

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ ДИФФУЗИИ МЕТОДОМ ВЕРОЯТНОСТНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

Любчиков. М.А.

Научный руководитель – к.т.н., доцент Саноян А.Г.

Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика
С.П. Королева

Развитие технических возможностей в области микротехнологий вынуждает находить все более точные методы исследований процессов, происходящих с веществом на молекулярном, атомном и субатомном уровнях. Актуальны процессы диффузии вещества в деталях, однослойных микросхемах и т.д.

Пользоваться традиционными методами моделирования – однородными дифференциальными уравнениями (ОДУ) – довольно сложно.

Существует более универсальный метод – метод вероятностных клеточных автоматов (ВКА). Отличаются ВКА от ОДУ простотой в своей основе, возможностью создания виртуального эксперимента, “естественным” учетом флуктуаций и внутренних шумов системы.

Метод ВКА состоит из набора объектов (ячеек) образующих регулярную решетку. Состояние каждой определяется набором целочисленных переменных, характеризующих состояние фундаментальных компонентов (ячейки, клетки) системы, принимающие конечное число значений в дискретные промежутки времени. Дискретность метода и переменных позволяет рассматривать большой класс разрывных недифференцируемых функций. Для метода ВКА достаточно знать законы развития системы на микроуровне в небольших пространственных областях (ячейках), из которых состоит макросистема.

Для компьютерного моделирования двумерной поверхностной диффузии методом ВКА разработан программный продукт.

Проведенные опыты показали очень схожие результаты с данными вычислений методами ОДУ.

Программа выполняется шагами. Сначала на полигоне появляется объект до начала реакции. Далее вводим его физико-химические свойства, определяем общее количество частиц и вакантных мест. Каждый шаг является попыткой поверхностных атомов выйти из потенциальной ямы. После выполнения нескольких шагов можно увидеть объект после реакции. Также выдается число частиц, участвовавших в конкретном шаге и число потенциально возможных участников.

К достоинствам программного продукта можно отнести: простоту в использовании, получение интегральных характеристик системы (переход от микро к макро переменным), наглядность моделируемого процесса.

Недостатком метода является большой объем простых вычислений, требующий более больших компьютерных мощностей.