

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ ДИФфуЗИИ МЕТОДОМ ВЕРоятНОСТНЫХ КЛЕТочНЫХ АВТОМАТОВ.

Храменков А. В.

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). Метод ВКА состоит из набора объектов (ячеек, клеток) 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 и “естественным” образом учитывать флуктуаций и внутренние шумы системы.

Для компьютерного моделирования двумерной поверхностной диффузии методом ВКА разработан программный продукт. Программа выполняется шагами. Сначала на полигоне создается объект из трех веществ (компонентов) до начала реакции. Далее вводим его физико-химические свойства и создаем температурное поле. 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 текущем шаге и число потенциально возможных участников.

К достоинствам программного продукта можно отнести: простоту в использовании, переход от микро к макро переменным, наглядность моделируемого процесса.

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