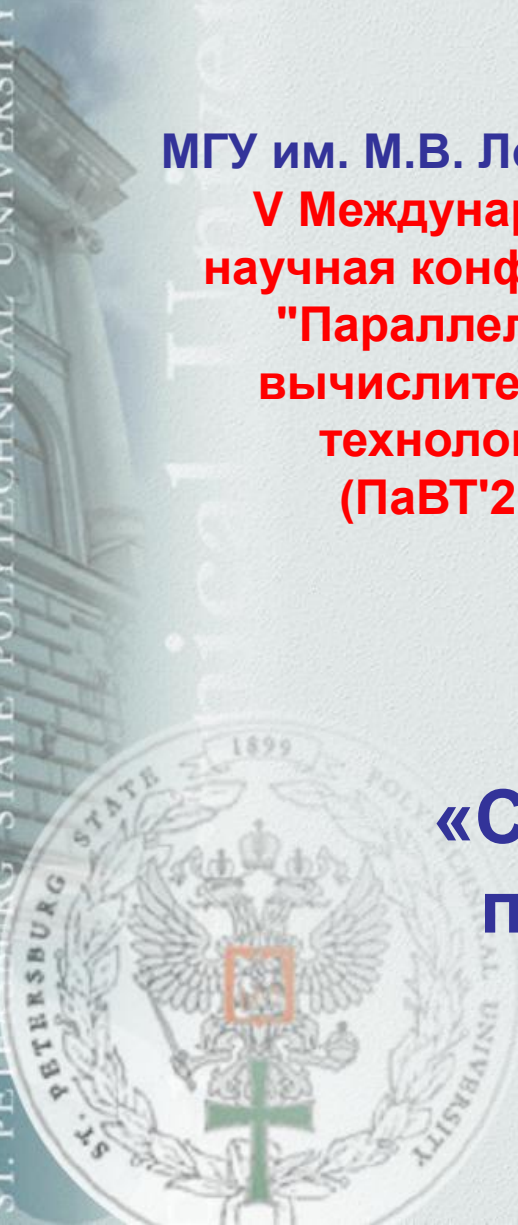


МГУ им. М.В. Ломоносова  
**V Международная  
научная конференция  
"Параллельные  
вычислительные  
технологии»  
(ПаВТ'2011)**



**«Суперкомпьютерные технологии и  
проблемы газофазного синтеза в  
нанотехнологиях»**



## Авторы доклада:

**Александров С.Е.** - проф., д.х.н., зав. кафедрой «Технологии материалов электронной техники», проректор;

**Болдырев Ю.Я.** - проф., д.т.н., зав. кафедрой «Математическое и программное обеспечение высокопроизводительных вычислений», директор Отделения ИТК ;

**Замотин К.Ю.** – начальник отдела;

**Петухов Е.П.** – начальник отдела;

**Уваров А.А.** – аспирант.



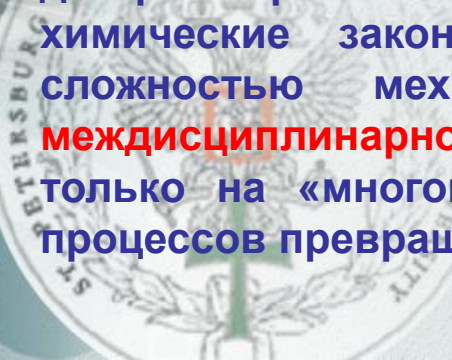
# Что такое газофазный синтез!?

Это химическое осаждение из газовой фазы,

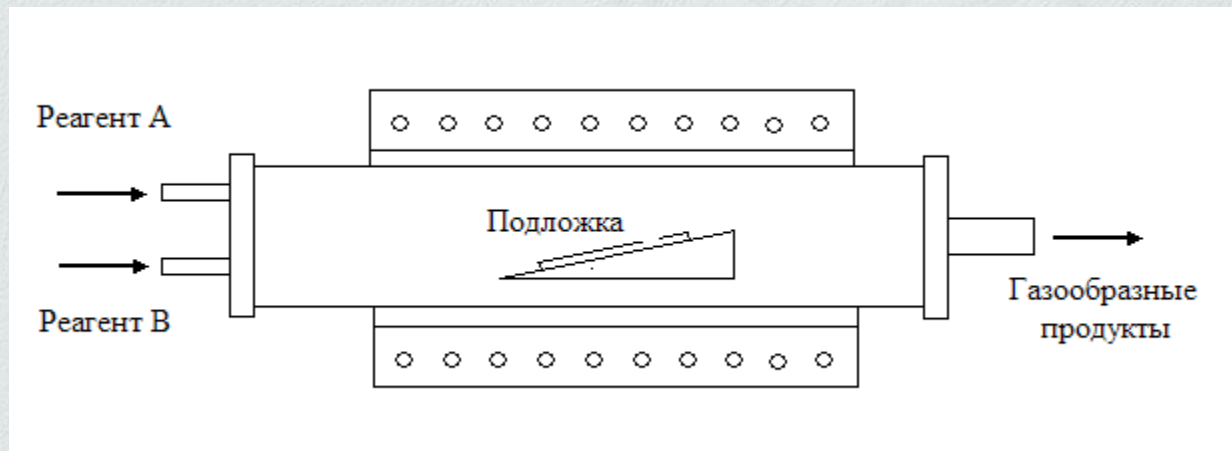
т.е. это метод получения вещества в твердом состоянии в результате химического взаимодействия реагентов, подаваемых в зону реакции в газообразном или плазменном состоянии. Выражение «химическое осаждение из газовой фазы» является наиболее точным переводом английского термина *chemical vapor deposition* (CVD).

Началом внедрения CVD процессов послужили создание полупроводниковых приборов и интегральных схем, вышедших далеко за пределы этих сфер в другие области техники. Сегодня CVD процессы применяются в оптической промышленности, в машиностроении (износостойкие, упрочняющие и антикоррозионные покрытия), в химической промышленности для получения пигментов и катализаторов, в медицине для покрытий с улучшенной биосовместимостью и многих других областях промышленности.

К настоящему времени в мировой практике накоплен большой экспериментальный материал по результатам исследования CVD для получения тонких пленок, нанопорошков, нановолокон, наностержней и наноструктур. Однако, несмотря на тот факт, что исследованию некоторых конкретных технологических процессов, посвящены сотни и даже тысячи публикаций, их детерминированные модели, достоверно и однозначно 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.

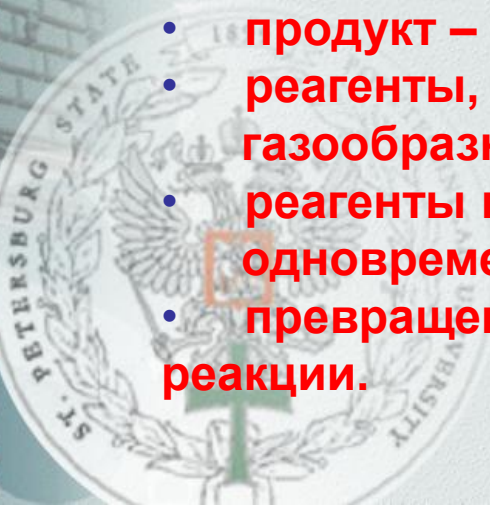


## Приведем схематическое изображение CVD процесса

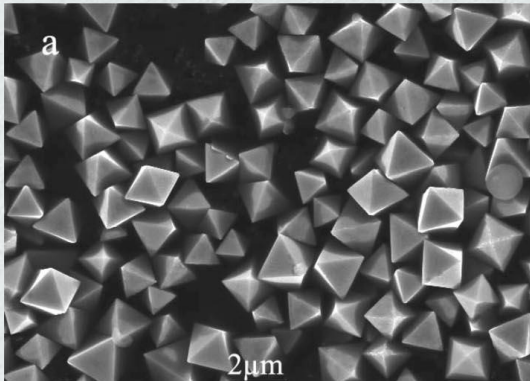


CVD процессы определяют четыре существенных признака, отличающих их от других химико-технологических процессов, а именно:

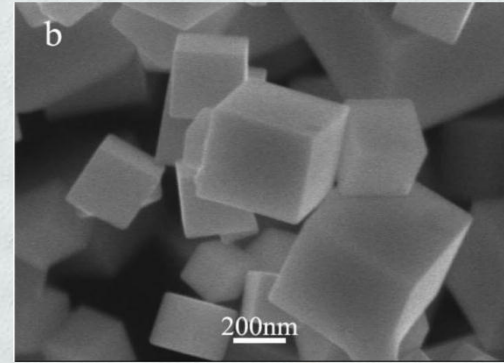
- **продукт – вещество в твердом состоянии;**
- **реагенты, подаваемые в реакционную зону, находятся в газообразном или плазменном состоянии;**
- **реагенты в том случае, если их больше одного, подаются одновременно в реакционную зону;**
- **превращения, происходящие с реагентами, - химические реакции.**



Применения CVD процессов для получения нанопленок, нанотрубок, нанопорошков, на основе которых создаются новые материалы для широчайшего круга изделий.

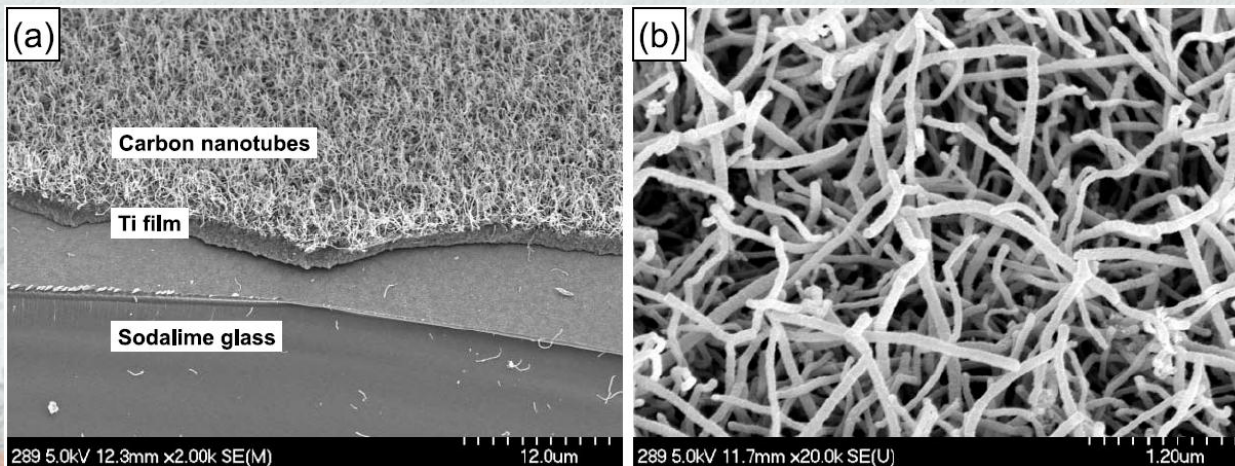


Из нанооктаэдров



Пленки

Из изображение нанокубов



Характерные изображения множества нанотрубок

# Схемы типичных реакторов, используемых для созданий названных выше материалов

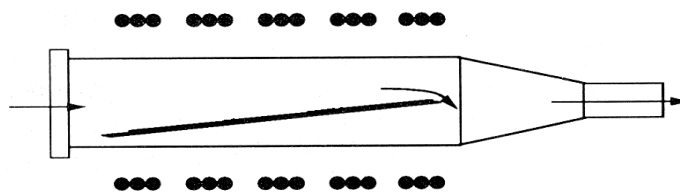
а – горизонтальный реактор;

б – вертикальный реактор;

в – реактор «баррелевского» типа (“barrel”);

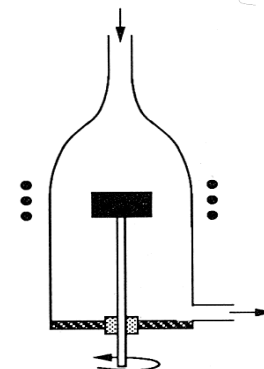
г – реактор типа «панкейк» (“pancake”);

д – многоподложечный реактор для CVD процессов при пониженном давлении.



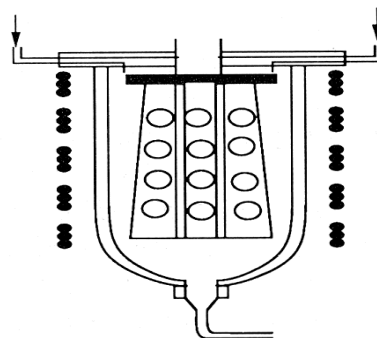
Горизонтальный CVD-Реактор

(а)

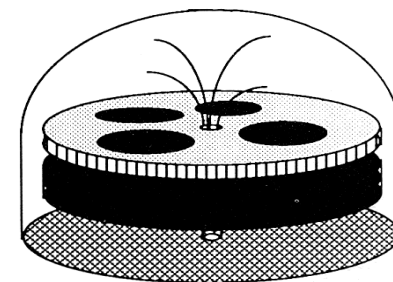


Вертикальный CVD-Реактор

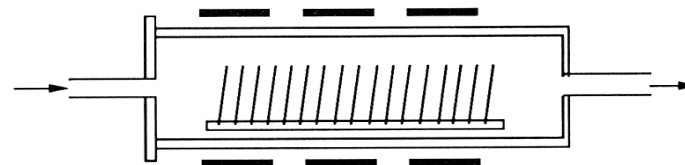
(б)



(в)



(г)



(д)

Данные типы реакторов, были разработаны и успешно использовались в микроэлектронике до конца 20 века и в начале века 21.

Математическое моделирование CVD-процессов является на сегодня одной из самых сложных и практически важных задач, находящихся на стыке механики сплошной среды, химических реакций и тепло массообмена.

Детальное моделирование требует одновременного рассмотрения нескольких существенно разных и чрезвычайно сложных физических явлений:

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

Задача еще более усложняется, если в системе используется плазма и электромагнитные разряды.

Таким образом, рассматриваемый круг задач математического моделирования CVD-процессов **относится к существенно междисциплинарным задачам.**

Итак, что же представляет собой математическая формулировка, т.е. постановка задачи математической физики для CVD-процессов междисциплинарным задачам. Попробуем сначала указать на важнейшие числа подобия имеющих здесь процессов и их в.

Шмидт (Sc)	1-10
Рейнольдс (Re)	$10^{-1}$ - $10^3$
Пекле (тепл.) ( $Pe_h$ )	$10^{-1}$ - $10^2$
Пекле (масс.) ( $Pe_m$ )	$10^{-1}$ - $10^3$
Грасгоф (тепл.) ( $Gr_t$ )	1- $10^5$
Грасгоф (конц.) ( $Gr_s$ )	1- $10^2$
Рэлей (тепл.) ( $Ra_t$ )	1- $10^5$
Рэлей (конц.) ( $Ra_s$ )	1- $10^2$
Дамкёлер (газ. фаза) ( $Da_g$ )	$10^{-3}$ - $10^3$
Дамкёлер (поверхн.) ( $Da_s$ )	$10^{-3}$ - $10^3$

Основу математических моделей CVD-процессов составляют законы сохранения массы, импульса и энергии, образующие в совокупности систему уравнений Навье - Стокса для многокомпонентной реагирующей среды. К ключевым замыкающим систему уравнения относятся уравнение состояния, а также уравнения, определяющие скорость химических реакций и перенос теплового излучения.

При этом течение газовой среды реагентов и продуктов (как правило, турбулентное) дополняется



## уравнениями

- переноса в многокомпонентной газовой смеси,
- объемных и поверхностных химических реакций,
- тепло и массообмена и теплового излучения.

Уравнения Навье - Стокса включают в себя уравнение неразрывности для многокомпонентной реагирующей смеси с массовыми долями реагентов  $Y_\alpha$

причем:  $\sum_{\alpha} Y_{\alpha} = 1$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_i}{\partial x_i} = 0$$

Уравнение переноса компонент:

$$\frac{\partial \rho Y_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_{\alpha}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_j} \right) + \dot{r}_{\alpha}$$

Уравнение сохранения импульса (количества движения) :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mu \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right) + \rho g_i$$

Уравнение переноса энтальпии:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j h}{\partial x_j} = \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\mu}{Pr} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial q_{r,j}}{\partial x_j}$$

Система уравнений записана в существенно дозвуковом приближении, отметим в связи с последним, что число Маха  $M$  мы не отнесли к критериям подобия.

Далее. В приведенной системе уравнений мы никак не упомянули **важнейшую проблему – проблему собственно химического осаждения в окрестности поверхности подложки**, а также ряд других важных проблем. Опустим эти проблемы на первой стадии моделирования работы CVD-реактора, т.е. на стадии описания течения газофазной смеси в самом реакторе вплоть до окрестности подложки где и идет сам процесс осаждения.

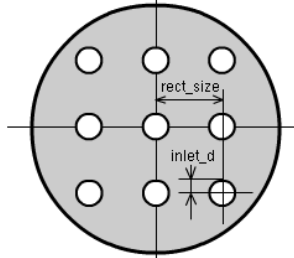
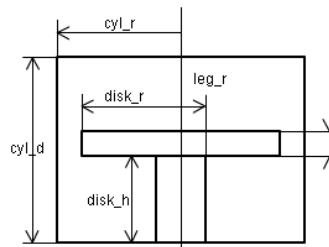
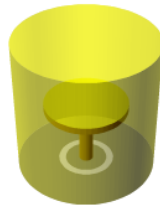
**Моделирование проводилось в рамках программного комплекса ANSYS Fluent с использованием до 64 процессоров.**

При описании течения мы вынуждены для его корректности руководствоваться тем, что оно турбулентно. Это резко осложняет ситуацию, т.к. в турбулентном течении спектр пространственных и временных флуктуаций слишком широк, для численного разрешения всех масштабов. Поэтому переходят от расчёта осредненных, а не мгновенных, значений параметров течения. Здесь имеется несколько подходов, а точнее моделей турбулентности. Был использован подход на основе осреднения исходных уравнений по Рейнольдсу (**RANS - Reynolds-Averaged Navier-Stokes**) искомыми являются осреднённые поля скорости, давления, температуры, концентраций компонентов и других характеристик потока, а замыкающие соотношения описывают вклад турбулентных пульсаций, осреднённых, как и искомые величины, *по всему спектру*.

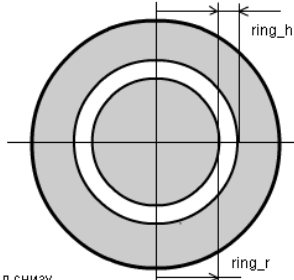
# К моделированию течения газовой смеси в реакторе

## Модель реактора: Новая задача

Геометрия реактора    Физические параметры    Параметры сетки



Вид сверху

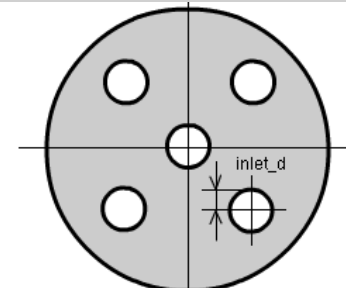


Вид снизу

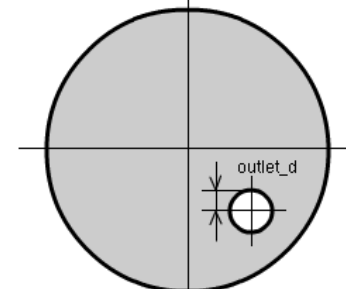
Радиус реактора (cyl_r)	0.5	Высота реактора (cyl_d)	1
Радиус диска (disk_r)	0.3	Высота диска (disk_d)	0.05
Радиус ножки (leg_r)	0.05	Высота, на которой расположен диск (disk_h)	0.45
Расположение входных отверстий (rect)	Решеткой	Тип выходного отверстия (ring)	Кольцо
Диаметр входного отверстия (inlet_d)	0.05	Диаметр выходного отверстия (outlet_d)	0.05
Количество входных отверстий (inlet_N)	6	Радиус кольца на выходе (ring_r)	0.15
Шаг решетки входных отверстий (rect_size)	0.15	Ширина кольца на выходе (ring_h)	0.05

## Модель реактора: Новая задача

Геометрия реактора	Физические параметры	Параметры сетки
	Рабочее давление в реакторе (Па):	10000
	Рабочая температура в реакторе (K):	303
	Скорость входного потока (м/с):	0.02189
	Температура смеси на входе (K):	293
	Температура верхней крышки реактора (K):	293
	Температура стенок реактора (K):	473
	Температура верхней поверхности диска (K):	1023
	Температура нижней поверхности диска (K):	1023
	Температура торца диска (K):	720
	Температура ножки (K):	720
	Температура нижней крышки реактора (K):	303
	Угловая скорость вращения подложки (рад):	80



Вид сверху

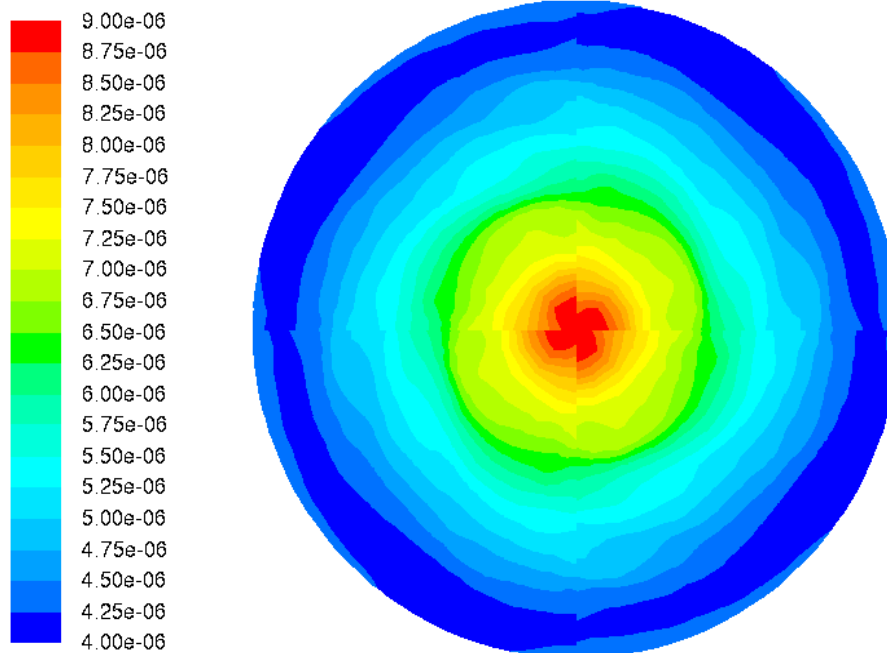
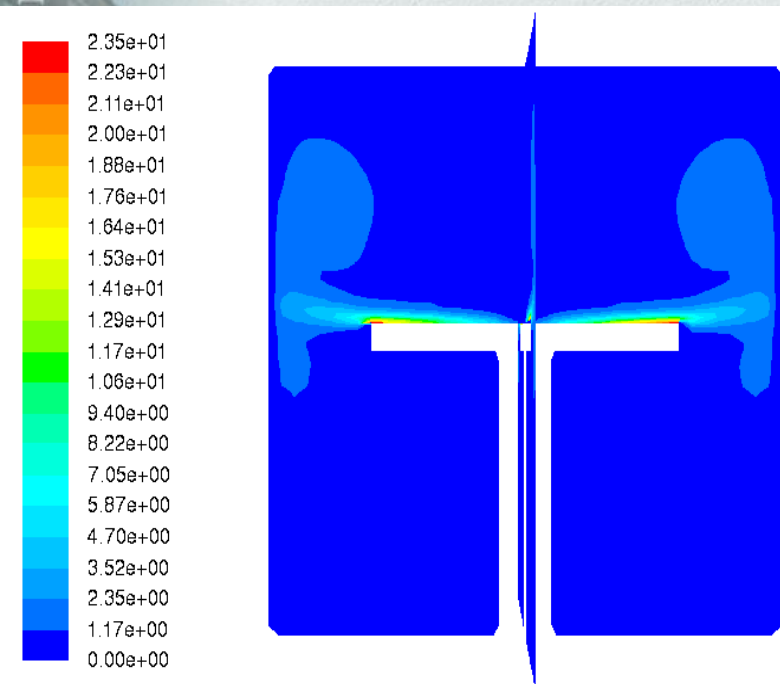


Вид снизу

К геометрии реактора - справа  
ТИПЫ «ИСТОЧНИКОВЫХ СОПЕЛ»

## Поля скоростей в реакционной зоне

## Скорость осаждения на диске (на подложке)

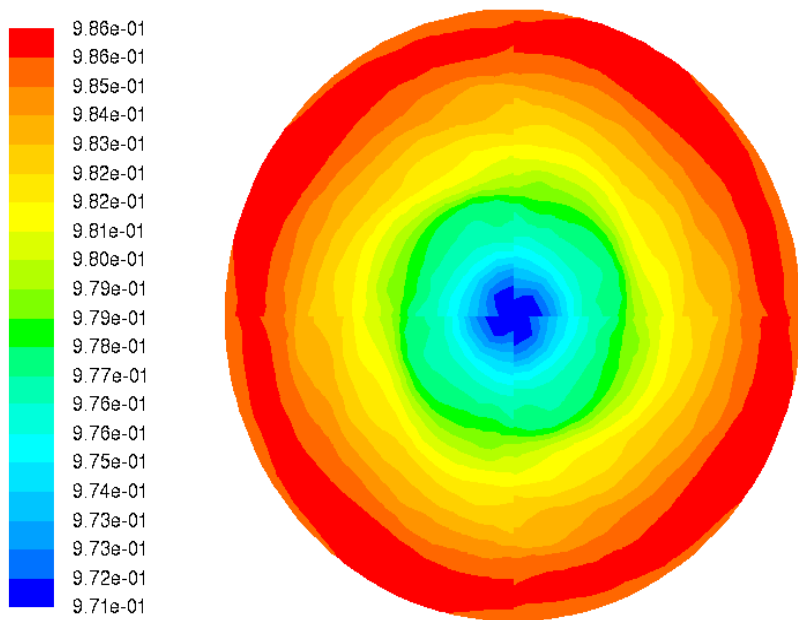


Contours of Velocity Magnitude (m/s)

Contours of Surface Deposition Rate of as (kg/m<sup>2</sup>-s)

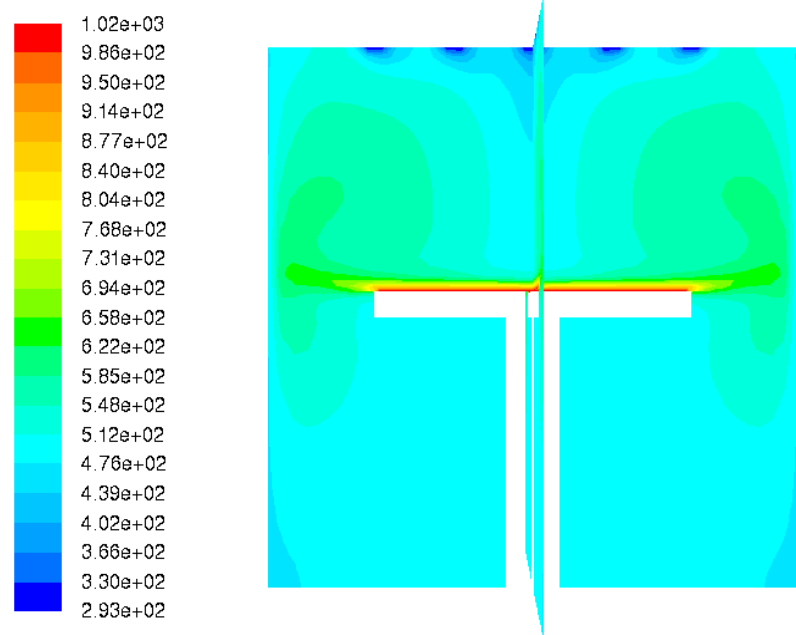


## Плотность осаждения материала



Contours of Surface Coverage of as\_s

## Поля температур в реакционной зоне



Contours of Static Temperature (k)

Благодарю за внимание

