

УДК 53.03

**Использование клеточных автоматов для моделирования процесса образования нитевидных нанокристаллов в областях селективного травления**

М.А. Тамошкин<sup>1</sup>, М.А. Шипуля<sup>2</sup>, Ю.Ю. Эрвье<sup>3</sup>

Научный руководитель: к.ф.-м.н. М.А. Шипуля<sup>2</sup>

Научный консультант: д.ф.-м.н. Ю.Ю. Эрвье<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

<sup>2</sup>Томский университет систем управления и радиоэлектроники  
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 40, 634050

<sup>3</sup>Национальный исследовательский Томский государственный университет  
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: [ervye@mail.tsu.ru](mailto:ervye@mail.tsu.ru), [mat48@tpu.ru](mailto:mat48@tpu.ru), [sma@main.tusur.ru](mailto:sma@main.tusur.ru)

**Cellular automata using for modeling the formation of nanowires in the media of selective etching**

M.A. Tamoshkin<sup>1</sup>, M.A. Shipulya<sup>2</sup>, Yu.Yu. Hervieu<sup>3</sup>

Scientific supervisor: Ph.D. M.A. Shipulya<sup>2</sup>

Scientific consultant: Dr. Yu.Yu. Hervieu<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

<sup>2</sup>Tomsk University of Control Systems and Radio Electronics, Russia, Tomsk, Lenin str., 40, 634050

<sup>3</sup>Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: [ervye@mail.tsu.ru](mailto:ervye@mail.tsu.ru), [mat48@tpu.ru](mailto:mat48@tpu.ru), [sma@main.tusur.ru](mailto:sma@main.tusur.ru)

**Abstract.** The paper considers an example of the application of the theory of cellular automata to simulate the formation of nanowires in the media of selective etching.

**Key words:** cellular automata, nanowires, chemical vapor deposition.

**Введение**

Под термином нитевидный нанокристалл (ННК) обычно принято понимать существенно одномерную структуру, имеющую характерные размеры порядка нанометров и одно выделенное направление [1]. Процесс образования таких структур при использовании метода осаждения из газовой фазы (CVD) связан с хаотичным движением частиц осаждаемого материала по поверхности подложки, на которой выращиваются ННК. Так, в работе [2] подробно описаны физические процессы, происходящие во время зарождения ННК, рассмотрено влияние различных технологических факторов на изменение формы кристаллов в ансамбле. В случае, когда поверхность подложки разбита на отдельные участки, образованные, например, при помощи метода селективного травления (EM), для моделирования процесса становится целесообразным применять так называемые клеточные автоматы (CA) [3-5].

**Результаты**

Возможно считать, что при использовании метода (CVD) осаждаемые из газовой фазы атомы совершают хаотическое броуновское движение внутри некоторой области  $A$  рассматриваемой поверхности подложки, ограниченной с одной стороны  $\partial A$  внешней границей капли катализатора, и с другой стороны  $\bar{\partial A}$  – внутренней границей, определяемой условиями процесса селективного травления. Граница капли катализатора в условиях однородности подложки представляет собой окружность радиуса  $r$  с центром, совпадающим с центром фигуры, определяющей внешнюю границу области. В простейшем случае такая область может представлять собой правильный многоугольник. Атомы, диффундирующие

по подложке, не выходя за внешнюю границу области и остаются на подложке до тех пор, пока не попадают внутрь капли катализатора. В этом случае они удаляются с подложки и вносят вклад в рост ННК. Данный процесс возможно описать упрощенно при помощи уравнения диффузии для плотности распределения диффундирующих атомов  $\varphi(x, y, t)$  с соответствующими граничными и начальным условиями:

$$\left[ \frac{\partial}{\partial t} + \kappa \nabla^2 \right] \varphi(x, y, t) = 0, \quad (1)$$

$$\varphi(x, y, 0) = \varphi_0,$$

$$\varphi((x, y) \in \partial A) = \varphi((x, y) \in \partial \bar{A}) = 0$$

Здесь  $\kappa$  – постоянный коэффициент диффузии, характеризующий скорость движения диффундирующих атомов по подложке. В качестве границ области, определяющей возможные перемещения атомов, выбраны, соответственно, квадрат со стороной  $a = 1$  для  $\partial A$ , и окружность с диаметром  $d$ , равным половине стороны квадрата  $\partial \bar{A}$ . Аналитическое выражение для  $\varphi(x, y, t)$  представляется достаточно громоздким. Численное значение плотности, соответствующей решению (1) для различных значений времени представлено на рисунке 1. Как легко видеть, в силу симметричности указанных граничных условий рассматриваемой задачи, в зависимости от переменной  $t$  находится только максимальное значение  $MAX[\varphi(x, y, t)] = \varphi_0$ .

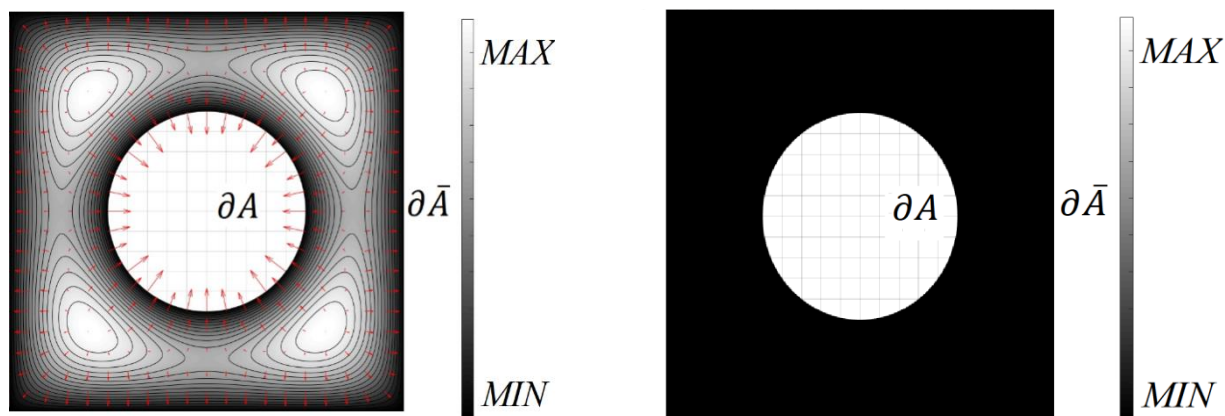


Рис. 1. Численное решение уравнения диффузии внутри области, ограниченной кривыми  $\partial A$  и  $\partial \bar{A}$  в начальный (слева) и конечный (справа) моменты времени

Зависимость максимального значения плотности диффундирующих внутри рассматриваемой области атомов от времени  $t$  легко получить применяя для моделирования описанного процесса клеточные автоматы с окрестностью Мура [4] и равновероятными переходами между его состояниями. В частности, на рисунке 2 представлены относительные значения количества диффундирующих атомов, не попавших в область капли катализатора, в зависимости от числа шагов машины клеточного автомата для различных значений радиуса границы  $\partial A$  и начального значения  $MAX[\varphi(x, y, t)]$ .

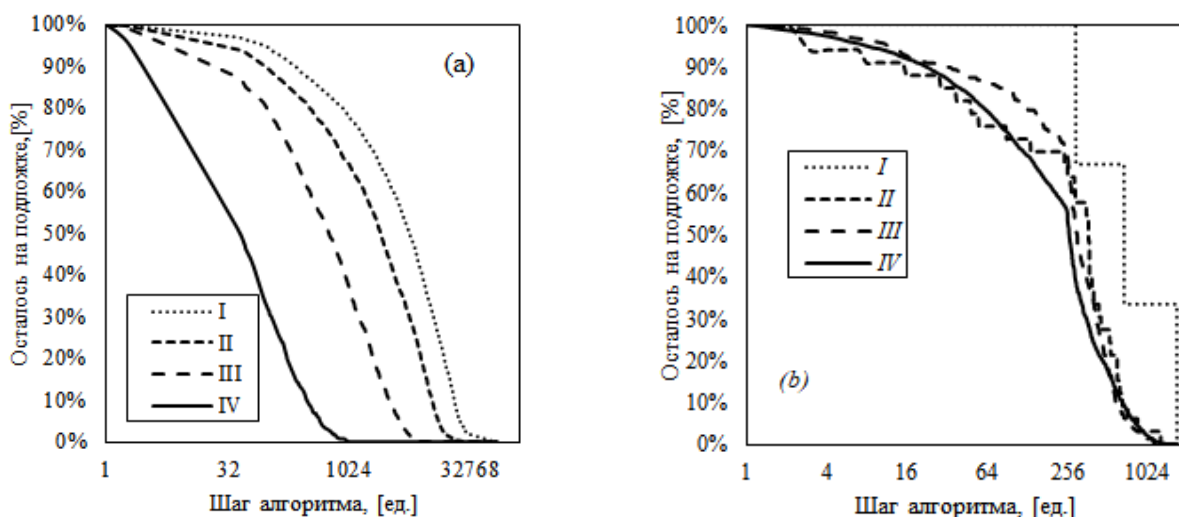


Рис. 2. Среднее значение количества атомов, содержащихся внутри области селективного травления в зависимости от числа шагов алгоритм

a)  $j = 0.3$ : I.  $\chi = 3$ , II.  $\chi = 2$ , III.  $\chi = 1$ , IV.  $\chi = 0$   
 b)  $\chi = 1$ : I.  $j = 3$ , II.  $j = 2$ , III.  $j = 1$ , IV.  $j = 0$

Легко понять, что число шагов машины клеточного автомата соответствует времени протекания процесса диффузии в рассматриваемой системе. Скорость процесса диффузии определяется коэффициентом  $k$ , от которого, очевидно, зависит длина свободного пробега атомов по подложке. Данная величина также зависит и от отношения площадей областей, соответствующих границам  $\partial A$  и  $\partial \bar{A}$ . Вместе с тем, длина свободного пробега зависит и от числа частиц  $n$ , находящихся в этот момент внутри области между указанными границами, т.е. от плотности заполнения клеток машины размерности  $N$  в рассматриваемый момент времени. Данное соотношение, в свою очередь, определяется при помощи величины  $j = -\lg(n/N)$ , где  $N$  – количество клеток автомата, ассоциируемое с числом атомов подложки в рассматриваемой области. Из рисунка 2 легко видеть, что как в первом, так и во втором случаях количество атомов, не попавших в каплю катализатора, зависит от времени экспоненциальным образом.

### Заключение

В работе показано, что процесс диффузии атомов осаждаемого вещества на подложке в ограниченной области возможно описать при помощи машины клеточного автомата с окрестностью Мура. Легко видеть, что в данном случае зависимость концентрации осаждаемого вещества, оставшегося на подложке и не попавшего в каплю катализатора, имеет явно экспоненциальный вид.

### Список литературы

1. Wagner R. S., Ellis, W. C. Vapor-liquid-solid mechanism of single crystal growth // Applied Physics Letters. – 1964. – V. 4. – p. 89.
2. Sabelfeld K. K., Kaganer V.M., Limbach F., Dogan P., Brandt O., Geelhaar L., Riechert H. Height self equilibration during the growth of dense nanowire ensembles: order emerging from disorder // Applied Physics Letters. – 2013. – V. 103. – P. 181–189.
3. John von Neumann. Theory of self-reproducing automata – URSS. 2010. – 384 с.
4. Тоффоли Т. Машины клеточных автоматов – М.: Мир, 1991. – 283 с.
5. Аладьев В.З., Ваганов В.А., Шишаков М.Л. Базовые элементы теории клеточных автоматов. – USA: Lulu Press, 2019. – 418 с.