

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РОСТА НАНОПЛЕНОК МЕТОДОМ ХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ¹

Ю.Я. Болдырев, К.Ю. Замотин, Е.П. Петухов

Большинство задач, которые связаны со многими аспектами развития нанотехнологий, по своей природе существенно междисциплинарны. Одним из наиболее характерных примеров этого является 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. Междисциплинарность рассматриваемых в газофазном синтезе процессов порождает серьезные трудности при их изучении. При этом в рамках традиционного физического эксперимента не удастся получить хорошего результата, так как такой эксперимент: не является наглядным, не позволяет изучать зависимость конечного материала от различных физических параметров системы, занимает много времени, дорог. Поэтому естественно искать пути решения задач на базе математического моделирования, которое лежит в основе виртуального эксперимента. В основе работы — разработка и апробация технологий математического моделирования с использованием высокопроизводительных вычислений в области процессов газофазного синтеза наноразмерных структур и наноматериалов с целью изучения и обеспечения визуализации протекающих физико-химических процессов.

Ключевые слова: нанопромышленность, газофазный синтез наноматериалов, математическое моделирование, газовая динамика, физико-химические процессы.

Химическое осаждение из газовой фазы — получение твердых веществ с помощью химических реакций, реагенты подаются в реакционную зону в газообразном или плазменном состоянии [1]. Используют для получения текстурированных покрытий, монокристаллов, эпитаксиальных и монокристаллических пленок, нитевидных монокристаллов, порошков, барьерных слоев др. Выражение «химическое осаждение из газовой фазы» является наиболее точным переводом с английского языка термина *chemical vapor deposition* (общепринятая аббревиатура — CVD), который был впервые введен Blocher в 1966 году и с тех пор общепринят во всем мире.

Появление и бурное развитие микроэлектроники придало мощный импульс для разработки разнообразных CVD технологий. Этим методом получают тонкие пленки металлов, диэлектриков и полупроводников, выращивают монокристаллы и эпитаксиальные пленки. Особо следует подчеркнуть, что необходимость получения пленок заданного состава и с требуемым комплексом физических и химических слоев для применения в электронике обусловила проведение тщательных исследований физико-химических закономерностей процессов, что с неизбежностью привело к более глубокому пониманию сущности и механизмов CVD процессов.

К настоящему времени в мировой практике накоплен большой экспериментальный материал по результатам исследования разнообразных процессов химического осаждения из газовой фазы тонких пленок, нанопорошков, нановолокон, наностержней и наноструктур. Однако, несмотря на тот факт, что исследованию некоторых

¹Статья рекомендована к публикации программным комитетом международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии 2012»

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 многомаршрутностью химических реакций, присутствием нескольких гомогенных и гетерогенных стадий, а также многоступенчатостью превращений [2, 3]. Используя современные вычислительные технологии удается надежно описывать лишь процессы массо- и теплопереноса, что, в ряде случаев, позволяет успешно оптимизировать и разрабатывать конструкции реакционных камер, применяемых для реализации процессов ХОГФ [4]. Именно на основе таких расчетов, принимая во внимание экспериментально полученные сведения о кинетических закономерностях некоторых конкретных процессов ХОГФ, осуществляется проектирование промышленных реакторов в крупных международных корпорациях (Applied Materials, Samsung Electronics и др.).

Для успешного исследования и моделирования CVD систем необходимы строгие представления о схемах используемых на практике установок, технологических параметрах и их влиянии на условия синтеза, о химии, физике и физико-химии элементарных явлений, сопровождающих синтез, и характер их взаимодействии, иметь экспериментальные данные о процессах и возможности их управления [5]. Схематично CVD процесс может быть проиллюстрирован рис. 1. Моделирование CVD-процессов

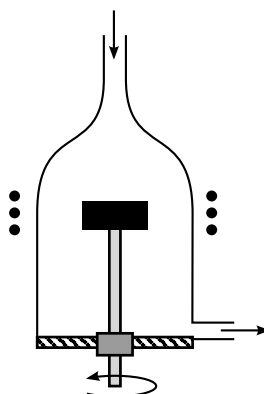


Рис. 1. Схематическое изображение CVD реактора

базируется на системе уравнений газовой динамики — уравнениях Навье — Стокса — записанной для многокомпонентной реагирующей среды [6]. Кроме того, требуется построение «подмоделей», описывающих химические реакции, турбулентность и теплообмен за счет излучения.

Задача усложняется требованиями расчета температуры и состава смеси, которые сводятся к решению уравнений для компонентов смеси и температуры. Последние остаются незамкнутыми, поскольку требуют определения величины средней скорости реакции. Таким образом, ее расчет является основной целью химической модели.

Поскольку современные программные комплексы позволяют решать весьма широкий круг междисциплинарных задач, для проведения численного моделирования был выбран программный комплекс ANSYS FLUENT [7]. В случае решения уравнения сохранения для химических веществ, этот комплекс получает значение локальной массовой доли каждого вещества Y_i через решение уравнения конвекции-диффузии

для i вещества. Запишем уравнение сохранения для i -компоненты в следующем общем виде:

$$\frac{\partial}{\partial t}(pY_i) + \nabla \cdot (p\vec{v}Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i, \quad (1)$$

где R_i является нетто-коэффициентом воспроизводства i -компоненты вещества в результате химической реакции, а S_i скорость воспроизводства от добавления из дисперсной фазы с учетом дополнительных источников, задаваемых пользователем. Уравнение такого вида должно решаться для $N - 1$ химического вещества, где N есть общее число химических компонент, представленных в газовой фазе. Поскольку сумма массовых долей всех компонент должна быть тождественно равна единице, то массовая доля N -ого компонента будет равна единице минус сумма массовых долей первых $N - 1$ веществ. Чтобы свести к минимуму численные ошибки, в согласии со стандартными подходами N -м веществом должен быть выбрана компонента с наибольшей массовой долей, например N_2 в случае, когда окислителем является воздух.

Отдельно остановимся на проблеме вычислений потока диффузии. В уравнении (1) есть поток диффузии компонента i , который возникает в результате появления градиентов концентраций. По умолчанию, комплекс ANSYS FLUENT использует так называемую «слабую» аппроксимацию, при которой поток диффузии можно записать в виде:

$$\vec{J}_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i, \quad (2)$$

где $D_{i,m}$ — коэффициент диффузии для i -й компоненты смеси. Подобное приближение не всегда может быть приемлемым, когда требуется моделирование полной многокомпонентной диффузии. В таких случаях, к системе может быть добавлено и решено уравнение Максвелла — Стефана.

Скорости реакции, которые появляются в качестве источников членов в уравнении (1), вычисляются по следующей модели: эффект турбулентных флуктуаций игнорируется, и скорость реакции определяется формулой Аррениуса [1]. В рамках данной ламинарной модели конечной скорости вычисляются химические источники в терминах выражения Аррениуса и игнорируются эффекты турбулентных флуктуаций. Модель является точной для ламинарных течений, но, как правило, неточна для турбулентных течений из-за высокой нелинейной химической кинетики Аррениуса. Ламинарная модель, однако, может быть приемлемым для процессов с относительно медленно протекающими реакциями и малыми турбулентными флуктуациями.

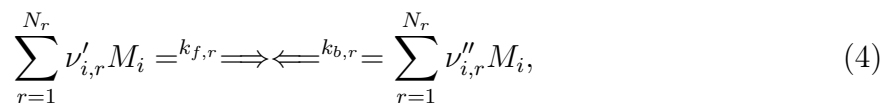
Чистый источник химического вещества i определяется как Аррениусовская сумма по N_R реакциям, в которую данное вещество входит:

$$R_i = M_{\omega,i} \sum_{r=1}^{N_r} \hat{R}_{i,r}, \quad (3)$$

где $M_{\omega,i}$ — это молекулярная масса вещества i , а $\hat{R}_{i,r}$ Аррениусовская молярная скорость притока / оттока вещества i в реакции r [12]. При этом, реакция может происходить:

- в непрерывной фазе;
- между веществами в непрерывной фазе;
- на поверхности стенки в результате осаждения;
- в результате развития данной фазы.

Рассмотрим некоторую реакцию r , записанную в общем виде:



где N — количество химических веществ в системе;

$\nu'_{i,r}$ — стехиометрический коэффициент для i реагента в реакции r ;

$\nu''_{i,r}$ — стехиометрический коэффициент для i продукта в реакции r ;

M — символ, обозначающий i вещество;

$k_{f,r}$ — константа скорости прямой реакции r ;

$k_{b,r}$ — константа скорости обратной реакции r .

Уравнение (4) справедливо как для обратимых, так и необратимых реакций, заметим, что по умолчанию реакции не являются обратимыми. Для необратимых реакций константа обратной скорости опускается.

Суммирование в уравнении (4) производится для всех химических веществ, участвующих в процессе. Но только вещества, которые появляются в качестве реагентов или продуктов будут иметь ненулевые стехиометрические коэффициенты. Таким образом, элементы, которые не участвуют в реакции, выпадают из уравнения.

Для необратимых реакций, молярная скорость притока / оттока материала i в реакции r (в уравнении (3)) дается следующей формулой:

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma(\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r})(k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta'_{i,r} - \eta''_{i,r}}), \quad (5)$$

где $C_{j,r}$ — молярная концентрация j -го элемента в реакции r (кмоль/м³),

$\eta'_{i,r}$ — экспонента скорости для j -го реагента в реакции r ,

$\eta''_{i,r}$ — экспонента скорости для j -го продукта в реакции r ,

Для обратимой реакции молярная скорость создания / уничтожения материала i в реакции r определяется:

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma(\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r})(k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta'_{i,r}} - k_{b,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{\eta''_{i,r}}), \quad (6)$$

Отметим, что показатель скорости для обратной части реакции в уравнении (5) всегда равен стехиометрическому коэффициенту вещества ($\nu'_{i,r}$). Величина учитывает влияние от присутствия третьих тел в реакции на ее скорость. Третьи тела — вещества, которые не являются реагентами в данной реакции, но влияют на ее протекание. Данный член определяется из следующего соотношения:

$$\Gamma = \sum_j^N \gamma_{j,r} C_j, \quad (7)$$

где $\gamma_{j,r}$ являются коэффициентами влияния третьего тела j -го элемента в r -ой реакции. По умолчанию, комплекс ANSYS FLUENT не включает эффекты влияния третьего тела в процессе расчета скоростей реакций. Можно, однако, принудительно включать в учет влияние третьих тел, когда имеются основания их учитывать.

Переходя к скорости прямой реакции r — величине $k_{f,r}$, укажем, что она вычисляется с использованием уравнения Аррениуса:

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_r/RT}, \quad (8)$$

где A_r — предэкспоненциальный множитель (размерная единица)

β_r — температурный показатель экспоненты (безразмерная величина)

E_r — энергия активации (Дж/кмоль)

R — универсальная газовая постоянная (Дж/кмоль·К)

Для корректной постановки задачи необходимо знать (или получить из базы данных) значения для $\nu'_{i,r}$, $\nu''_{i,r}$, $\eta'_{j,r}$, $\eta''_{j,r}$, β_r , A_r , E_r , $\gamma_{j,r}$. В том случае, если реакция обратима, константа скорости обратной реакции вычисляется через скорость прямой реакции по следующему соотношению [12]:

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{K_r}, \quad (9)$$

где K_r — константа равновесия r -ой реакции, вычисляемая по формуле:

$$K_r = e^{\left(\frac{\Delta S_r^0}{R} - \frac{\Delta H_r^0}{RT}\right)} \left(\frac{p_{atm}}{RT}\right)^{\sum_{i=1}^N (\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r})}. \quad (10)$$

В этой формуле величина p_{atm} обозначает атмосферное давление (101325 Па). Показатель степени (в круглых скобках) экспоненциальной функции представляет собой изменение свободной энергии Гиббса, и его компоненты рассчитываются следующим образом [7]:

$$\frac{\Delta S_r^0}{R} = \sum_{i=1}^N (\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r}) \frac{\Delta S_i^0}{R}, \quad (11)$$

$$\frac{\Delta H_r^0}{RT} = \sum_{i=1}^N (\nu''_{i,r} - \nu'_{i,r}) \frac{\Delta h_i^0}{RT}, \quad (12)$$

где величины S_i^0 и h_i^0 стандартные состояния энтропии и энтальпии (теплоты образования). Эти значения определяются в комплексе ANSYS FLUENT как свойства смеси материала. Свойства энтропии и энтальпии для использованных в работе материалов задавались в полиномиальном формате CHEMKIN [9] и были получены из термодинамического справочника [10].

Для моделирования процесса металлорганического химического осаждения из газовой фазы (МО ХОГФ) тонких пленок была выбрана система материалов GaAs в реакционном наборе. Выбор материалов обуславливается тем, что данные полупроводниковые материалы широко используются при получении наногетероструктур, на основе которых создается множество приборов (полевые транзисторы, лазеры, светодиоды и фотоприемники и др.). Приведенная реакционная система уравнений (11–12) отличается большим количеством реакций протекающих в объеме и на поверхности. Для каждой реакции должны быть указаны следующие (были взяты из общедоступных источников, таблица 1) значения параметров:

- предэкспоненциальный множитель (A),

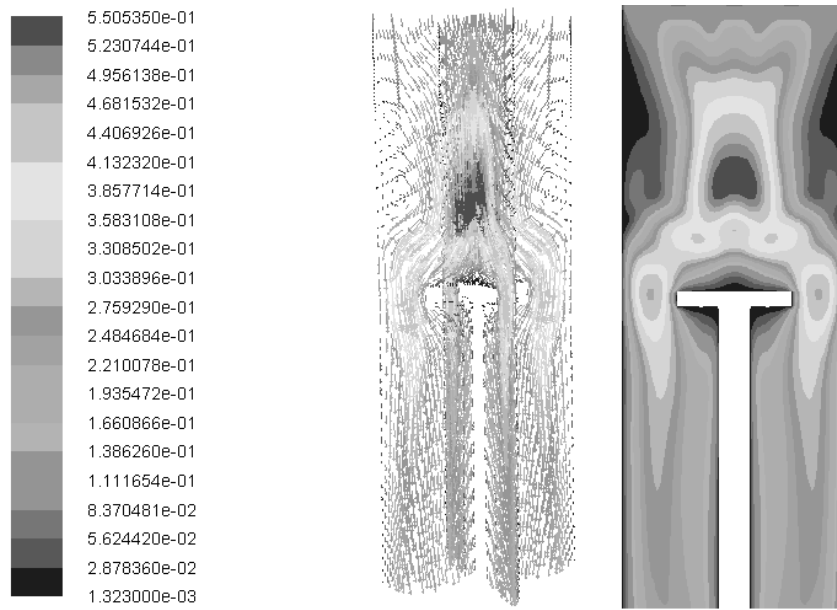
- показатель температуры (b),
- энергия активации (E) для скорости реакции в Аррениусовом виде (9)

Таблица 1

Параметры скоростей реакций

Объемные реакции	A	b	E
TMG => DMG + CH3	1.6E17	0	30057
DMG => MMG + CH3	2.5E15	0	17883
CH3 + H2 => CH4 + H	1.2E9	0	6300
ASH3 + CH3 = ASH2 + CH4	9.7E8	0	900
TMG + H = DMG + CH4	5.0E10	0	5051
DMG + H => MMG + CH4	5.0E10	0	5051
2H + M = H2 + M	1.0E13	0	0
2CH3 = C2H6	2.0E10	0	0
CH3 + H + M => CH4 + M	2.4E19	-1	0
TMG + CH3 => ADDUCT + CH4	2.0E8	0	5051
MMG => GA + CH3	1.0E16	0	39052
Поверхностные реакции	A	b	E
H + OPENAS(S) => H-AS(S)	4.95E9	0.5	0
H + OPENG(S) => H-G(S)	4.95E9	0.5	0
CH3 + OPENG(S) = CH3-G(S)	1.27E9	0.5	0
CH3 + OPENAS(S) = CH3-AS(S)	1.27E9	0.5	0
MMG + OPENAS(S) = MMG-AS(S)	5.37E8	0.5	0
DMG + OPENAS(S) => MMG-AS(S) + CH3	4.95E8	0.5	0
ASH + OPENG(S) = ASH(S)	5.68E8	0.5	0
ASH2 + OPENG(S) => ASH(S) + H	5.68E8	0.5	0
ASH3 + OPENG(S) => ASH(S) + H2	5.68E8	0.5	0
CH3 + H-AS(S) => CH4 + OPENAS(S)	1.26E8	0.5	0
CH3 + H-G(S) => CH4 + OPENG(S)	1.26E8	0.5	0
H + CH3-AS(S) => CH4 + OPENAS(S)	4.94E8	0.5	0
H + CH3-G(S) => CH4 + OPENG(S)	4.94E8	0.5	0
H-AS(S) + CH3-G(S) => CH4 + OPENAS(S) + OPENG(S)	1.0E16	0	5051
H-G(S) + CH3-AS(S) => CH4 + OPENAS(S) + OPENG(S)	1.0E16	0	5051
H-G(S) + H-AS(S) => H2 + OPENAS(S) + OPENG(S)	1.2E16	0	10102
CH3-G(S) + CH3-AS(S) => C2H6 + OPENAS(S) + OPENG(S)	1.0E16	0	10102
MMG-AS(S) + ASH(S) => CH4 + OPENG(S) + OPENAS(S) + GAAS(B)	5.0E17	0	14801
MMG-AS(S) + AS(S) => CH3 + OPENG(S) + OPENAS(S) + GAAS(B)	5.0E17	0	10103
2ASH(S) => AS2 + H2 + 2OPENG(S)	1.0E16	0	19681
CH3 + ASH(S) => AS(S) + CH4	1.28E8	0.5	10103
2AS(S) = AS2 + 2OPENG(S)	1.0E17	0	15155
TMG + OPENAS(S) => MMG-AS(S) + 2CH3	4.62E8	0.5	0
GA + OPENAS(S) = GA(S)	5.9E8	0.5	0
GA(S) + AS(S) => OPENAS(S) + OPENG(S) + GAAS(B)	1.1E9	0	505

В данной работе моделирование осаждения нанопленок осуществляются в реакторе вертикального типа с вращающимся диском (см. рис. 1). Все геометрические размеры реактора (высота, диаметр, высота расположения диска, способ подачи газов в реактор), а также физические (температуры стенок реактора и диска, рабочее давление в реакторе, скорость вращения подложки, расходы газов через входные отверстия) были выбраны в соответствии с данными приведенными в работе [8]. Такой выбор данных позволил обеспечить верификацию полученных результатов, которые представлены на рис. 2–4, с экспериментальными данными.



Velocity Vectors Colored By Velocity Magnitude (m/s)

Рис. 2. Скорость потока внутри реактора

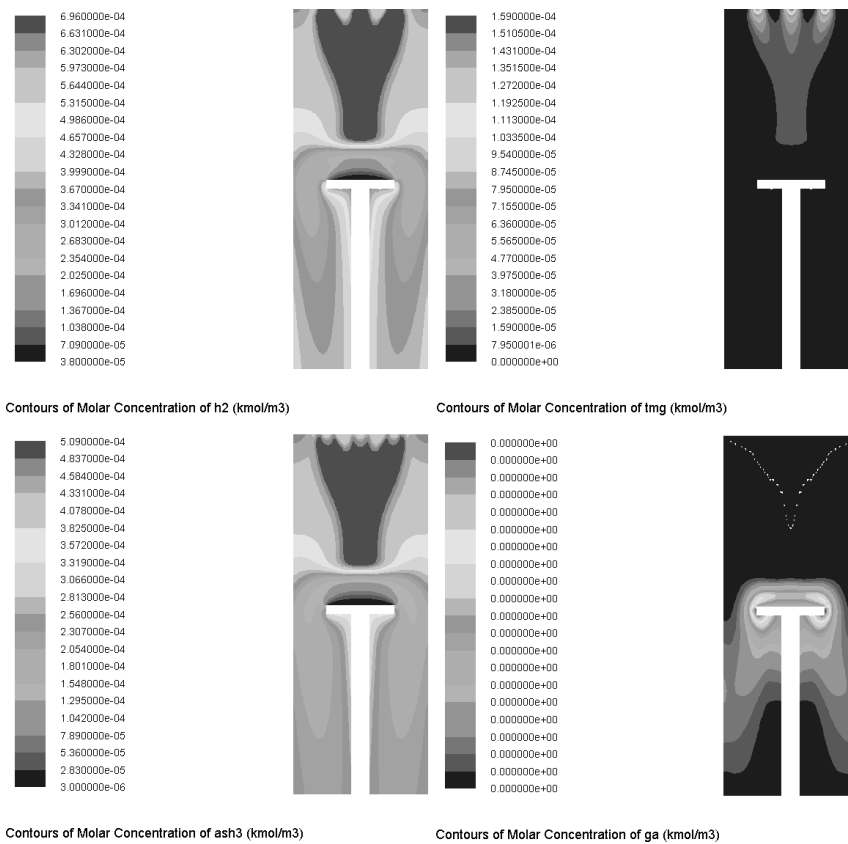


Рис. 3. Молярные концентрации компонент смеси

Задача решалась с применением программного комплекса Ansys Fluent 12.1 на вычислительном кластере СПбГПУ (64 узла: 2x AMD Opteron 280, 8Гб ОЗУ, 1В 4x SDR). В связи с относительно небольшим размером расчетной сетки задачи, для одного расчета использовался только один вычислительный узел. Для получения исчерпывающей информации о физических зависимостях протекающих в реакторе процессов требовалось проведение массовых расчетов. Для этого уже были задействовано до 16 узлов кластера. Всего было решено и исследовано более 1000 расчетных случаев.

Представляется, что главным достижением применяемых технологий математического моделирования является получение всего спектра физических значений (см. рис. 2, 3) реагирующего газового потока внутри реактора: компоненты скорости, давление, температура, концентрации как исходных, так и результирующих веществ-реагентов. Кроме того, основным результатом моделирования можно считать получение распределения скорости осаждения пленки по площади подложки, представленные на рис. 4, находящейся на вращающемся диске, на котором происходит осаждение.

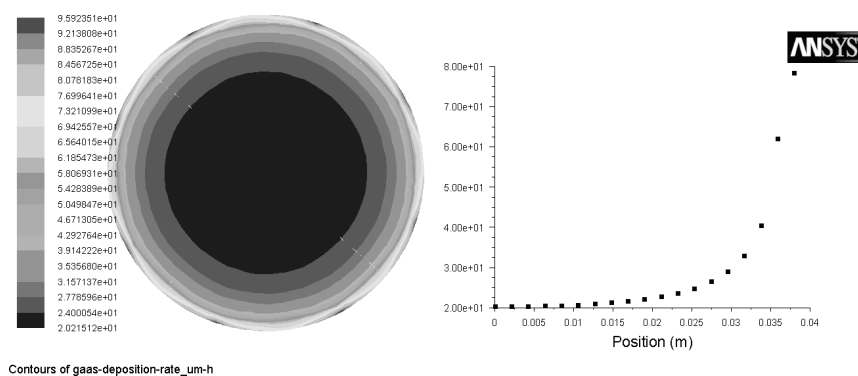


Рис. 4. Скорость осаждения арсенида галлия

Вместе с тем, несмотря на положительные результаты данного исследования, отсутствие детерминированных моделей, достоверно и однозначно описывающие физико-химические закономерности является существенной проблемой. Как уже отмечалось, данное обстоятельство обусловлено чрезвычайной сложностью механизма CVD процессов, характеризующихся многомаршрутностью химических реакций, присутствием нескольких гомогенных и гетерогенных стадий, а также многоступенчатостью превращений.

Согласованность результатов вычислений с опытным экспериментом демонстрирует рис. 5. Был выполнен ряд расчетов для вертикального реактора с варьируемыми параметрами: концентрацией триметилгаллия и температурой подложки. По полученным массивам данных построена зависимость скорости осаждения. Сравнение результатов расчета с экспериментом показывает полное качественное, а также достаточно хорошее количественное совпадение полученных зависимостей. Что является, несомненно, лучшим подтверждением адекватности выбранных моделей при решении задач химического осаждения тонких пленок из газовой фазы.

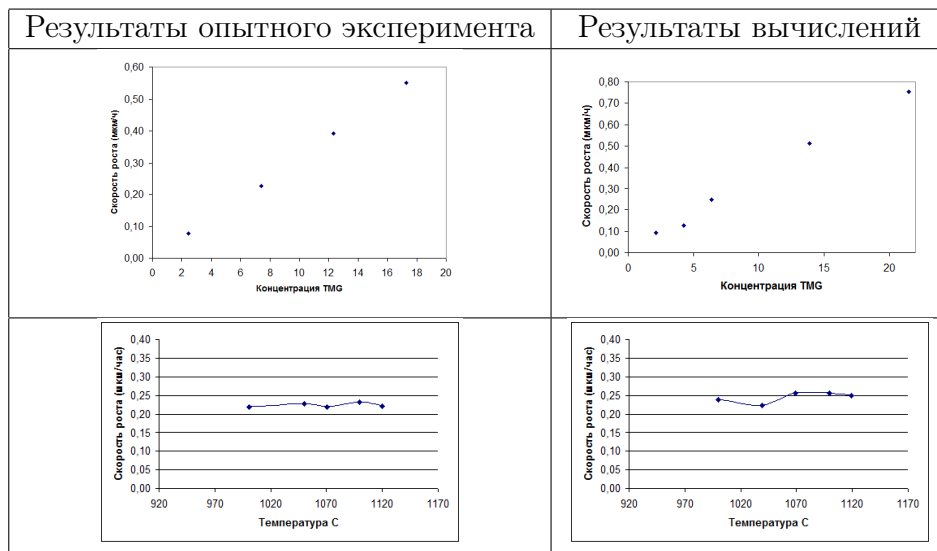


Рис. 5. Сравнение результатов вычислений с экспериментом

Заключение

По результатам исследования можно утверждать, что выбранные модели физико-химических процессов адекватно описывают реагирующее течение газовой среды и тех инструментов, на основе которых реализуется синтез наноразмерных структур и наноматериалов (подложки). Результаты моделирования осаждения GaAs легко согласуются с экспериментальными данными [8] как количественно, так и качественно.

Использование высокопроизводительных вычислительных технологий позволило расширить круг решаемых задач в области нанотехнологий путем математического моделирования различного технологических инструментов (оборудования) (установки химического осаждения из газовой фазы), технологических параметров (температуры подложки, рабочего давления и др.), а также различных материалов (пленки, порошки и др.).

Использование технологий математического моделирования на базе – высокопроизводительных вычислений позволяет получать информацию о процессе ХОГФ и полученном продукте за достаточно короткое время (в пределах несколько лабораторных работ) и не требует применения дорогостоящего оборудования, которое отсутствует в большинстве учебных заведениях. При этом отметим, что весьма важную роль в образовательном процессе с использованием виртуальных лабораторных практикумов играют технологии удаленного доступа к среде моделирования [11].

Статья подготовлена в рамках выполнения государственного контракта с Министерством образования и науки № 16.647.12.2020 от 25 ноября 2010 г.

Литература

1. Jones, A.C. Chemical Vapour Deposition. Precursors, Processes and Application / A.C. Jones, M.L. Hitchman. – London: RSC Publishing, 2009. – 582 с.
2. Протопопова, В.С. Химическое осаждение из газовой фазы слоев Ni из бис-(этилциклопентадиенил) никеля / В.С. Протопопова, С.Е. Александров // Научно-технические ведомости СПбГПУ, серия «Физико-математические науки»,

- № 126. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2011. – с. 145–150.
3. Уваров, А.А. Химическое осаждение из газовой фазы диэлектрических пленок политетрафторэтилена / А.А. Уваров, С.Е. Александров. // Научно-технические ведомости СПбГПУ, серия «Физико-математические науки», № 126. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2011. – с. 141–145.
 4. Александров, С.Е. Технология материалов электронной техники. Процессы химического осаждения из газовой фазы: учеб. пособие. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2005. – 92 с.
 5. Hitchman, M.L. Chemical Vapor Deposition, Principals and Application / M.L. Hitchman, K.F. Jencen – London: Academic Press, 1993. – 678 p.
 6. Лойцянский, Л.Г. Механика жидкости и газа: учеб. для вузов. / Л.Г. Лойцянский. Изд. 6-е, перераб. и доп. – М.: Наука, 1987. – 600 с.
 7. FLUENT 6.3 User's Guide
URL: http://hpce.iitm.ac.in/website/Manuals/Fluent_6.3/ (дата обращения: 12.03.2012)
 8. Mazumder, S. The Importance of Predicting Rate-limited Growth for Accurate Modeling of Commercial MOCVD Reactors / S. Mazumder, S. Lowry // J. Crystal Growth, 2001. – Vol. 224. № 1–2. – P. 165–174
 9. CHEMKIN/CHEMKIN-PRO Input Manual (August 2010)
 10. Chase, M.W. NIST-JANAF Thermochemical Tables, 4th Edition. Monograph No. 9 / M.W. Chase – National Institute of Standards and Technology, 1998. – 1952 p.
 11. Иванов, Д.И. Визуализация результатов моделирования процессов газофазного синтеза наноразмерных структур при сетевом доступе к кластерному вычислителю / Д.И. Иванов, Н.В. Захаревич, И.А. Цикин. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, Научно-технические ведомости СПбГУ (в печати).
 12. Laidler, K.J. Chemical Kinetics, Third Edition. / K.J. Laidler – Benjamin-Cummings, 1997.

Юрий Яковлевич Болдырев, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой Математического и программного обеспечения высокопроизводительных вычислений, директор Отделения вычислительных ресурсов Информационно-телекоммуникационного комплекса, Санкт-Петербургский государственный политехнический университет. e-mail: boldyrev@phmf.spbstu.ru

Кирилл Юрьевич Замотин, начальник отдела прикладных программных систем Информационно-телекоммуникационного комплекса, Санкт-Петербургский государственный политехнический университет.

Евгений Павлович Петухов, начальник отдела системного программного обеспечения Информационно-телекоммуникационного комплекса, Санкт-Петербургский государственный политехнический университет.

MODELING OF CHEMICAL VAPOR DEPOSITION FOR GROWTH OF THIN FILMS

Y. Boldyrev, Saint Petersburg State Polytechnical University (Saint Petersburg, Russian Federation),

K. Zamotin, Saint Petersburg State Polytechnical University (Saint Petersburg, Russian Federation),

E. Petukhov, Saint Petersburg State Polytechnical University (Saint Petersburg, Russian Federation)

Most of the tasks that are associated with many aspects of nanotechnology development are essentially interdisciplinary by its nature. One of the most striking example is the use of gas-phase synthesis problems in nanotechnology. In essence, these technologies are the realization of the processes of the solid state chemical deposition from gaseous substance supplied to the reaction zone.

A classic experiment in the learning process has shown its weakness: not clear; does not allow to study the dependence of the final material characteristics from the different physical parameters of the system; time consuming and expensive. By these reasons experiment was replaced by a virtual experiment i.e. simulation.

At the base of the work lies the development and testing of mathematical models using high-performance computing in the processes of gas-phase synthesis of nanostructures and nanomaterials in order to study and provide visualization of proceeding physical and chemical processes.

Keywords: nanotechnology industry, gas-phase synthesis nanomaterials, simulation, gas dynamics, physical and chemical processes.

References

1. Jones A.C., Hitchman M.L. Chemical Vapour Deposition. Precursors, Processes and Application. London: RSC Publishing, 2009. 582 p.
2. Protopova V.S., Alexandrov S.E. Himicheskoe osazhdenie iz gazovoj fazy sloev Ni iz bis-(jetilciklopentadienil) nikelja [Chemical Deposition of Ni-layers from Gas Phase]. SPb.: Izd-vo Politehn. un-ta. Nauchno-Tehnicheskie vedomosti SPbGPU, seria "Fiziko-matematicheskie nauki" [Scientific and Technical Bulletin of SPbSTU: Physics and Mathematics], No. 126, 2011. P. 145–150.
3. Uvarov A.A., Aleksandrov S.E. Himicheskoe osazhdenie iz gazovoj fazy dijelektricheskikh plenok politetraftorjetilena [Chemical Deposition of Dielectric Films of Polytetrafluoroethylene from Gas Phase]. Nauchno-Tehnicheskie vedomosti SPbGPU, seria "Fiziko-matematicheskie nauki" [Scientific and Technical Bulletin of SPbSTU: Physics and Mathematics], No. 126, 2011. P. 141–145.
4. Aleksandrov S.E. Tehnologija materialov jelektronnoj tehniki. Processy himicheskogo osazhdenija iz gazovoj fazy: Ucheb. posobie [Electronic Material Technology. Processes of Chemical Deposition from Gas Phase: Tutorial]. SPb.: Izd-vo Politehn. un-ta, 2005. 92 p.
5. Hitchman M.L., Jencen K.F. Chemical Vapor Deposition, Principals and Application. London: Academic Press, 1993. 678 p.

6. Loicansky L.G. Mekhanika zhidkosti i gaza [Mechanics of Fluids and Gases]. Moscow, Nauka, 1987. 600 p.
7. FLUENT 6.3 User's Guide
URL: http://hpce.iitm.ac.in/website/Manuals/Fluent_6.3/
8. Mazumder S., Lowry S. The Importance of Predicting Rate-limited Growth for Accurate Modeling of Commercial MOCVD Reactors. J. Crystal Growth, 2001. Vol. 224. № 1–2. P. 165–174
9. CHEMKIN/CHEMKIN-PRO Input Manual (August 2010)
10. NIST-JANAF Thermochemical Tables, 4th Edition, M. Chase Monograph No. 9: 1998, 1952 pages, 2 volumes, hardcover, ISBN 1-56396-831-2
11. Ivanov D.I., Zaharevich N.V., Cikin I.A. Vizualizacija rezul'tatov modelirovanija processov gazofaznogo sinteza nanorazmernih struktur pri setevom dostupe k klasternomu vychislitelju SPb.: Izd-vo Politehn. un-ta Nauchno-Tehnicheskie vedomosti SPbGPU, seria "Fiziko-matematicheskie nauki" (v pechati) [Scientific and Technical Bulletin of SPbSTU: Physics and Mathematics (pending)].
12. Laidler K.J. Chemical Kinetics, Third Edition. Benjamin-Cummings, 1997.

Поступила в редакцию 2 апреля 2012 г.