

# Высокопроизводительные вычисления в задачах газофазного синтеза получения наноматериалов



## 9 Высокопроизводительные вычисления в задачах газофазного синтеза получения наноматериалов

Большинство задач, которые связаны со многими аспектами развития нанотехнологий, по своей природе междисциплинарны. Один из характерных примеров — проблематика применения газофазного синтеза в нанотехнологиях. По своему существу такие технологии являются реализацией процессов химического осаждения вещества из газообразного состояния, подаваемого в реакционную зону, в твердое состояние. Физический эксперимент при обучении студентов и в исследовательской работе не нагляден, он не позволяет изучать зависимость характеристик получаемого материала от различных физических параметров системы, занимает много времени и дорог. Математическое моделирование в этом случае представляется значительно более эффективным. В то же время математическое моделирование междисциплинарных задач требует больших вычислительных ресурсов.

### АВТОРЫ:

**Ю.Я. Болдырев** – докт. тех. наук, профессор, зав. кафедрой математического и программного обеспечения высокопроизводительных вычислений, директор Отделения информационно-вычислительных ресурсов, Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,  
e-mail: boldyrev@phmf.spbstu.ru

**К.Ю. Замотин** – начальник отдела прикладных программных систем Отделения информационно-вычислительных ресурсов университета, Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,  
e-mail: kirart@gmail.com

**Е.П. Петухов** – начальник отдела системного программного обеспечения Отделения информационно-вычислительных ресурсов университета, Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Математическое моделирование в XX веке превратилось в универсальный инструментальный, который с течением времени начал занимать все более значимые для инженерного и естественнонаучного анализа позиции, доминируя над многовековыми традициями физического эксперимента. Этот процесс сопровождался очень серьезным и глубоким развитием технологий математического моделирования [1], начавшимся в конце XIX века переходом от классической математики И. Ньютона, Л. Эйлера и Ж. Лагранжа к математике Д. Гильберта, Р. Фреше и других великих ученых. Задачи, которые ставятся сегодня, все более близки к полномасштабному описанию явлений, отражающих картины окружающего нас реального физического мира, мира природы и всего того, что создано человеком. Заметим, что натурный физический эксперимент далеко не всегда позволяет нам проникнуть в суть многих тонких процессов и явлений хотя бы потому, что в ходе происходящих при этом «измерений» мы вторгаемся в изучаемый процесс.

Подавляющее большинство процессов и явлений, происходящих вокруг нас, по своему существу междисциплинарны (или мультидисциплинарны), то есть для их описания требуется привлечение разных отраслей знания — это, например, может быть механика твердого и деформируемого тела, механика жидкости и газа, химическая кинетика и т.д. При этом корректные математические постановки междисциплинарных задач предполагают рассмотрение связанных краевых или начально-краевых задач математической физики, для численного решения которых требуются большие вычислительные ресурсы.

Яркий пример всего сказанного — бурно развивающаяся в последние десятилетия область нанотехнологий, причем большинство задач, связанных с развитием нанотехнологий по своей природе междисциплинарны, а значит и вычислительно ресурсоемки при их моделировании с использованием ЭВМ. Одним из характерных примеров этого является проблематика применения газофазного синтеза в нанотехнологиях. Такие технологии являются реализацией процессов химического осаждения вещества из газообразного или плазменного состояния, подаваемого в реакционную зону, в твердое состояние [2]. Выражение «химическое осаждение из газовой фазы» — наиболее точный перевод английского термина *chemical vapor deposition* (CVD) [3]. Началом внедрения CVD-процессов послужило создание полупроводниковых приборов и интегральных схем, вышедших далеко за пределы этих сфер в другие области технических приложений. Сегодня CVD-технологии применяются в оптической промышленности, в машиностроении для получения износостойких, упрочняющих и антикоррозионных покрытий, в химической промышленности, в медицине и многих других отраслях промышленности.

К настоящему времени в мировой практике накоплен большой экспериментальный материал по результатам исследования CVD для получения тонких пленок, нанопорошков, наноструктур и т.д. Однако, несмотря на тот факт, что исследованию некоторых конкретных технологических процессов посвящено множество публикаций, их детерминированные математические модели, корректно и в полной мере описывающие физико-химические закономерности, отсутствуют. Это обусловлено чрезвычайной сложностью механизма CVD-процессов, характеризующихся глубокой междисциплинарностью физико-химических процессов, достаточно указать только на «многомаршрутность» химических реакций и многоступенчатость процессов превращений. Для многих задач в области химического осаждения из газовой фазы проблемными являются корректные качественные и количественные описания совокупности физико-химических процессов, проходящих в реакционной зоне CVD-реактора.

Сегодня, математическое моделирование CVD-процессов — одна из практически важных задач, находящихся на стыке газовой динамики, физико-химических реакций, тепло- и массообмена. При этом здесь требуется одновременное детальное рассмотрение следующих физических процессов:

- течение газовой среды реагентов и продуктов (как правило, турбулентное);
- перенос в многокомпонентной газовой смеси;
- объемные и поверхностные химические реакции;
- тепло- и массообмен;
- тепловое излучение.

При этом задача еще более усложняется, если в рассматриваемой модели реактора используется плазма и электромагнитные разряды.

Остановимся на проблемах вычислительных аспектов рассматриваемого круга математических задач. Для определения всей совокупности физических величин в реакционной зоне нам в первую очередь требуется решить задачу о течении газовой фазы во всей области CVD-реактора (рис. 1), в рамках которой определяются поля давления, скорости, плотности и температуры.

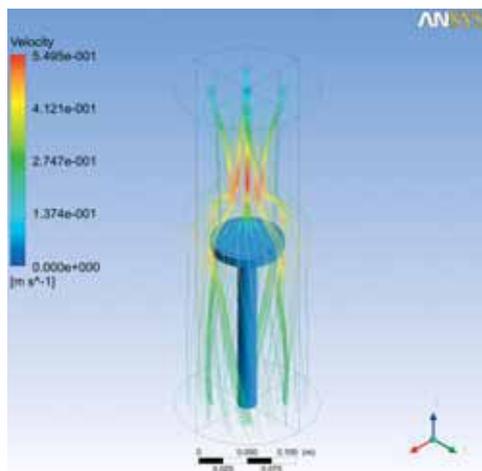


Рис. 1. Линии тока внутри CVD-реактора

Для моделирования металлорганического процесса химического осаждения из газовой фазы (МО ХОГФ) тонких пленок были выбраны следующие системы:

МО ХОГФ GaAs в реакционной системе  $\text{AsH}_3 - \text{Ga}(\text{CH}_3)_3 - \text{H}_2$

МО ХОГФ GaN в реакционной системе  $\text{NH}_3 - \text{Ga}(\text{CH}_3)_3 - \text{H}_2$

МО ХОГФ AlGaIn в реакционной системе  $\text{NH}_3 - \text{Ga}(\text{CH}_3)_3 - \text{Al}(\text{CH}_3)_3 - \text{H}_2$

МО ХОГФ AlGaAs в реакционной системе  $\text{AsH}_3 - \text{Ga}(\text{CH}_3)_3 - \text{Al}(\text{CH}_3)_3 - \text{H}_2$

Этот выбор обусловлен тем, что данные полупроводниковые материалы широко используются при получении наногетероструктур, на основе которых создается множество приборов (полевые транзисторы, лазеры, светодиоды, фотоприемники и др.). Указанные реакционные системы отличаются большим количеством реакций, протекающих в объеме (порядка 20 реакций) и на поверхности (более 50 реакций). Для каждой реакции определяются (были взяты из общедоступных источников) значения следующих величин: «предэкспоненциальный» фактор (A), показатель температуры (b) и энергия активации (E) для скорости реакции в Аррениусовом виде  $k = AT^{-b} e^{-\frac{E}{RT}}$ . Термодинамические свойства реагентов системы использовались в формате CHEMKIN, т.е. задавались коэффициенты, определяющие температурную зависимость энтальпии и энтропии, данные брались из [4].

Расчеты велись на основе программного комплекса ANSYS FLUENT, который в своих последних версиях приобрел междисциплинарный характер. Его среда позволяет моделировать не только традиционные аэрогидродинамические задачи, но и практически все обозначенные выше задачи — процессы переноса в многокомпонентных газовых смесях (рис. 2), объемные и поверхностные химические реакции, тепло- и массообмен и тепловое излучение.

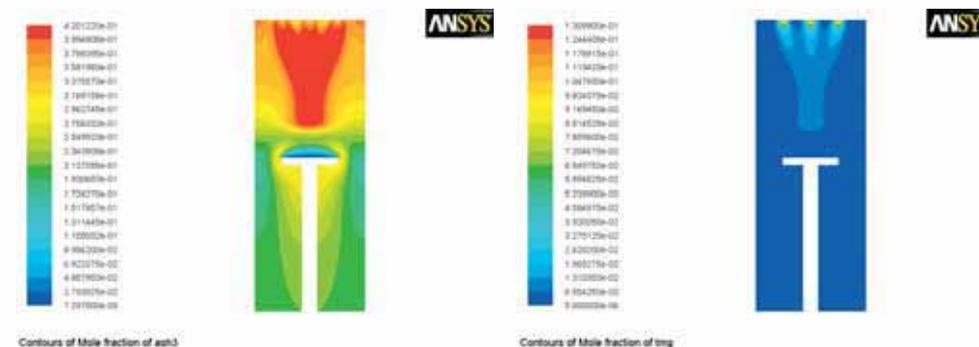


Рис. 2. Молярные доли реагентов

Разработчиками было поставлено условие — результаты должны быть получены за сравнительно небольшое время (порядка минут). При этом было необходимо иметь возможность решения серии задач при изменении, какого-либо параметра или их совокупности, например, когда при неизменной геометрии расчетной области варьируются граничные или начальные условия краевой (начально-краевой) задачи. Такие требования к постановке задач были связаны с тем, что главной целью работ было создание эффективного инструментария для моделирования процессов как во всей области CVD-реактора, так и в его реакционной зоне с целью создания набора лабораторных работ для студентов по изучению CVD-процессов. Требования быстроты вычислений и их многовариантность привели к необходимости при решении одного варианта задачи использовать вычислительный ресурс не более чем одного восьмиядерного узла кластера. Такой минимальный вычислительный ресурс позволяет распределить вычислительные ресурсы всего используемого кластера (например, при проведении лабораторного практикума) таким образом, чтобы этим ресурсом могли одновременно воспользоваться как студенты нескольких подгрупп на практических занятиях, так и отдельные исследователи.

Рассматривалось получение нанопленок в реакторе вертикального типа с вращающимся диском. Все геометрические размеры реактора (высота, диаметр, высота расположения диска, способ подачи газов в реактор) выбираются пользователем. Инструментарий позволяет проводить моделирование как на малых учебных, так и на крупных промышленных реакторах.

Целью работы является получение спектра физических значений реагирующего газового потока в реакторе: компоненты скорости, давление, температура, концентрации как исходных, так и результирующих веществ-реагентов. Основным результатом моделирования можно считать получение распределения скорости осаждения пленки по площади подложки (рис. 3), находящейся на вращающемся диске, на котором происходит осаждение.

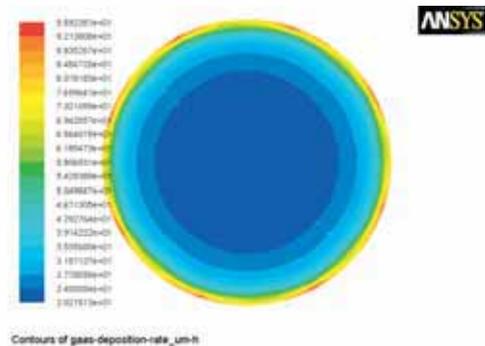


Рис. 3.  
Скорость роста нанопленки

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2001. – 320 с. – ISBN 5-9221-0120-X.
2. Александров С.Е. Технология материалов электронной техники. Процессы химического осаждения из газовой фазы: Учеб. пособие. / СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2005. – 92 с.
3. Chemical Vapor Deposition, Principals and Application / Eds. Hitchman M.I. and Jencen K.F. – London: Academic Press, 1993. – 678 p.
4. NIST-JANAF Thermochemical Tables, 4th Edition, M. Chase Monograph. – № 9, 1998. – 2 vol. – 1952 p.