

# ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ И НАНОТЕХНОЛОГИИ НА ПРИМЕРЕ ЗАДАЧ ГАЗОФАЗНОГО СИНТЕЗА

С.Е. Александров, Ю.Я. Болдырев, Ф.Ф. Греков, К.Ю. Замотин, Е.П. Петухов, В.С. Протопопова

Технологии математического моделирования в течение прошедшего 20 века превратились в универсальный инструмент, который сегодня позволяет решать такие классы задач, физико-математическое описание которых были немыслимы 20-30 лет тому назад. При этом подобные постановки задач все более и более близки к описанию тех проблем, которые связаны с описанием окружающего нас реального физического мира, мира природы и всего того, что создано человеком. Подавляющее большинство процессов и явлений, происходящих вокруг нас, по своему существу междисциплинарны, 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.

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 или плазменного состояния, подаваемого в реакционную зону, в твердое состояние. В международной научно – технической общепринятым является термин CVD (chemical vapor deposition) - «химическое осаждение из газовой фазы».

История развития CVD-процессов является весьма длительной и берет свое начало с 1880 года, когда впервые был получен патент на CVD способ нанесения углеродных слоев. В дальнейшем (1896-1897 гг.) был запатентован метод осаждения металлических покрытий на нити накаливания электрических ламп. CVD технологии активно развивались в течение всего 20 века, но особенно бурно они стали совершенствоваться в связи со становлением микроэлектроники. Получение тонких пленок металлов, полупроводников и диэлектриков, выращивание нанотрубок и производство нанопорошков - это часть из тех направлений наиболее передовых технологий, где CVD-процессы являются ключевыми.

Выше было указано, что CVD-процессы относятся к классу междисциплинарных проблем, но само существо этой «междисциплинарности» требует углубленного изучения, поскольку для очень многих задач в области химического осаждения из газовой фазы проблемными являются корректные качественные и количественные описания физико – химических процессов проходящих в реакционной зоне. В частности, требует углубленного изучения вся гамма проблем, описывающих процессы, как в CVD – реакторах в целом, так и в упомянутых тонких реакционных зонах. В последних, это касается, в первую очередь, описания всего множества химических реакций, на протекание которых самым существенным образом влияет вся совокупность физических условий в зоне реакции, то есть полей скоростей и давлений, плотностей и температур газовой фазы или плазмы.

Для определения всей совокупности названных физических величин в реакционной зоне нам требуется решить задачу о течении газовой фазы во всей области CVD-реактора, что представляет собой характерную задачу газовой динамики или задачу о движении плазмы. И здесь важнейшим обстоятельством являются те или иные требования точности в определении полей физических величин. Иногда нам достаточно иметь удовлетворительные качественные характеристики, протекающих в реакционной зоне CVD-процессов, а в других случаях требуется более высокая точность результатов. В рамках существа проекта, послужившего импульсом к данным исследованиям, для его разработчиков было достаточно получения хороших качественных результатов вычислений, которые вместе с тем должны быть получены за достаточно небольшое время (несколько минут). При этом была необходима возможность решения серии задач, например, при неизменной расчётной области варьируются граничные условия. По этим причинам при использовании кластерных вычислителей для одной задачи задействовались ресурсы не более чем одного вычислительного восьмиядерного узла. Это позволило распределить вычислительные ресурсы таким образом, чтобы сервисом одновременно могли воспользоваться как студенты на практических занятиях в СПбГПУ, так и индивидуальные исследователи. Вместе с тем, с целью проведения углубленных исследований проблемы были проведены и более масштабные вычисления, результаты которых приведены в докладе.