

УДК 519.713.8

**Сравнение решений уравнения поверхностной диффузии при помощи
конечно-разностной схемы и методов теории клеточных автоматов**

М.А. Тамошкин¹, М.А. Шипуля², Ю.Ю. Эрвье³

Научный руководитель: к.ф.-м.н. М.А. Шипуля³,

Научный консультант: д.ф.-м.н. Ю.Ю. Эрвье³

¹Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

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

³Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: ervye@mail.tsu.ru

**Comparison of solutions of the diffusion equation using a finite-difference scheme
and methods of the theory of cellular automata**

M.A. Tamoshkin¹, M.A. Shipulya², Yu.Yu. Hervieu³

Scientific Supervisor: Ph.D. M.A. Shipulya²,

Scientific Consultant: Dr. Yu.Yu. Hervieu³

¹Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

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

³Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: ervye@mail.tsu.ru

Abstract. *The paper presents the results of a comparison of calculations for solving the diffusion equation using the classical finite difference scheme and methods of the theory of cellular automata.*

Key words: *cellular automata, nanowires, finite difference scheme.*

Введение

Диффузия атомов, адсорбированных на кристаллических поверхностях, играет важную роль в процессах катализа, роста кристаллов и формирования различных наноструктур. В частности, диффузионно-индуцированный механизм роста нитевидных нанокристаллов (ННК) является основным при выращивании ННК с использованием МОС-гидридной и молекулярно-пучковой эпитаксии [1]. В настоящей работе рассматривается начальная стадия роста ННК в пределах прямоугольных участков, создаваемых с помощью селективного травления (метод селективной эпитаксии [2]). В данном случае, отсутствие цилиндрической симметрии затрудняет аналитическое решение соответствующей краевой задачи поверхностной диффузии и необходимо использовать численные методы. В работе обсуждается эффективность применения метода клеточных автоматов [3–5] в сравнении с классической конечно-разностной схемой решения уравнения параболического типа с соответствующими начальными и граничными условиями.

Результаты

При использовании метода селективной эпитаксии осаждаемые из газовой фазы или молекулярного пучка атомы совершают случайное блуждание в пределах определенной области на поверхности подложки. Эта область ограничена с одной стороны, внешней границей ∂d капли катализатора, а с другой – внутренней границей ∂S , задаваемой условиями селективного травления. Будем полагать, что граница капли катализатора представляет собой окружность радиуса r_0 с центром в точке (x_0, y_0) , совпадающим с центром фигуры, определяющей внешнюю границу области. В простейшем случае такая область может иметь

форму правильного многоугольника. Атомы, диффундирующие по подложке, не покидают пределов внешней границы и остаются на поверхности до тех пор, пока не попадают внутрь капли катализатора. В этот момент они удаляются с подложки и участвуют в процессе роста ННК. Упрощенное описание данного процесса может быть представлено с помощью уравнения диффузии для плотности распределения атомов $u(x, y, t)$ с соответствующими граничными и начальными условиями:

$$\partial_t u(x, y, t) = D \Delta u(x, y, t), \quad (1)$$

$$u(x, y, 0) = u_0, \quad \langle \vec{n}(x, y), \vec{\nabla} u(x, y) \rangle|_{(x, y) \in \partial S} = u(x, y, t)|_{(x, y) \in \partial d} = 0 \quad (2)$$

Здесь $\vec{n}(x, y)$ – вектор, направленный по нормали к границе ∂S , D – постоянный коэффициент диффузии, характеризующий скорость движения диффундирующих атомов по подложке. В качестве границ области, определяющей возможные перемещения атомов, выбраны, соответственно, квадрат со стороной $2R$ для ∂S , и окружность с диаметром $2r_0$ для ∂d . Численное значение плотности, полученное в результате применения классической конечно-разностной схемы решения уравнения параболического типа (1) с соответствующими начальным и граничными условиями (2), для различных значений времени представлено на рис. 1.

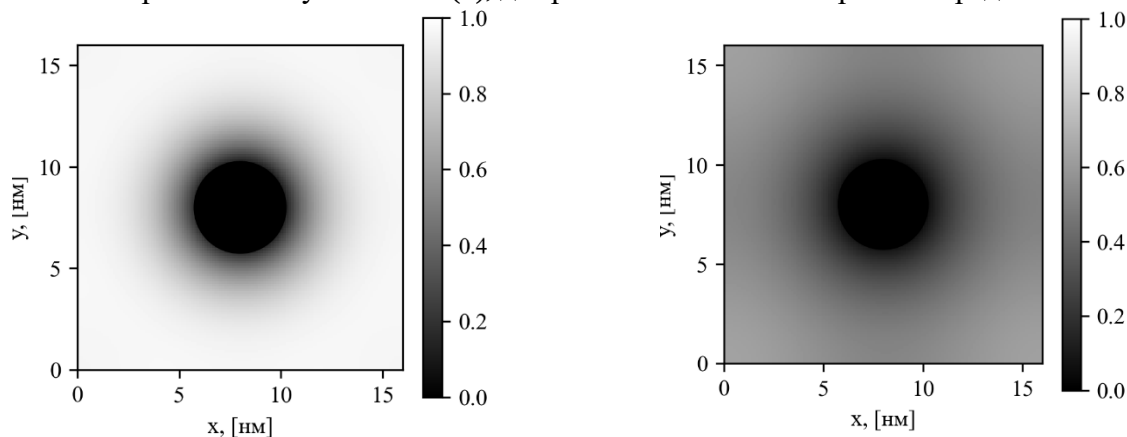


Рис. 1. Численное решение уравнения диффузии внутри области, ограниченной кривыми ∂d и ∂S в процессе диффузии (слева) и через 2^3 шагов алгоритма (справа)

Зависимость максимального значения плотности диффундирующих внутри рассматриваемой области атомов от времени t возможно также получить и применяя для моделирования описанного процесса модель клеточных автоматов с окрестностью Мура [4] при равновероятном переходе между их состояниями. В частности, на рис. 2 представлено сравнение относительных значений количества диффундирующих атомов, не попавших в область капли катализатора на подложке размером 32×32 нм для различных значений радиуса границы ∂d (рис. 2, а) и начального значения u_0 (рис. 2, б). Пунктирные линии на рисунке соответствуют численным решениям (1), сплошные линии – результат работы машин клеточных автоматов. По оси ординат графиков на рис. 2 представлено отношение $u(t)/u_0$, где $u(t)$ – текущее среднее по всей области подложки вне капли катализатора значение концентрации атомов, а u_0 – максимальное значение, данной величины, заданное в начальный момент времени. Ось абсцисс на графиках рис. 2 соответствует количеству циклов численного решения (1) в конечно-разностной схеме, или числу шагов машины в случае клеточных автоматов. Данную величину, для наглядности, удобно представлять в логарифмическом масштабе. Как легко понять, эта величина прямо пропорциональна времени протекания процесса диффузии в рассматриваемой системе. При этом, скорость процесса диффузии определяется коэффициентом D , от которого, очевидно, также зависит и диффузионная длина атомов на подложке до присоединения к капле.

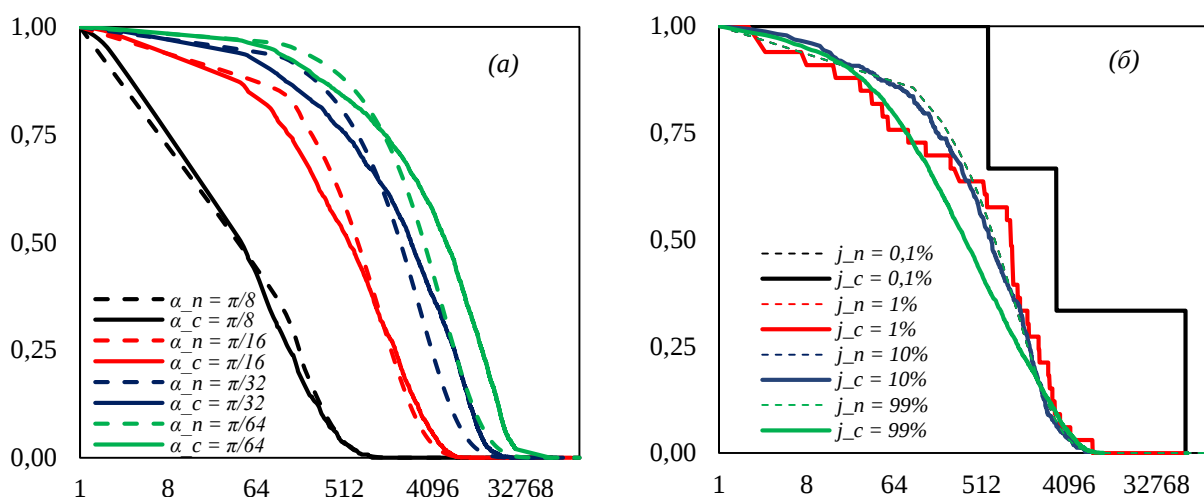


Рис. 2. Среднее относительное значение количества атомов, содержащихся внутри области селективного травления в зависимости от числа шагов алгоритмов: для различных u_0 при $j = 50\%$ (а); для различных u_0 при $\alpha = \pi/8$ (б)

Время протекания процесса диффузии, очевидно, зависит от начальной концентрации частиц u_0 (рис. 2, б), находящихся внутри области между указанными границами, т.е. от плотности заполнения клеток n машины автоматов размерности N в каждый рассматриваемый момент времени. Данное соотношение определяется при помощи величины $j = -\lg_2(n/N)$, где количество клеток автомата ассоциируется с числом атомов на подложке в рассматриваемой области. Кроме того, время протекания рассматриваемого процесса зависит также и от отношения площадей областей, соответствующих границам рассматриваемой области (рис. 2, а), которое удобно характеризовать при помощи безразмерного коэффициента $\alpha = (\pi r_0/4R)$. Как легко видеть, графики, полученные при помощи численного решения дифференциального уравнения (1, 2) и при помощи моделирования работы клеточных автоматов, демонстрируют схожие тенденции.

Заключение

Таким образом, в работе показано, что решение уравнения, описывающего процесс свободной диффузии атомов ростового вещества на начальной стадии образования ННК при осаждении из газовой фазы на подложку в ограниченной области, может быть получено как при помощи классической конечно-разностной схемы для уравнения второго порядка в частных производных параболического типа с соответствующими граничными и начальными условиями, так и при помощи машины клеточных автоматов с окрестностью Мура, вероятность перехода между состояниями которых не изменяется в ходе всего рассматриваемого процесса.

Список литературы

1. Dubrovskii V.G. Nucleation theory and growth of nanostructures. – Springer: Heidelberg – New York – Dordrecht – London, 2014. – 601 p.
2. Yuan, X., Pan, D., Zhou, Y., Zhang, X., Peng, K., Zhao, B., Deng, M., He, J., Tan, H.H., Jagadish, C. Selective area epitaxy of III–V nanostructure arrays and networks: Growth, applications, and future directions // Applied Physics Review. – 2006. – V. 8, № 2. – P. 021302.
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.