

Projekt 2

Folgende Festlegungen sind für alle Aufgaben zwingend:

- 1) Auf allen Ausarbeitungen und files ist der **Header** - wie folgt - vorne an zu stellen:

MFB420-ModSim-SS2011-Projekt2

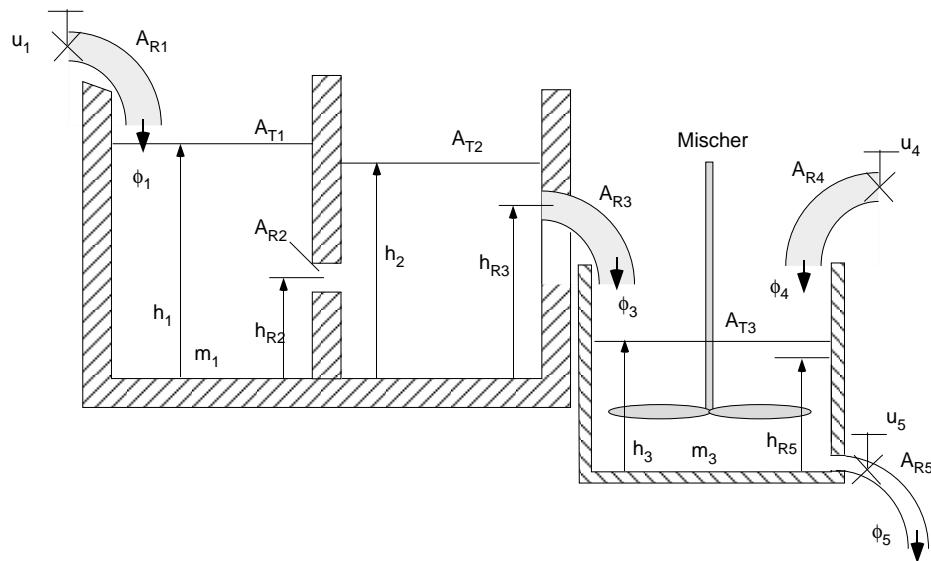
Gruppe __ Aufgabe __

<i>Stud.Nr.</i>	<i>Name</i>	<i>Vorname</i>	<i>Mat.Nr.</i>	

Bitte soviel Zeilen anfügen wie die Gruppe xx Teilnehmer hat. Aufgabe und Gruppe richtig stellen.

- 2) Eine Gruppe xx hat maximal 3 Teilnehmer.
Die Gruppenzuordnung bzw. Ihre GruppenNr. xx ist der Stud.Liste zu entnehmen. Die Gruppenzuordnung kann nach dem Ausgabetermin nicht mehr geändert werden.
- 3) Wir erwarten eine **Ausarbeitung in Papierform**, einfach geklammert. Druckform oder Handschrift.
Die Gliederung / Details finden Sie bei der Aufgabenstellung.
Abgabe bitte in das Postfach Wallrapp schräg gegenüber Dekanat. Termin siehe oben.
Eine Gruppe gibt nur eine Ausarbeitung ab.
- 4) Die Arbeit wird mit ca. 60 Punkten bewertet.
Bei Gruppenarbeit lassen Sie bitte erkennen, wer in der Gruppe welchen Anteil erbracht hat.
Sind n Arbeiten identisch, so erhalten alle Kandidaten dieser Arbeiten nur x/n Punkte.

Projekt 2 – Aufgabe 1



System:

Das Bild zeigt eine Mischanlage. Das Ventil u_1 wird geöffnet. Flüssigkeit 1 (Dichte ρ_1 in kg/dm^3) fließt mit Volumenstrom ϕ_1 in Liter/s in den offenen Tank 1. Bei der Höhe $h_1 = h_{1R2}$ fließt diese Flüssigkeit 1 durch den Querschnitt A_{R2} frei bzw. bei Gegendruck in den Tank 2. Beachte beim Rohrdurchgang eine Drosselwirkung $\alpha_{R2} = 0.8$. Der effektive Rohrquerschnitt ist somit $\alpha_{R2} A_{R2}$.

Ab einer Höhe $h_2 = h_{R3}$ fließt die Flüssigkeit 1 am Rohr mit Querschnitt A_{R3} frei aus in den offenen Misch-Tank 3. Hier wird die Flüssigkeit 1 mit der Flüssigkeit 2 (Farbe der Dichte ρ_2 in kg/dm^3) aus Rohr 4 mit Volumenstrom ϕ_4 in Liter/s und Querschnitt A_{R4} vermischt. Die aktuelle Tankhöhe ist h_3 .

Das Mischungsverhältnis soll 2(Flü1) : 1(Flü2) sein. Der Mischer wird mit einem 12V-DC-Motor, 100 W, angetrieben. Das Rühr-Widerstandsmoment an der Motorwelle sei durch $M_R = C h_3^2$ approximiert.

Das gemischte Medium (Flü3) mit Dichte ρ_3 in kg/dm^3 fließt nach Öffnen von u_5 am Rohr mit Querschnitt A_{R5} frei mit Volumenstrom ϕ_5 aus Tank 3. Der Massenstrom ist μ_5 (kg/s).

Prozessablauf:

1) Das Ventil u_1 wird geöffnet. Sobald Flü1 in den Tank 3 fließt, wird u_4 geöffnet und Flü2 fließt im gewünschten Verhältnis zu. Ab einer Höhe $h_3 = h_{R5}$ wird u_5 geöffnet und Flü3 fließt aus Tank 3. Bei $\phi_5 < \phi_{5\min}$ wird das Ventil u_4 wieder geschlossen.

Simulationsaussage:

1) Wie verhalten sich die Füllhöhen im Tank 1, 2, 3 bzw. der Ablaufstrom Flü3 am Rohr 5 über der Zeit für einen gegebenen Flü1-Strom ϕ_1 ? Kommt es zu einem Überlauf von Tank 1 oder 2?

2) Mit welchem Regler könnte u_1 geregelt werden, damit $\phi_5 = \phi_{5\text{mittel}} (1 - 1/2 \cos(k t))$ bestmöglich erfüllt wird.

Annahmen: Nehme laminare, reibungsfreie, wirbelfreie Strömung an. Temperatureinflüsse, Luftdruckschwankungen werden vernachlässigt. Die Anfangsbedingungen für die Tankhöhen sind alle null. Rohrdurchmesser können bei den Höhen vernachlässigt werden.

Daten: Erstelle die notwendigen Parameter zusammen.

Teilaufgaben - Aufgabe 1

1) <ca. 10 Punkte>

Für die Simulationsaussage 1 beschreibe kurz

- a) ein geeignetes physikalisches Modell(e),
- b) definiere Subsysteme und skizziere damit grob das Gesamtsystem,
- c) gebe die globalen Systemeingänge und -Ausgänge an
- d) liste die Modellannahmen (wichtige / unwichtige Effekte/ Wechselwirkungen)

Hinweis:

Als Ausgänge werden die Füllhöhen, Volumenströme, Massenströme gewünscht.

2) <ca. 40 Punkte>

Stelle die erforderlichen **Systemgleichungen** auf (nummeriere sie),
lege dazu die Zustandgrößen fest.

Ergänze ggf. die Abbildungen mit den wichtigen Größen.

Liste alle erforderlichen Parameter (mit Symbol, Benennung, Einheiten) auf.

Ermittle für den DC-Motor die notwendigen Parameter.

3) <ca. 10 Punkte>

Für die Simulationsaussage 2 ergänze das System / Modell

- a) in der Skizze des Gesamtsystem,
- b) wähle einen Regler aus,
- c) ergänze die Systemgleichungen und Systemparameter.

Projekt 2 – Aufgabe 2



System:

Das Bild zeigt eine elektrische Zahnbürste der Firma Braun (reale Zahnbürsten liegen Ihnen ebenfalls vor).

Für den Fall, der Akku sei geladen und liefert für die Zeit $t = 0 \dots t_{voll}$ die Spannung $U = \text{konst.}$ und den Strom $I(t)$ und die Bürste sei eingeschaltet, so treibt der DC-Motor die Abtriebswelle und somit die Bürste mit Lastmoment $M_L(t)$ an.

Prozessablauf:

Schalter u_1 wird betätigt. Strom fließt. Lastmoment $M_L(t)$ liegt an der Abtriebswelle an. Abhängig vom Lastmoment wird die Ladung des Akku und somit die Drehzahl des Motors absinken.

Simulationsaussage:

- 1) Für einen voll geladenen Akku mit konstanter Leistung und ein gegebenes Lastmoment $M_L(t)$ bestimme dazu die Drehfähigkeit des DC-Motors bzw. der Zahnbürste.
- 2) Wie verhält sich nun die Zahnbürste für ein mögliches Entladungsmuster des Akku.

Annahmen: Erstelle das System / Modell so gut wie nötig, um die Aussagen zu beantworten.

Daten: Erstelle die notwendigen Parameter zusammen.



Teilaufgaben - Aufgabe 2

1) <ca. 10 Punkte>

Für die Simulationsaussage 1 beschreibe kurz

- a) geeignete physikalische Modelle,
- b) definiere Subsysteme und skizziere damit grob das Gesamtsystem,
- c) gebe die globalen Systemeingänge und -Ausgänge an,
- d) liste die Modellannahmen (wichtige / unwichtige Effekte/ Wechselwirkungen)

2) <ca. 40 Punkte>

Stelle die erforderlichen **Systemgleichungen** auf (nummeriere sie),
lege dazu die Zustandgrößen fest.

Ergänze ggf. die Abbildungen mit den wichtigen Größen.

Liste alle erforderlichen Parameter (mit Symbol, Benennung, Einheiten) auf.

Ermittle anhand der vorh. Zahnbürsten für die Subsysteme die notwendigen Parameter.

3) <ca. 10 Punkte>

Für die Simulationsaussage 2 ergänze das System / Modell

- a) in der Skizze des Gesamtsystem,
- b) wähle ein Modell für den Akku aus,
- c) ergänze die Systemgleichungen und Systemparameter.

Projekt 2 – Aufgabe 3

System: Verdampfer mit Reaktionskammer: Im Verdampfer wird eine flüssige Chemikalie verdampft, das reaktive Gas (Precursor, hier TEMAZ= $\text{Zr}(\text{NCH}_3\text{C}_2\text{H}_5)_4$) dann mit einem weiteren, inerten Gas in die Reaktionskammer gespült. Der Precursor reagiert an der Oberfläche des Substrates zusammen mit O_2 zu einer ultraharten ZrO_2 Beschichtung. Es handelt sich um einen Atomic Layer Deposition (ALD) Prozeß: Zunächst muß das Substrat komplett mit einer Monolage von TEMAZ bedeckt sein. Erst dann darf das O_2 eingeleitet werden.

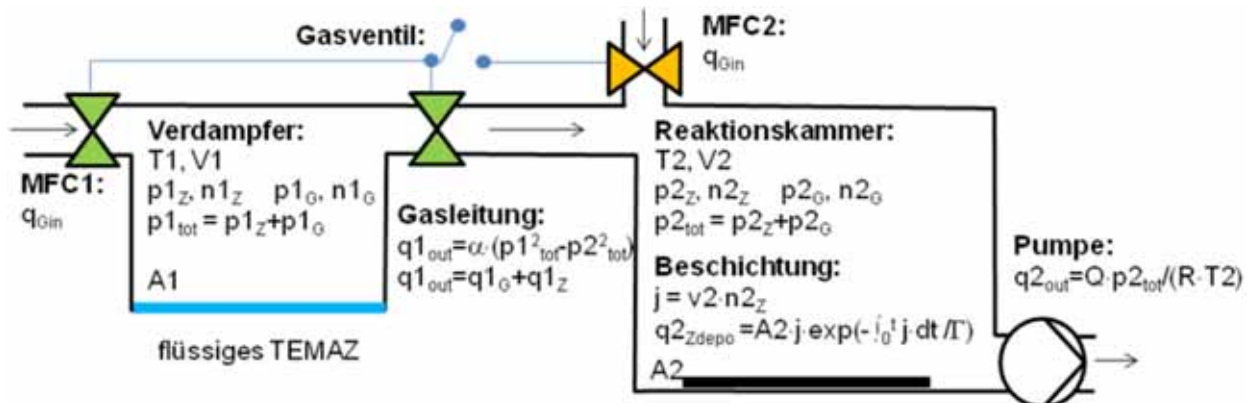
Notation: Stoffmengen n [mol], Gasflüsse q [mol/s], Partialdrücke p [Pa].

Der **Verdampfer** ist ein Behälter, in welchem TEMAZ verdampft. Die Flüssigkeit hat eine Oberfläche von $A_1 = 100\text{cm}^2$ und verdampft in ein Gasvolumen von $V_1 = 100\text{cm}^3$.

Beim **Verdampfungsvorgang** ändert sich die Stoffmenge des TEMAZ $n_{1Z}(t)$ durch Verdampfung $q_{1Z\text{Verd}} = s \cdot \beta \cdot p_{1Z}(t)$ und Kondensation $q_{1Z\text{Kond}} = s \cdot \beta \cdot p_D$, außerdem durch Abfluß in die Reaktionskammer mit $q_{1Z\text{out}}$. Dabei ist p_D der Dampfdruck und $p_{1Z}(t)$ der Partialdruck des TEMAZ. Die Verdampfungsgeschwindigkeit wird durch $s=0.01$ beschrieben. Die Umrechnung vom Partialdruck des TEMAZ auf die Gasflüsse geschieht durch β , wobei hier die Fläche A_1 der Flüssigkeit und die mittlere thermische Geschwindigkeit der Moleküle eingeht:

$$\beta = (A_1 / (R \cdot T_1)) (v_1 / 4) \quad v_1 = (8 \cdot R \cdot T_1 / (\pi \cdot M))^{0.5}$$

$R = 8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$ ist die allgemeine Gaskonstante und $M = 0.323 \text{ kg/mol}$ die molare Masse von TEMAZ, T_1 die Temperatur im Verdampfer und $\pi = 3.14159...$ Wenn der Weg in die Reaktionskammer verschlossen wird, kann ein Gleichgewicht zwischen Kondensation und Verdampfung entstehen, und der Partialdruck des TEMAZ erreicht den Dampfdruck.



Der Precursor wird mit Hilfe des inerten Gases G in die **Reaktionskammer** gespült, und zwar wird G mit einem definierten Fluß q_{1Gin} mittels eines MFC1 (mass flow controller) in den Verdampfer eingeleitet (Stoffmenge $n_{1G}(t)$), und das mit TEMAZ vermischte Gas über eine Gasleitung in die Kammer gedrückt. Dieser Gasfluß hängt von dem Strömungswiderstand der Gasleitung zur Reaktionskammer ab, welcher durch den Parameter α beschrieben wird

$$q_{1Z}(t) + q_{1G}(t) = q_{1out}(t) = \alpha \cdot (p_{1tot}(t)^2 - p_{2tot}(t)^2)$$

Die Stoffmengen in der Reaktionskammer mit dem Volumen V_2 und der Temperatur T_2 ergeben sich aus den Gasflüssen q_{1Zout} und q_{1Gout} vom Verdampfer sowie eines Inertgasflusses q_{Gin} , der zeitweise zugeschaltet wird (mittels MFC2, sobald MFC1 sowie das Gasventil geschlossen ist). Des weiteren hängt der Druck von der Pumpe mit der Pumpleistung Q ab, welche eine Stoffmenge von $q_{2out} = Q \cdot p_{2tot} / (R \cdot T_2)$ abpumpt. Dabei ist $p_{2tot}(t) = p_{2G}(t) + p_{2Z}(t)$.

Schließlich wird die Stoffmenge in der Reaktionskammer noch durch den Beschichtungsvorgang verändert: der Precursor trifft mit einer Gasflussdichte von $j = v_2 \cdot n_{2Z}$ [mol/($\text{m}^2 \cdot \text{s}$)] auf das Substrat und belegt in der Zeit dt einen Flächenanteil von $j \cdot dt / \Gamma$, wobei Γ die Dichte von freien Plätzen ist. Da er nur auf den verbleibenden, freien Plätzen haften kann, ist die Abscheiderate

$$q_{2Z\text{depo}} = A_2 \cdot j \cdot \exp(- \int_0^t j \cdot dt / \Gamma)$$

Annahmen:

- 1 sccm ist ein Gasfluß, und zwar die Gasmenge, die in einem Volumen von 1cm³ unter Normalbedingungen enthalten, und welche in 1 Minute fließt.
- Der Dampfdruck ist experimentell bestimmt und wird durch die Gleichung beschrieben:
$$p_D(T) = 10^5 \cdot 10^{(3.71063 - 2009.83/(T - 84.1653))}$$
 (T in Kelvin, $p_D(T)$ in Pascal)
- Die Standard Verdampfungstemperatur des TEMAZ beträgt 110°C, es darf nicht über 120°C geheizt werden. Der Standardgasfluß $q_{1\text{Gin}}$ beträgt 10sccm, der MFC kann zwischen 1 und 1000 sccm arbeiten. Die nominelle Pumpleistung beträgt 60 l/min und kann auf maximal 100 l/min erhöht werden. Die Temperatur in der Reaktionskammer beträgt 300°C. Das Volumen des Verdampfers beträgt 100cm³ und die Oberfläche der Flüssigkeit 100cm². Beide Werte können verdoppelt werden. Das Volumen der Reaktionskammer beträgt 1000cm³, die Oberfläche des Substrates 1000cm². Der Parameter für den Strömungswiderstand der Gasleitung beträgt $\alpha = 10^{-8} \text{ mol/(s Pa}^2\text{)}$ und kann um einen Faktor 10 erhöht oder erniedrigt werden.

Simulationsaussage:

Ist die Beschichtung des Substrates mit einer Monolage innerhalb eines 1s + 1s Zyklus möglich ? Dabei muß der Precursor die Fläche nach 1 s um mindestens 90% bedeckt haben und in der folgenden 1 s das TEMAZ auf höchstens 10% des maximalen Partialdrucks abgepumpt sein.

Teilaufgaben – Aufgabe 3

1) <ca. 10 Punkte>

Um die Simulationsaussage behandeln zu können, **beschreibe kurz**

- a) geeignete physikalische Modelle,
- b) definiere Subsysteme und skizziere damit grob das Gesamtsystem,
- c) gebe die globalen Systemeingänge und -Ausgänge an,
- d) liste die Modellannahmen (wichtige / unwichtige Effekte/ Wechselwirkungen)

Für die Umrechnung zwischen Stoffmenge und Partialdruck nehme ein ideales Gas an. Nehme zunächst an, dass das MFC1 und Gasventil geöffnet sind, und das Inertgas in den Verdampfer strömt (MFC2 geschlossen).

2) <ca. 40 Punkte>

Stelle die erforderlichen **Systemgleichungen** auf (nummeriere sie),
lege dazu die Zustandsgrößen fest.

Ergänze ggf. die Abbildungen mit den wichtigen Größen.

Liste alle erforderlichen Parameter (mit Symbol, Benennung, Einheiten) auf.

3) <ca. 10 Punkte>

Im Prozess wird das TEMAZ für 1s zugeführt (MFC1 auf, Gasventil auf, MFC2 zu) und dann für 1 s abgesperrt (MFC1 zu, Gasventil zu, MFC2 auf) damit der Sauerstoff mit der Monolage reagieren kann (wird hier nicht modelliert). Dies wird zyklisch wiederholt.

Für die Simulationsaussage

- a) Wie sehen die Anfangsbedingungen und die zyklischen Anschlussbedingungen aus ?
- b) Welche Möglichkeiten haben Sie, den Gasfluss des TEMAZ in die Reaktionskammer zu vergrößern um damit die Prozesszeit zu verringern ?