \quad (32)$$

En donde A es un factor de frecuencia, T es la temperatura (K), n es el exponente de la temperatura, E es la energía de activación, R_g es la constante ideal de los gases.

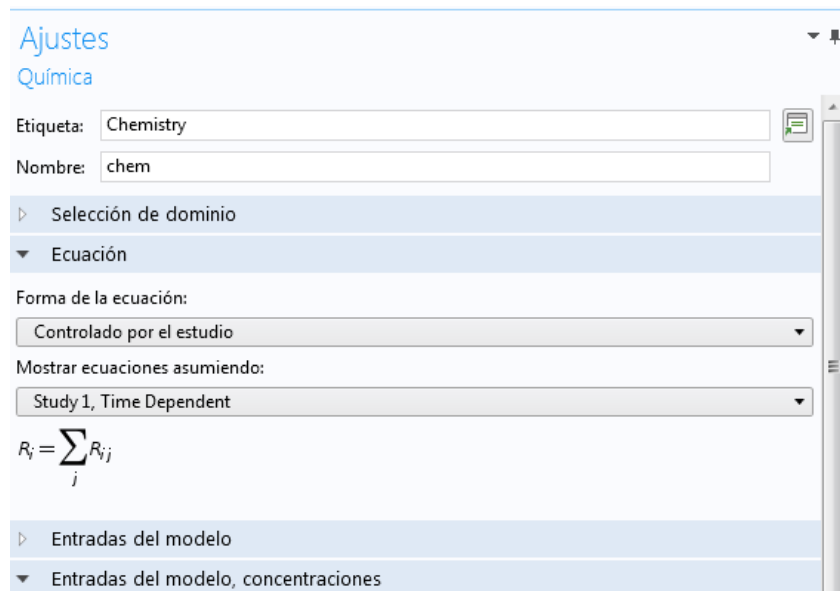


Figura 10. Ventana de ajustes del módulo de química en software CAE.

3.1.3 MÓDULO CAE DE TERMODINÁMICA

Para el módulo CAE de transferencia de calor se considera un modelo estacionario, con la siguiente ecuación (33) y (34) gobernante:

$$\rho C_p u \cdot \nabla T + \nabla \cdot q = Q + Q_p + Q_{vd} \quad (33)$$

$$q = -k \nabla T \quad (34)$$

Donde ρ es la densidad; u es la velocidad; T es la temperatura; C_p es el calor específico a presión constante; q es el calor por conducción; Q_p y Q_{vd} son el calor absorbido y disipado respectivamente.

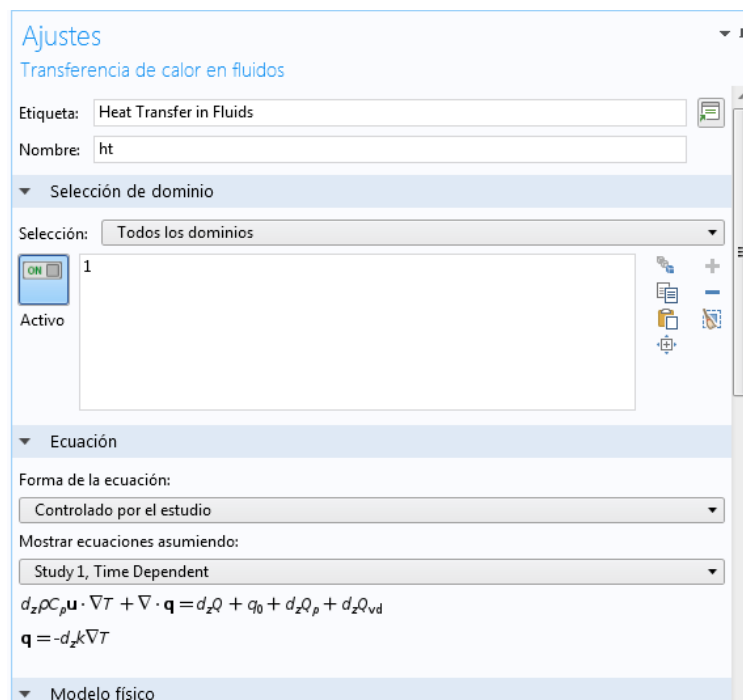


Figura 11. Ventana de ajustes del módulo de transferencia de calor.

Desde esta ventana de ajustes del módulo de transferencia de calor, se determinan los parámetros térmicos iniciales, del ambiente, del reactor y de las especies, entre algunos otros ajustes, por ejemplo las propiedades térmicas de las paredes.

3.1.4 MÓDULO CAE DE TRANSPORTE DE ESPECIES DILUIDAS

El módulo de transporte de especies diluidas es de gran importancia en la simulación para el modelado de la deposición química de vapor de arseniuro de galio (GaAs); dicho módulo nos proporcionará las concentraciones molares de cada una de las especies intermedias generadas en las reacciones, las cuales servirán para determinar la concentración molar de las capas de arseniuro de galio. El software CAE utiliza la siguiente ecuación (35) y (36) gobernante para resolver el problema de fenómenos del transporte presente en el proceso de deposición en un reactor CVD:

$$\nabla \cdot (-D_i \nabla C_i) + u \cdot \nabla C_i = R_i \quad (35)$$

$$N_i = -D_i \nabla C_i + u c_i \quad (36)$$

Donde u es la velocidad; C_i es la concentración del componente i ; N_i es el flujo del componente i ; R_i es la velocidad del flujo difusional.

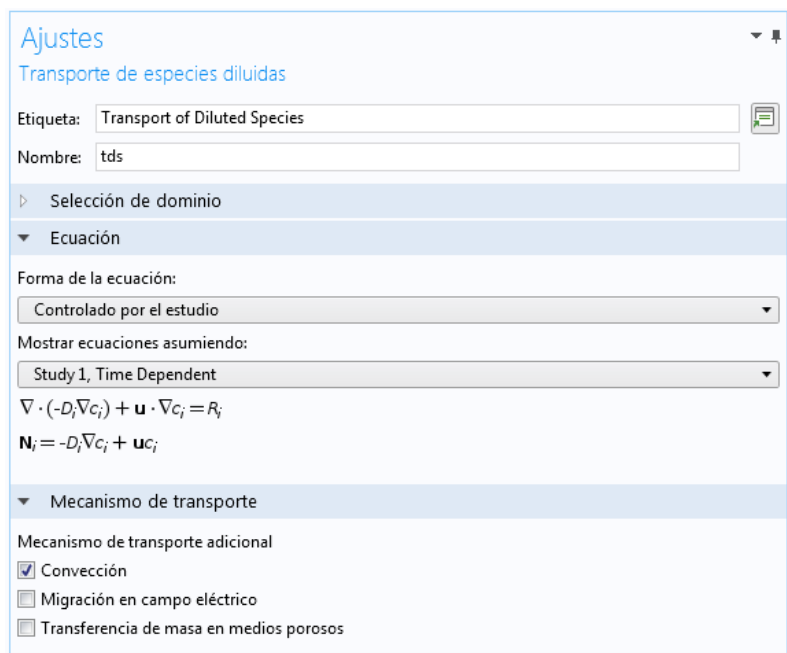


Figura 12. Ventana de ajustes del módulo de transporte de especies diluidas.

3.1.5 MÓDULO CAE DE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL CFD

Como se ha mencionado en el apartado de antecedentes, existen diversos métodos de análisis de los fenómenos que ocurren en el proceso de deposición química en un reactor CVD, tal es el caso del modelado matemático o mediante métodos experimentales, diversas investigaciones han hecho uso de herramientas computacionales y analizado el proceso con software CAE, específicamente con el módulo CFD; en este caso no es la excepción, además de ser de gran importancia, de manera que los demás módulos de análisis se integran u obtienen datos de este módulo CFD.

La ecuación gobernante (37) y (38) que resuelve el software para el análisis de la cinética y cinemática de los fluidos es la siguiente:

$$\rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot \left[-\rho l + \mu(\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot u)l \right] + F \quad (37)$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (38)$$

Donde ρ es la densidad; $\mathbf{u}$ es la velocidad; μ es la viscosidad; l es la longitud; F es la fuerza cortante; T es el tensor de fuerzas asociado con la fuerza cortante.

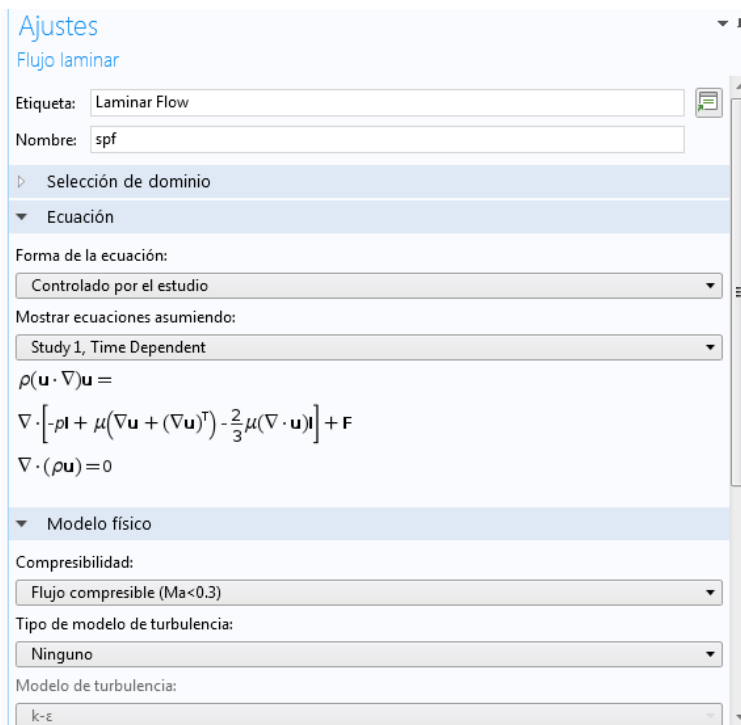


Figura 13. Ventana de ajustes del módulo dinámica de fluidos computacional CFD.

Desde la ventana de ajustes del módulo de dinámica de fluidos computacional, en este caso para un flujo laminar, se determinan algunos parámetros necesarios para el desarrollo de la modelación; se seleccionan los límites geométricos del reactor, es decir las paredes de este, así como la entrada y salida del flujo, por lo que es necesario declarar la velocidad inicial en la entrada al reactor, y una presión de salida baja, esto para garantizar la dirección deseada del flujo. Las propiedades del fluido como la densidad y viscosidad vienen determinadas desde el módulo químico del modelo.

3.1.6 MALLADO

Una vez considerados y configurados los diferentes módulos CAE para el análisis del proceso químico y termodinámico en la deposición química de vapor de arseniuro de galio, es necesario determinar e indicar el mallado para el análisis. Se utilizaron diferentes configuraciones en el mallado para poder analizar y obtener resultados validos de la simulación; se ha experimentado con mallados cuadráticos y triangulares libres, para ambos casos se buscó que los elementos fueran más refinados y condensados en la zona del sustrato, que es el área de mayor interés en el estudio.

Por mencionar los dos casos más extremos, el primero de ellos fue un mallado cuadrático libre, con tamaño máximo y mínimo de elementos de 0.44 in y 0.014 in respectivamente, obteniendo 594 elementos de dominio y 106 elementos de contorno, siendo en general un mallado extremadamente grueso, teniendo un tiempo de computación de 33 s para un numero de grados de libertad del estudio de 7620. El segundo caso se trata de un mallado triangular libre, con tamaño máximo y mínimo de elementos de 0.07 in y 0.002 in respectivamente, obteniendo 13762 elementos de dominio y 444 elementos de contorno, siendo un mallado más fino significativamente respecto al anterior, teniendo un tiempo de computación de 265 s para un numero de grados de libertad de 89940. Cabe mencionar que para un mallado todavía más fino no se alcanzó la convergencia en la simulación.

Para ambos casos la diferencia en los resultados es relativamente de poca relevancia para este tipo de estudios, ya que se necesitaría observar valores mayores a la unidad para tener repercusiones en las reacciones químicas; y en ambos casos mencionados la diferencias se encontraron por debajo de 10^{-1} y 10^{-2} en los perfiles de temperatura y velocidad respectivamente; llegando a la conclusión de utilizar el mallado más fino, el triangular libre mostrado en la figura 14 debido a la convergencia de la simulación y que el tiempo de computación no resulta ser una limitante.

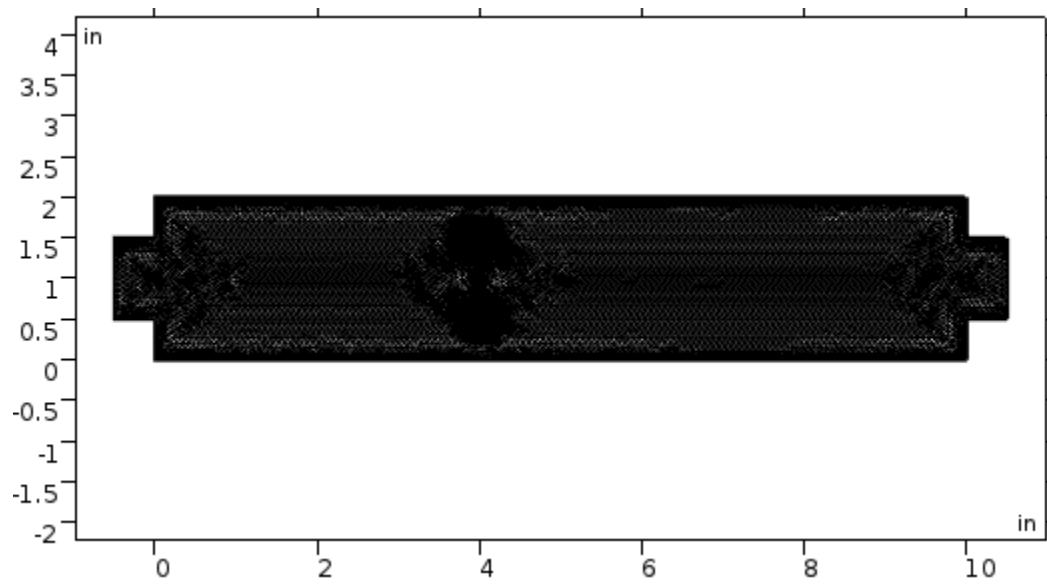


Figura 14. Mallado triangular libre para el modelo CAE del reactor CVD.

4. SIMULACIONES Y ANÁLISIS DE RESULTADOS

Para la simulación computacional mostrada, se ha determinado con base en una revisión bibliográfica, ciertas condiciones necesarias para que se presenten las reacciones químicas que generen las especies intermedias, como la presencia de un régimen laminar en la dinámica del fluido así como la temperatura necesaria en el sustrato, entre 720 K y 1030 K (Ingle, Theodoropoulos, Mountziaris, & Smith, 1996).

La tabla 3 muestra las condiciones iniciales para llevar a cabo simulaciones del proceso de deposición química de vapor para recubrimientos de GaAs en sustratos que se encuentran localizados a 3.5 y 4 in con un ángulo de inclinación de 45°, la entrada de gases en el reactor.

Tabla 3. Condiciones iniciales de modelo propuesto.

Descripción	Valor
Diámetro de reactor	2 in
Velocidad inicial	0.35 m/s
Temperatura inicial	300 K
Temperatura del sustrato	950 K
Presión de salida	4000 Pa
Concentración inicial de H_2	1.44 mol/m ³
Concentración inicial de AsH_3	0.2 mol/m ³
Concentración inicial de $Ga(C_2H_5)_3$	0.0075 mol/m ³

En este caso de estudio, se presenta la simulación del proceso de disociación en un reactor de deposición química de vapor CVD para generar concentraciones de arseniuro de galio

GaAs; el sustrato se encuentra a una temperatura de 950 K y el reactor a 300 K, la velocidad de entrada del fluido, en este caso los gases es de 0.35 m/s, la cual permite en conjunto con el diámetro del reactor de 2 in un flujo laminar, régimen necesario para que se generen la reacciones químicas.

La concentración inicial de los precursores debe ser considerablemente más baja respecto a la concentración inicial del gas transportador, para este modelo la concentración inicial del hidrogeno H_2 (gas transportador) es de 1.44 mol/m^3 , mientras que la del trimetil-galio ($Ga(C_2H_5)_3$) y arsano o hidruro de arsano (AsH_3), es de 0.0075 mol/m^3 y 0.2 mol/m^3 respectivamente.

Se muestran resultados de los perfiles de temperatura y velocidad, así como de las concentraciones de los precursores trimetil-galio y arsano en una variable espacial, las concentraciones de las especies intermedias del trimetil galio con respecto al tiempo, para dos diferentes variables espaciales, la posición con respecto a la descarga de precursores del sustrato, es decir, para una distancia de 3.5 in y 4 in, de la entrada de gases al reactor CVD.

4.1 PERFILES DE TEMPERATURA

El módulo de transferencia de calor en conjunto con las condiciones iniciales nos permite analizar las propiedades térmicas del proceso de deposición de arseniuro de galio.

Las figuras 15 y 16 muestran los contornos de temperatura para los sustratos situados a 3.5 y 4 in de la zona de descarga, alcanzando los 950 K en la superficie del sustrato.

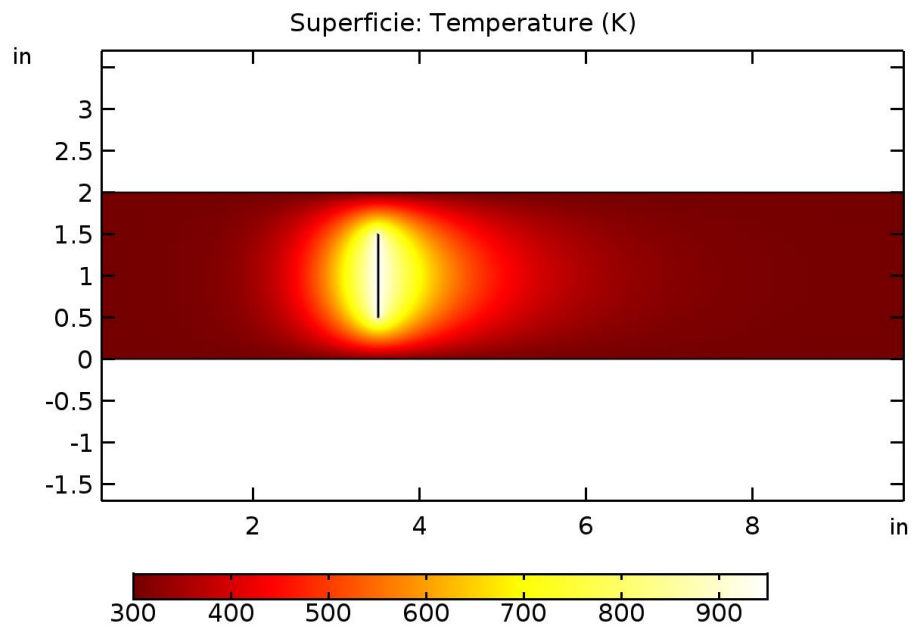


Figura 15. Perfil de temperatura [Sustrato a 3.5 in de la descarga].

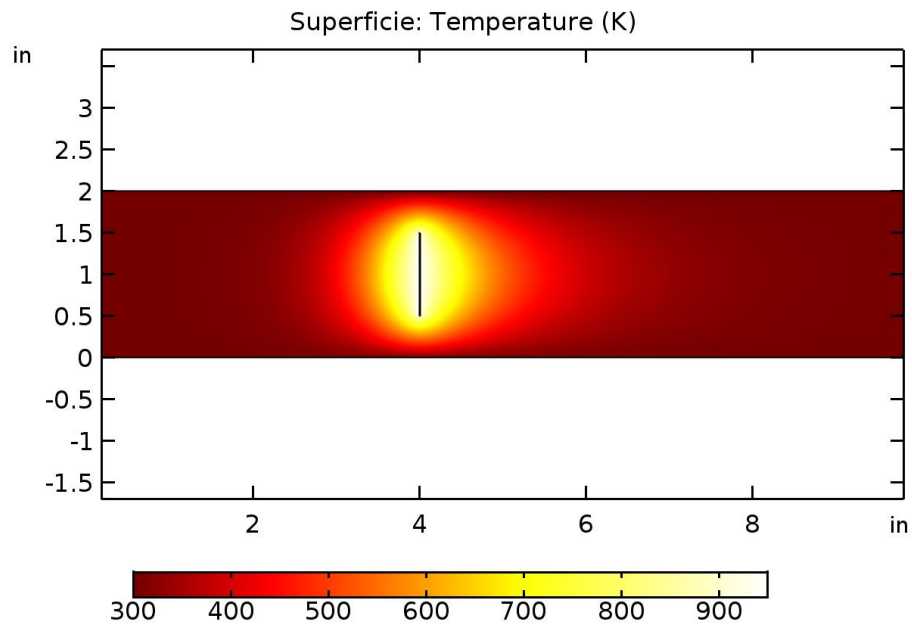


Figura 16. Perfil de temperatura [Sustrato a 4 in de la descarga].

La temperatura juega un papel primordial en la modelación en este tipo de procesos, debido a que la temperatura es la energía de activación para que las diferentes reacciones químicas se hagan presentes; posteriormente, en la sección de concentraciones molares se detallará y recalcará la importancia e influencia de la temperatura en el proceso de deposición química de vapor en un reactor CVD.

4.2 PERFILES DE VELOCIDAD

Una de las condiciones óptimas necesarias para que se presenten las diferentes reacciones químicas y se generen depósitos de arseniuro de galio, es la presencia de un régimen laminar en la dinámica del flujo en el reactor CVD.

Como se muestra en la tabla 3 de condiciones iniciales, así como de los parámetros geométricos considerados, el diámetro de la cámara de reacción del reactor CVD es de 2 in y la velocidad de inicial de entrada del reactor es de 0.35 m/s, por lo que se garantiza el régimen laminar en la entrada del reactor; como podemos observar en las siguientes dos figuras 17 y 18 del perfil de velocidad para dos diferentes posiciones del sustrato respecto a la entrada de gases (3.5 in y 4 in), la velocidad más alta alcanzada se encuentra alrededor de los 0.8 m/s en algunas pequeñas zonas cerca del sustrato en los extremos, debido a la reducción de la sección transversal, a pesar de ello se sigue manteniendo en una velocidad baja, garantizando aun el régimen laminar necesario para la presencia de reacciones y depósitos de arseniuro de galio.

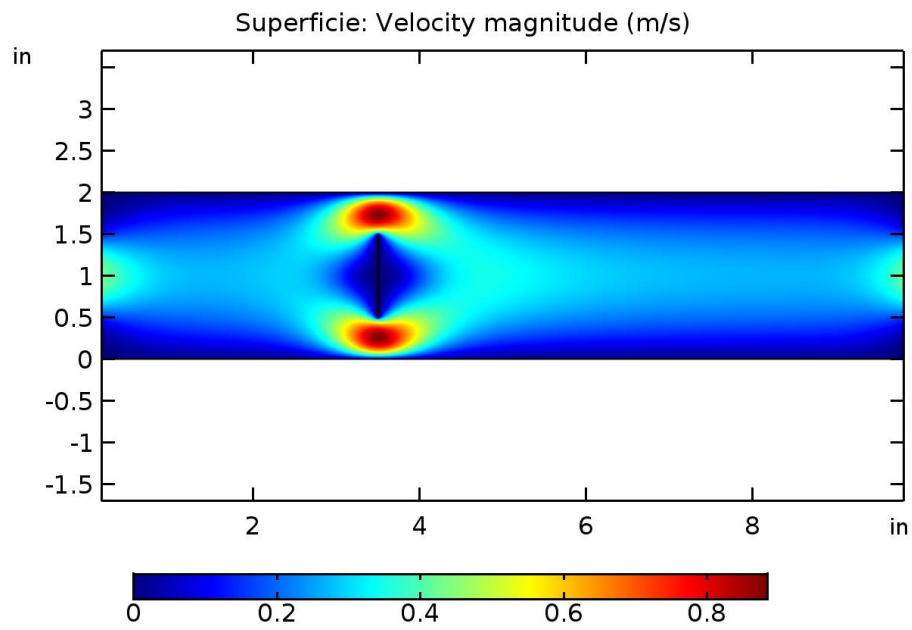


Figura 17. Perfil de velocidad [Sustrato a 3.5 in de la descarga].

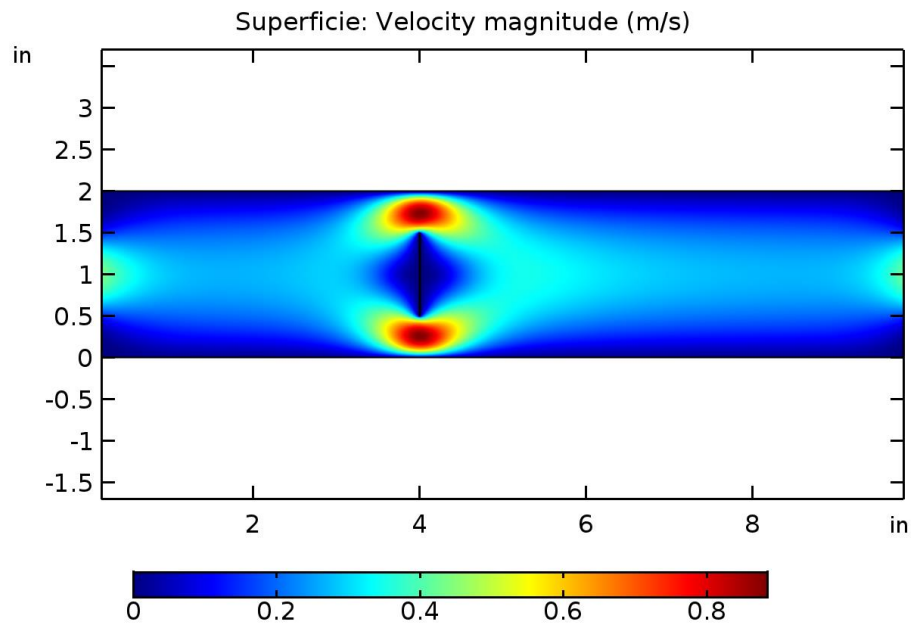


Figura 18. Perfil de velocidad [Sustrato a 4 in de la descarga].

Las figuras 16 y 17 muestran los contornos de velocidad para los sustratos situados a 3.5 in y 4 in de la zona de descarga, alcanzando una intensidad de flujo de gas máxima en los extremos superior e inferior de los mismos, observándose que la posición del sustrato respecto a la descarga no influye en los patrones de flujo que se generan pero si en el instante y lugar donde ocurren las reacciones químicas y por lo tanto en las zonas donde se encuentran las diferentes concentraciones molares de la especies.

4.3 CONCENTRACIONES MOLARES

Existen diversas variables que son necesarias para conocer y predecir el comportamiento de los fenómenos físico-químicos en el proceso de deposición de películas delgadas en un reactor CVD; una de estas variables es la concentración molar de cada uno de los precursores, así como de las especies de compuestos generados en las diferentes reacciones químicas durante el proceso de deposición química de vapor.

A continuación se muestran resultados en diferentes opciones, como perfiles y contornos de las concentraciones molares de los precursores trimetil de galio $\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ y arsano AsH_3 , gases precursores necesarios para depósitos de arseniuro de galio (Ingle, Theodoropoulos, Mountziaris, & Smith, 1996).

4.3.1 CONCENTRACIÓN MOLAR DEL PRECURSOR TRIMETIL DE GALIO

Como se describe en el apartado anterior, para que se generen recubrimientos de arseniuro de galio GaAs, se necesitan dos precursores, uno de ellos es el trimetil de galio ($\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$), que junto con el arsano AsH_3 , reaccionan formando las diferentes intermedias mencionadas en el apartado 3.1.2.

Las figuras 19 y 20 muestran los contornos de concentración molar del precursor trimetil de galio para diferentes posiciones de sustrato, se observa que la concentración molar del precursor es desde la entrada de gases (lado izquierdo de los gráficos), hasta poco antes de llegar al sustrato, se mantiene prácticamente con las condición inicial dada, 0.0075 mol/m^3 , y sobre el sustrato y posterior a este es cuando encuentra con su valor más crítico, con tendencia a 0.

Los contornos de concentración de $\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ muestran su disminución desde la zona de descarga del reactor con $7 \times 10^{-3} \text{ mol/m}^3$ hasta alcanzar $1 \times 10^{-3} \text{ mol/m}^3$, esto quiere decir que las reacciones se están llevando a cabo, por lo que existirá la presencia de las diferentes especies intermedias y finales como el arseniuro de galio en la superficie de los sustratos situados a 3.5 in y 4 in como se muestra en las figuras 19 y 20 respectivamente.

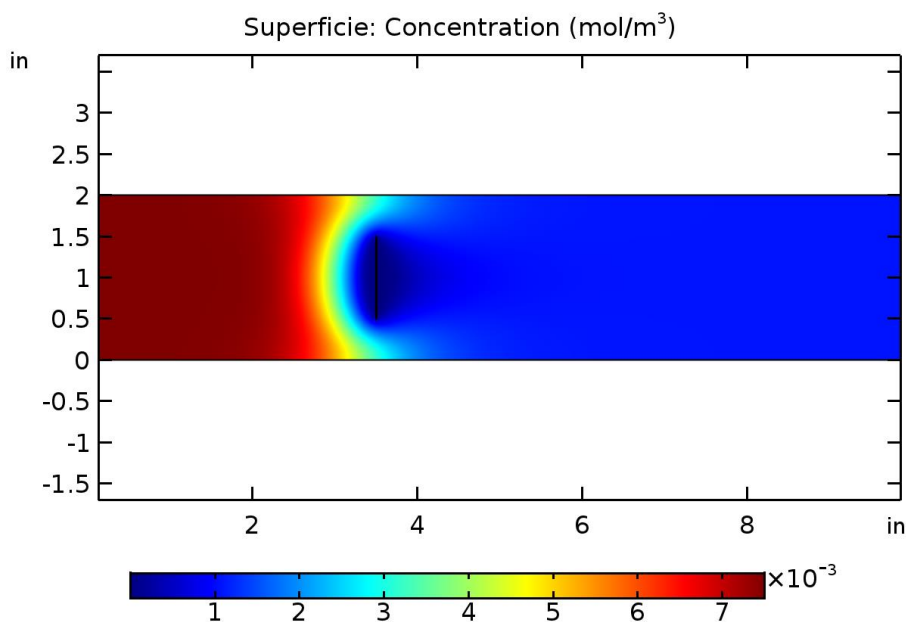


Figura 19. Concentración de $(\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3)$ [Sustrato a 3.5 in de la descarga].

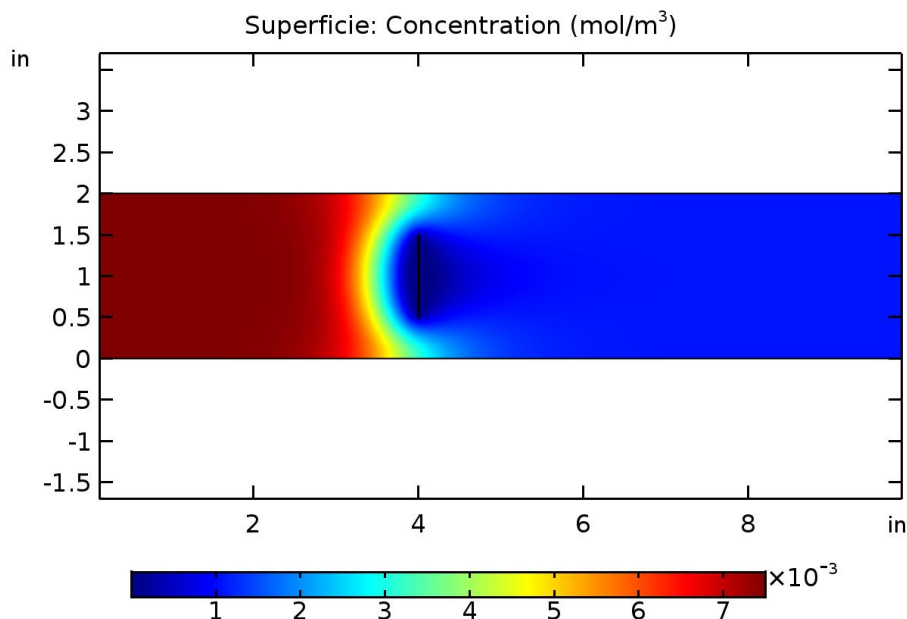


Figura 20. Concentración de $\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ [Sustrato a 4 in de la descarga].

4.3.1.1 CONCENTRACIONES MOLARES DE ESPECIES INTERMEDIAS DEL PRECURSOR TRIMETIL-GALIO

A continuación se muestran las especies derivadas o intermedias generadas mencionadas en el apartado 3.1.2 del precursor trimetil de galio $\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$, que mediante gráficos de perfiles de concentración es posible analizar el comportamiento del fenómeno físico-químico del proceso.

Los perfiles de concentración de las especies derivadas del $\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$ para los sustratos situados a 3.5 in y 4 in de la zona de descarga como lo muestran las figuras 21 y 22 respectivamente. En ambos casos se observa un decremento de la concentración con el tiempo de permanencia de las especies: $\text{GaC}_6\text{H}_{15}$, $\text{GaC}_4\text{H}_{10}$ y de GaC_2H_6 ; mientras que en el caso de las especies C_2H_5 y GaH_2 y C_2H_4 se observa un incremento en la concentración con el tiempo de permanencia. De ambas gráficas se observa una diferencia significativa en el

tiempo de permanencia de las especies para los sustratos ubicados a 3.5 y 4 in respectivamente.

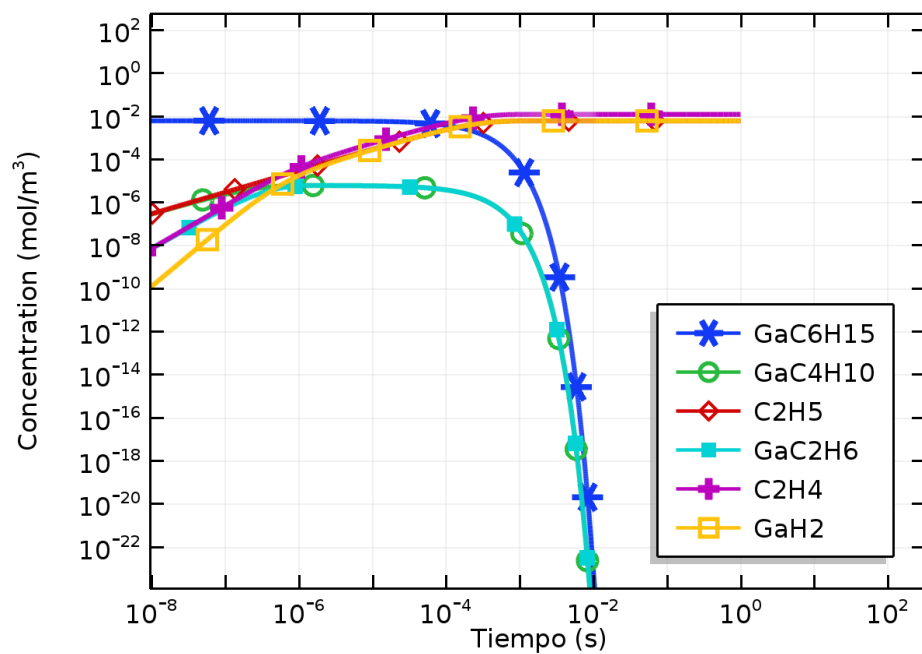


Figura 21. Concentración de especies del precursor ($\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$) [Sustrato a 3.5].

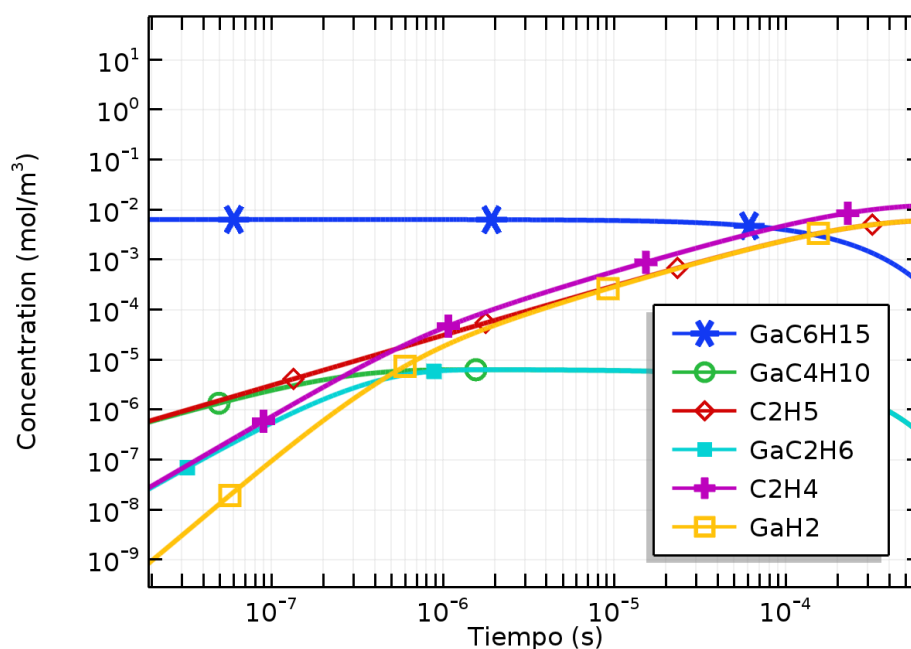


Figura 22. Concentración de especies del precursor ($\text{Ga}(\text{C}_2\text{H}_5)_3$) [Sustrato a 4].

Así como en el apartado anterior, se observa con una línea azul la concentración molar del precursor trimetil de galio, desde su condición inicial, 0.0075 mol/m^3 , y en un instante dado se observa la disminución de este con tendencia a 0, esto debido a que se acerca al punto donde se encuentra el sustrato con una temperatura de 950 K, la cual activa las reacciones químicas, y las concentraciones molares de las especies generadas o intermedias aumenta.

4.3.2 CONCENTRACIÓN MOLAR DE PRECURSOR ARSANO

El arsano AsH_3 , es el segundo de los precursores considerados para la modelación y simulación propuesta en este trabajo, basándose en publicaciones anteriores (Ingle, Theodoropoulos, Mountziaris, & Smith, 1996). A continuación se muestra un gráfico de la concentración molar del arsano para diferentes posiciones de sustrato respecto a la entrada de gases al reactor.

La figura 23 muestra la concentración de arsano AsH_3 , uno de los precursores que se utilizaron para el modelado de deposición de arseniuro de galio GaAs, para 3 diferentes posiciones del sustrato dentro del reactor, a 3 in (Curva 1), 3.5 in (Curva 2) y 4 in (Curva 3) de la zona de descarga. Se observa, que la concentración del arsano disminuye conforme se acerca al sustrato, debido a que este último se encuentra a una temperatura de 950 K, en donde se genera mayormente la reacción con otras especies de gases, descomponiéndolo y reduciendo su concentración. El mismo fenómeno se puede observar con el primer precursor en la figura 19, 20, 21 y 22 del perfil de concentración del trimetilgalio, que hasta antes de acercarse al sustrato, se encuentra prácticamente con la concentración inicial, y alrededor del sustrato, tiende a reducirse a $1 \times 10^{-3} \text{ mol/m}^3$.

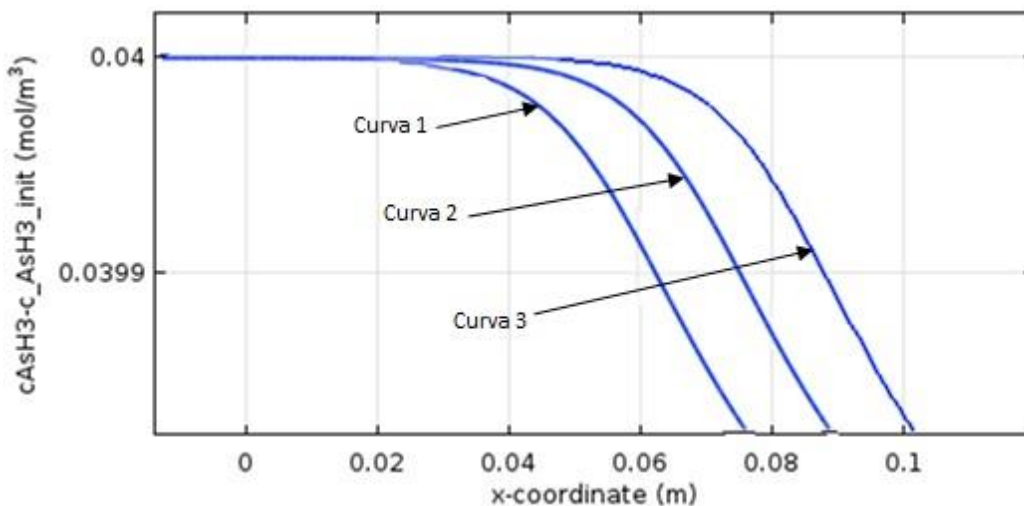


Figura 23. Concentración de arsano para diferentes distancias del sustrato de la descarga.

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Durante el proceso de modelación y simulación es de gran importancia la convergencia de resultados, por lo que se hace mención de algunas situaciones que se presentaron en el desarrollo de este trabajo; en cuanto a la convergencia de la física del modelo, es necesario que los valores iniciales de velocidad inicial y el diámetro del reactor sean los adecuados para que la dinámica del fluido se encuentren bajo un régimen laminar y la temperatura del sustrato sea la suficiente para la presencia de las reacciones, como se mencionó en apartados anteriores, de otra forma el estudio no convergerá y obtendremos errores en la simulación; en cuanto a la convergencia de los resultados por el mallado, depende ampliamente de las características del hardware con la que se dispone, por lo que con una malla más fina obtendríamos resultados con valores más exactos pero con la posibilidad de que el sistema computacional no soporte el nivel tan alto de procesamiento, por lo que se sugiere un mallado de tamaño normal sin perder exactitud en los resultados.

Con el uso e integración de herramientas computacionales CAD-CAE ha sido posible modelar y simular el proceso de disociación en la deposición de arseniuro de galio que se lleva a cabo en un reactor CVD, permitiendo analizar y observar las condiciones termodinámicas y cinéticas de los fluidos de trabajo, obteniendo diferentes variaciones de gráficos y resultados para diversas variables, como las concentraciones molares de los precursores y especies intermedias, vitales para que en trabajos futuros se establezcan mejores tasas de deposición y con base en ello se consideren los parámetros para el diseño y construcción de un reactor CVD.

Mediante la modelación y simulación con el método de elemento finito (FEM,) se han obtenido resultados de la termodinámica de los fluidos del fenómeno físico-químico de disociación que están ampliamente relacionadas con las tasas de deposición en el proceso de generación de recubrimientos, por lo que se espera que en trabajos posteriores se pueda realizar un análisis de las fases posteriores a la disociación química, es decir en la

absorción del estado sólido de arseniuro de galio en conjunto con resultados experimentales; por lo que se utilizaron diferentes módulos de análisis CAE (Dinámica de fluidos computacional CFD, transferencia de calor, transporte de especies diluidas y reacciones químicas), abarcando los diferentes parámetros físicos y químicos del proceso.

Se presentaron resultados de la modelación y simulación para diferentes posiciones del sustrato respecto a la descarga de gases del reactor durante el desarrollo de este trabajo; por lo que en general se observa el mismo patrón en las reacciones y en las concentraciones molares de los precursores, así como en los perfiles de velocidad y temperatura, influyendo puntualmente en el tiempo y posición en el reactor donde ocurren las reacciones químicas.

Es importante resaltar que del análisis de termofluidos, a través de los gráficos de perfiles de velocidad y temperatura, se observa el comportamiento de los fluidos precursores y se concluye que ciertas condiciones se presentan para que las reacciones químicas se generen; como la presencia de un régimen de flujo laminar, es decir que la ausencia de turbulencia favorece a las reacciones químicas (Figuras 17 y 18), así como también la homogeneidad de la temperatura en la mayor parte del reactor, a excepción del sustrato, que se encuentra a una temperatura mayor (Figuras 15 y 16), favoreciendo a que las reacciones y la generación de especies intermedias ocurran cerca del sustrato.

El diseño y la simulación del proceso físico-químico de la fase de disociación permitirá en trabajos futuros analizar todas las fases posteriores, como la etapa de absorción y adsorción en el sustrato y obtener las tasas de deposición más altas; resaltando la obtención de gráficos de concentraciones molares de los precursores utilizados (trimetil de galio y arsano), además de las especies intermedias producidas mediante las reacciones químicas hasta antes de la fase solida de arseniuro de galio, como en las figuras 19, 20, 21, 22 y 23, resultados que permiten comenzar el análisis de las siguientes fases.

Finalmente, a través de la integración de herramientas computacionales CAD y CAE es posible modelar el proceso de disociación en la generación de recubrimientos y películas delgadas de arseniuro de galio en un reactor CVD; observando que es posible mediante estas herramientas analizar las diferentes fases presentes, mencionando que es importante contar con la disponibilidad propia del software en cuanto a los módulos de análisis de la física y química del proceso, además de apoyarse con algunos otros programas informáticos tomando en cuenta de la accesibilidad de estos respecto a versiones académicas o completas.

REFERENCIAS

- Albella, J. M. (2003). *Laminas delgadas y recubrimientos. Preparación, propiedades y aplicaciones*. Madrid, España: Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
- Albella, J. M., Gomez-Aleixandre, C., & Ojeda, F. (1995). Deposición de materiales electrocerámicos en capa delgada mediante técnicas de vacío. *Boletín de la sociedad española de cerámica y vidrio*, 34(5-6), 489-495.
- Bernal, J., Irvin, A., Vera, E., Abundis, H., Villanueva, M., Garcia, A., & Borjas, S. (2016). Microstructural characterization of hardened AISI 4140 using TiN/SiC coating. *Microscopy and microanalysis*, 22(3), 1984-1985. doi:10.1017/S143192761601076X
- Bernal, J., Irvin, A., Vera, E., Olvera, P., Villanueva, M., Lasorsa, C., & Borjas, S. (2017). Microstructural characterization of hardened AISI 4140 using CrN/CSi coatings. *Microscopy and microanalysis*, 23(1), 416-417. doi:10.1017/S1431927617002768
- Bernard, C. (1981). *Proc. 8th International Conference on CVD*. Pennington, NJ: Electrochemical Society.
- Bolívar, F. J. (2007). Evaluación del comportamiento a elevadas temperaturas de recubrimientos de Al, Si y de Al modificado con Si y Hf depositados mediante CVD-FBR sobre aceros ferrítico –martensíticos (9-12% Cr). Madrid, España: Universidad Complutense de Madrid.
- Breiland, W. G., Ho, P., & Coltrin, M. E. (1987). Laser Diagnostics of Silicon CVD: In Situ Measurements and Comparisons with Model Predictions. (G. W. Cullen, Ed.) *Proc. 10th. Int. Conf. on CVD*, 912-924.
- Brodsky, M. H. (Abril de 1990). *Investigación y Ciencia*. Obtenido de Avances en semiconductores de arseniuro de galio: <https://www.investigacionyciencia.es/revistas/investigacion-y-ciencia/cambios-en-la-radiacin-solar-270/avances-en-semiconductores-de-arseniuro-de-galio-2960>
- Brunet, B. (1986). *Diseño gráfico y modelado geométrico*. Marcombo: Mompín J.
- Bryden, D. (2014). *CAD and Rapid Prototyping for Product Design*. London: Laurence King Publishing.
- Cheng, T. S., & Hsiao, M. C. (2008). Numerical investigations of geometric effects on flow and thermal fields in a horizontal CVD reactor. *Journal of Crystal Growth*, 310, 3097 -3106.
- Choy, K. L. (2000). *Handbook of nanostructured materials and nanotechnology, vol. 1: synthesis and processing*. San Diego (CA): Academic Press.
- Choy, K. L. (2003). Chemical vapour deposition of coatings. *Progress in Materials Science*, 48, 57–170.

- Choy, K. L., & Derby, B. J. (1991). Physique IV. *Colloque C2 suppl. J de Physique II*, 1-697.
- Coltrin, M., Kee, R., & Evans, G. (1989). A mathematical model of the fluid mechanics and gas-phase chemistry in a rotating disk chemical vapor deposition reactor. *Journal of the electrochemical society*, 136, 819-829.
- CRC. (1987). *Handbook of chemical data*. CRC.
- Di Lalla, N., Lasorsa, C., Morando, P., Morales, J., & Laferrara, R. (2010). Elaboracion de recubrimientos selectivos de Si₃N₄ por PECVD para uso solar. *IBEROMET XI CONAMET/SAM*.
- Egidi, A., Mendive, B., Corengia, P., Quinteiro, O., & Ybarra, G. (2000). Deposicion de peliculas delgadas por PVD y su caracterizacion mediante AFM. *Researchgate*.
- Engelhard, M. H., Lyubinetzky, A., & Baer, D. R. (2016). Gallium arsenide (GaAs) (001) after sublimation of arsenic (As) thin-film cap, by XPS. *Surface Science Spectra*, 23(2), 83-92.
- Gates, S. M. (1992). Kinetics and mechanisms of surface reactions in epitaxial growth of Si from SiH₄ and Si₂H₆. *Journal of Crystal Growth*, 120, 269-274. doi:10.1016/0022-0248(92)90401-4
- Gómez, A., & Castañeda, S. (2003). *Laminas delgadas y recubrimientos preparación, propiedades y aplicaciones*. Madrid: Albella J. M.
- Handelman, A., Beker, P., Amdursky, N., & Rosenman, G. (2012). Physics and engineering of peptide supramolecular nanostructures. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14(18), 6391-6408. doi:10.1039/c2cp40157f
- He, Y., & Sahai, Y. (1987). Three-Dimensional Mathematical Modeling of Transport Processes in CVD Reactors. (G. W. Cullen, Ed.) *Proc. 10th. Int. Conf. on CVD*.
- Ho, P., Coltrin, M., & Breiland, W. (1994). Laser-Induced Fluorescence Measurements and Kinetic Analysis of Si Atom Formation in a Rotating Disk Chemical Vapor Deposition Reactor. *The Journal of Physical Chemistry*, 98, 10138-10147.
- Hunt, L. P. (1987). *10th International Conference on chemical vapour deposition*. Princeton (NJ): Electrochemical Society.
- Ingle, N. K., Theodoropoulos, T. J., Mountziaris, R. M., & Smith, F. T. (1996). Reaction kinetics and transport phenomena underlying the low-pressure metalorganic chemical vapor deposition of GaAs. *Journal of Crystal Growth*, 167, 543-556.
- JANAF Thermochemical tables. (1990). *Analytical Chemistry*, 62(10), 588A-588A. doi:10.1021/ac00209a714

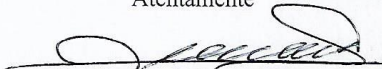
- Jensen, K. F. (1984). Modelling of Chemical Vapor Deposition Reactors. (e. a. M. Robinson, Ed.) *Proceedings of the 9th International Conference on CVD*, 3-20.
- Jensen, K. F. (1987). Micro-reaction engineering applications of reaction engineering to processing of electronic and photonic materials. *Chemical Engineering Science*, 42(5), 923-958. doi:10.1016/0009-2509(87)80052-0
- Jensen, K. F. (1993). *CVD principles and applications*. (M. L. Hitchman, & K. F. Jensen, Edits.) London: Academic Press.
- Kaushal, A., Prakash, J., Dasgupta, K., & Chakravartty, J. (2016). Simulations and experimental study of CVD process for low temperature nanocrystalline silicon carbide coating. *Nuclear engineering and design*, 303, 122-131.
- Kirkwood, R., & Sherwood, J. (2018). Sustained CAD/CAE integration: integrating with successive versions of step or IGES files. *Engineering With Computers*, 34(1), 1-13.
- Ku Shaari, K. Z., & Awang, M. (2015). *Engineering applications of computational-fluid dynamics*. Springer.
- Kubachewski, O., Alcock, C. B., & Raynor, G. V. (1979). *Metallurgical thermochemistry*. Oxford: Pergamon Press.
- Kuna, P., Hašková, A., Palaj, M., Skačan, M., & Záhorec, J. (2018). How to Teach CAD/CAE Systems. *International Journal Of Engineering Pedagogy*, 8(1), 148-162.
- Meziere, J., Ucar, M., Blanquet, E., Pons, M., Ferret, P., & Di Cioccio, L. (2004). Modeling and simulation of SiC CVD in the horizontal hot-wall reactor concept. *Journal of Crystal Growth*, 267, 436-451.
- Mollick, P. K., Venugopalan, R., & Srivastava, D. (2017). CFD coupled kinetic modeling and simulation of hot wall vertical tubular reactor for deposition of SiC crystal from MTS. *Journal of Crystal Growth*, 475, 97-109.
- Moritz, E., & Haussdorffstr, F. (2013). Multiscale modeling of chemical vapor deposition (CVD) apparatus: simulations and approximations. *Polymers*, 5, 142-160.
- Nishizawa, S., & Pons, M. (2006). Numerical modeling of silicon carbide epitaxy in a horizontal hot-wall reactor. *Journal of Crystal Growth*, 303, 334-336.
- Omstead, T. R., Van SicklePeter, P. M., Lee, P. W., & Jensen, K. F. (1988). Gas phase and surface reactions in the MOCVD of GaAs from triethylgallium, trimethylgallium, and tertiarybutylarsine. *Journal of Crystal Growth*, 93, 20-28. doi:10.1016/0022-0248(88)90500-3

- Ortiz, D. A. (10 de abril de 2018). *Los semiconductores son la joya de la corona... electrónica*. Obtenido de Manufactura: <http://www.manufactura.mx/industria/2018/04/10/los-semiconductores-son-la-joya-de-la-corona-electronica>
- Passosa, M., Binellib, A., Jardini, L., Dias, C., & Filho, R. (2015). CFD Study of Chemical Vapor Deposition Reactor for Synthesis of PHEMA. *Chemical Engineering Transactions*, 43, 1459-1464. doi:10.3303/CET1543244
- Pezzotti, S., & Antico, F. (2007). *Introducción a la Teoría de Elementos Finitos*. La Plata: Facultad de Ingeniería Universidad Nacional de La Plata.
- Pierson, H. O. (1992). *Handbook of chemical vapor deposition* (Segunda ed.). Norwich, New York, U.S.A.: Noyes Publications / William Andrew Publishing, LLC.
- Powell, G. (2016). *Computational Fluid Dynamics (CFD) : Characteristics, Applications and Analysis*. Hauppauge, New York: Nova Science Publishers, Inc.
- Powell, M. (2017). *Chemical Vapor Deposition (CVD) : Types, Uses, and Selected Research*. Hauppauge, New York: Nova Science Publishers, Inc.
- Rosales, W., Andrade, M., Gámez, A., Rojas, L., & Pérez, A. (2008). Estudio mecánico e hidrodinámico de un reactor de gasificación de lecho fluidizado. *Ingeniería Mecánica*, 1, 63-76.
- Rosenberger, F. (1987). Flow Dynamics and Modelling of CVD. (G. W. Cullen, Ed.) *Proc. 10th. Int. Conf. on CVD*, 193-203.
- Roth, A. (1990). *Vacuum Technology*. Amsterdam: North-Holland.
- Serrano, J. (2012). *Modelado y simulación virtual de un diferencial mecánico en entorno VRML*. Leganés: Universidad Carlos III de Madrid.
- Sharafi, Y., & Achenie, L. (2007). Effect of substrate geometry on the deposition rate in chemical vapor deposition. *Journal of Crystal Growth*(304), 520-525.
- Skibinski, J., Wejrzanowski, T., Teklinska, D., & Kurzydowski, K. (2015). Influence of hydrogen volumetric flow rate of temperature distribution in CVD reactor based on epi-growth of SiC. *Journal of power technologies*, 95(2), 119-125.
- TecNM. (11 de Mayo de 2018). Obtenido de Instituto Tecnológico de Orizaba: <http://www.tecnm.mx/federales/instituto-tecnologico-de-orizaba>
- Vambol, S., Bogdanov, I., Vambol, V., Suchikova, Y., Lopatina, H., & Tsybuliak, N. (2017). Research into effect of electrochemical etching conditions on the morphology of porous gallium arsenide. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*, 90(5), 22-31. doi:10.15587/1729-4061.2017.118725

- Van Veldhuizen, S., Vuik, C., & Kleijn, C. R. (2007). Comparison of numerical methods for transient CVD simulations. *Surface and Coatings Technology*, 201, 8859-8862.
- Vandelbucke, L. (1981). *Proc. 8th International Conference on chemical vapour deposition*. Princeton (NJ): Electrochemical Society.
- Vescan, C. L. (1995). *Handbook of thin film process technology*. Bristol (UK): Institute of Physics.

ANEXOS

CARTA DE ACEPTACIÓN DE LA EMPRESA

 SEP SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA		Subsecretaría de Educación Superior Tecnológico Nacional de México Instituto Tecnológico de Orizaba
Orizaba, Veracruz., a 29 de Enero de 2018. OFICIO: DIR/0079/2018.		
ASUNTO: CARTA DE ACEPTACIÓN.		
Dr. PRUDENCIO FIDEL PACHECO GARCÍA Coordinador de Posgrado de Sistemas Integrados de Manufactura y Estrategias de Calidad De la Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla.		
Por este medio le informamos que el Ing. Allan Joseph Ayala Lara, alumno del Posgrado en Sistemas Integrados de Manufactura y Estrategias de Calidad, ha sido aceptado en nuestra institución educativa para participar en el desarrollo del proyecto titulado “DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN REACTOR DE DEPOSICION QUÍMICA DE VAPOR (CVD)”, conscientes de los requerimientos que el Ing. Allan Joseph Ayala Lara tiene como alumno del posgrado reiteramos nuestro compromiso de permitir que el desarrollo de este proyecto sea la base de tu trabajo de tesis que debe desarrollar para obtener el grado de Maestro.		
Las actividades generales del proyecto consisten en el desarrollo de un proyecto de análisis, diseño y simulación a través de uso de software computacional CAD y CAE, de un Reactor de Deposición Química de Vapor (CVD), a través de la evaluación de diferentes variables o parámetros físicos, mecánicos, térmicos, geométricos, etc., y optimizar el proceso de manufactura en un reactor CVD.		
Para este proyecto se está desarrollando un plan de trabajo y estamos informados sobre el requerimiento del Ing. Allan Joseph Ayala Lara, de obtener una carta de liberación en cuanto se vean cumplidas las metas de este proyecto.		
Queremos enfatizar la importancia que tiene para nosotros la información a la que tendrá acceso el alumno y hacerles notar que deseamos mantener en confidencialidad la información de dicho proyecto por lo que solicitamos que la tesis tenga un registro de confidencial al ser entregada a la Universidad.		
Agradeciendo de antemano su atención, reciba un cordial saludo. Atentamente		
 Dr. José Luis Bernal Ponce Instituto Tecnológico de Orizaba Director de Proyecto Tel. 01 272 724 4096 Cel. 044 272 215 0676 Correo-e: jberponce@gmail.com		
	 INSTITUTO TECNOLÓGICO DE ORIZABA  SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA 	
Avenida Oriente 9 Núm. 852, Colonia Emiliano Zapata. C.P. 94320 Orizaba, Veracruz, México Teléfonos: (272) 7 24 40 96 Fax. (272) 7 25 17 28 e-mail: Orizaba@itorizaba.edu.mx www.itorizaba.edu.mx		

Orizaba, Veracruz., a 29 de Enero de 2018.
OFICIO: DIR/0078/2018.

ASUNTO: Carta de aceptación.

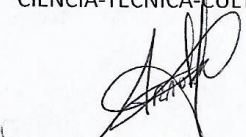
Dr. PRUDENCIO FIDEL PACHECO GARCÍA
Coordinador del Posgrado de Sistemas Integrados de
Manufactura y Estrategias de Calidad
De la Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla.

Por este medio reciba un cordial saludo y hago de su conocimiento que en mi función como Subdirectora Académica, le comunico que no existe inconveniente de nuestra parte para que el C. ING. ALLAN JOSEPH AYALA LARA estudiante del Posgrado en Sistemas Integrados de Manufactura y Estrategias de Calidad de su Casa de Estudios, forme parte del Proyecto "DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN REACTOR DE DEPOSICION QUIMICA DE VAPOR (CVD)", del cual es responsable el Dr. José Luis Bernal Ponce, profesor-Investigador del área de Ing. Metal-Mecánica de nuestra Institución.

Poniendo de manifiesto, que el estudiante aceptado deberá seguir las reglas de comportamiento y hacer uso adecuado de las instalaciones de nuestro Instituto. De igual forma, respetar los acuerdos contraidos con el Director del proyecto.

Sin más por el momento, quedo de usted.

ATENTAMENTE:
"CIENCIA-TÉCNICA-CULTURA"



M.I. ARACELI JIMÉNEZ MENDOZA.
Subdirectora Académica.

**INSTITUTO TECNOLÓGICO
DE ORIZABA**



**SECRETARÍA DE
EDUCACIÓN
PÚBLICA**



CARTA DE LIBERACIÓN DE LA EMPRESA



Subsecretaría de Educación Superior
Tecnológico Nacional de México
Instituto Tecnológico de Orizaba

Orizaba, Veracruz., a 28 de Junio de 2018.
OFICIO: DIR/0099/2018.

ASUNTO: CARTA DE LIBERACIÓN.

Dr. PRUDENCIO FIDEL PACHECO GARCÍA
Coordinador de Posgrado de Sistemas Integrados de
Manufactura y Estrategias de Calidad
De la Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla.

Por este medio le informamos que el C. Ing. Allan Joseph Ayala Lara, alumno del Posgrado en Sistemas Integrados de Manufactura y Estrategias de Calidad, quien fuera aceptado en nuestra institución educativa, participó en el desarrollo del proyecto titulado "DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN REACTOR DE DEPOSICIÓN QUÍMICA DE VAPOR (CVD) PARA RECUBRIMIENTOS DE ARSENIURO DE GALIO". De este modo se generaron avances teóricos y tecnológicos importantes para continuar con proyectos futuros de esta institución, cumpliendo así, con las reglas de comportamiento y haciendo uso adecuado de las instalaciones de nuestro Instituto reiteramos nuestro compromiso de permitir que el desarrollo de este proyecto sea la base de tu trabajo de tesis, que debe desarrollar para obtener el grado de Maestro en Sistemas Integrados de Manufactura y Estrategias de Calidad.

Viendo cumplidas las metas de este proyecto, plasmadas en la carta de aceptación del estudiante y estando informados de los requerimientos del Ing. Allan Joseph Ayala Lara, se extiende esta carta de liberación del proyecto realizado en esta Institución.

Agradeciendo de antemano su atención, reciba un cordial saludo.

Atentamente

Dr. José Luis Bernal Ponce
Instituto Tecnológico de Orizaba
Director de Proyecto
Tel. 01 272 724 4096
Cel. 044 272 215 0676
Correo-e: jberponce@gmail.com



Avenida Oriente 9 Núm. 852, Colonia Emiliano Zapata. C.P. 94320 Orizaba, Veracruz, México
Teléfonos: (272) 7 24 40 96 Fax. (272) 7 25 17 28
e-mail: Orizaba@itorizaba.edu.mx www.itorizaba.edu.mx

Orizaba, Veracruz., a 28 de Junio de 2018.
OFICIO: DIR/0098/2018.

ASUNTO: Carta de aceptación.

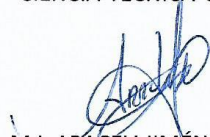
Dr. PRUDENCIO FIDEL PACHECO GARCÍA
Coordinador del Posgrado de Sistemas Integrados de
Manufactura y Estrategias de Calidad
De la Universidad Popular Autónoma del Estado de Puebla.

Por este medio reciba un cordial saludo y hago de su conocimiento que en mi función como Subdirectora Académica, le comunico que el C. ING. ALLAN JOSEPH AYALA LARA estudiante del Posgrado en Sistemas Integrados de Manufactura y Estrategias de Calidad de su Casa de Estudios, ha formado parte en el desarrollo del Proyecto "DISEÑO Y SIMULACIÓN DE UN REACTOR DE DEPOSICION QUIMICA DE VAPOR (CVD) PARA RECUBRIMIENTOS DE ARSENIURO DE GALIO", para obtener el grado de Maestro en Sistemas Integrados de Manufactura y Estrategias de Calidad, proyecto del cual es responsable el Dr. José Luis Bernal Ponce, profesor-Investigador del área de Ing. Metal-Mecánica de nuestra Institución, logrando generar avances teóricos y tecnológicos importantes para continuar con proyectos futuros de esta institución.

Poniendo de manifiesto, que el estudiante cumplió con las reglas de comportamiento e hizo uso adecuado de las instalaciones de nuestro Instituto y de igual forma respetó los acuerdos contraídos con el Director del proyecto, se extiende esta carta de liberación del proyecto.

Sin más por el momento, quedo de usted.

ATENTAMENTE:
"CIENCIA-TÉCNICA-CULTURA"



M.I. ARACELI JIMÉNEZ MENDOZA.
Subdirectora Académica.

