01

Формирование кластеров в детерминированных и стохастических полях

© С.А. Каплий, ¹ А.В. Проказников, ^{1,2} Н.А. Рудь ¹

- 1 Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова,
- 150000 Ярославль, Россия
- ² Институт микроэлектроники и информатики РАН,

150007 Ярославль, Россия

e-mail: rnrgio@yandex.ru

(Поступило в Редакцию 8 июля 2003 г.)

Исследованы компьютерные модели, относящиеся к классу моделей управляемого градиентом роста. Различные алгоритмы этого класса моделей позволяют получить широкий набор кластеров, характеризующихся разнообразными структурами, в том числе и фрактальными. Задача формирования неветвящихся, изолированных, вертикальных кластеров была решена посредством алгоритма, соответствующего дальнодействующему потенциалу с большим градиентом, сосредоточенному в узком диапазоне.

Введение

Результаты исследования когерентных явлений в стохастических системах представляют интерес с точки зрения применения их в различных физических областях. Явления когерентности характеризуются образованием кластеров в стохастических системах при определенных условиях. Кластеризация возникает в рамках различных моделей, которые во многих аспектах аналогичны моделям, описывающим когерентные явления в динамических системах. Одна из задач данного класса явлений кластеризация примеси в случайных полях скоростей. Принципиальной особенностью этой задачи является существование кластерной структуры поля концентрации примеси. Эта особенность проявляется в виде возникновения каустической структуры в результате фокусировок и дефокусировок в случайной среде [1].

Проблема, исследуемая в данной работе, тесным образом связана со следующей задачей. Частица в поле случайных скоростей в простейшем случае описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка [1]

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{U}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{r}(t_0) = \mathbf{r}_0, \tag{1}$$

где $\mathbf{U}(\mathbf{r},t) = \mathbf{u}_0(\mathbf{r},t) + \mathbf{u}(\mathbf{r},t)$, $\mathbf{u}_0(\mathbf{r},t)$ — детерминированная составляющая поля скоростей, а $\mathbf{u}(\mathbf{r},t)$ — случайная составляющая.

С формальной точки зрения, исходя из уравнения (1), каждая частица движется независимым образом. Однако если случайное поле $\mathbf{u}(\mathbf{r},t)$ имеет конечный пространственный радиус корреляции $l_{\rm cor}$, то частицы, расстояние между которыми меньше $l_{\rm cor}$, находятся в общей зоне влияния случайного поля $\mathbf{u}(\mathbf{r},t)$ и в динамике такой системы частиц могут появляться новые коллективные особенности. Например, для случая потенциального поля скоростей (где $\mathbf{u}(\mathbf{r},t) = \nabla \psi(\mathbf{r},t)$) частицы, равномерно расположенные в квадрате в начальный момент

времени, в процессе временной эволюции образуют кластерные области [1].

Другим классом проблем, связанных с образованием кластеров, является формирование пористого пространства в различных полупроводниковых кристаллах. Представителями веществ с подобными свойствами являются пористый кремний [2], а также пористые вещества, образованные спеканием мелкодисперсных порошков [3]. Таким образом, исследуемая проблема находит свое применение в широком спектре задач современной физики.

Компьютерное моделирование позволяет решить достаточно широкий круг алгоритмически сформулированных задач, исследование асимптотического поведения решений которых иногда не представляется возможным иными способами. Попытки использования компьютерных моделей для объяснения закономерностей порообразования предпринимались неоднократно [4]. Однако исчерпывающей модели формирования пористых пространств к настоящему времени не построено, что свидетельствует о необходимости продолжения исследований в данном направлении.

Постановка задачи и основные результаты

В данной работе исследуется формирование кластеров на одной из плоских границ прямоугольной области, покрытой квадратной сеткой. Между противоположными плоскими границами прикладывается потенциал. В отличие от задачи, описанной в работе [1], мы рассматриваем случайное блуждание частиц в постоянном потенциальном поле нескольких затравок, в то время как в [1] динамика системы определяется стохастическим, зависящим от времени полем с определенным радиусом корреляции. При моделировании используются три затравки определенной формы с фиксированными положениями.

Исследуются закономерности локализации кластера на первоначальных затравках в условиях влияния потенциального поля, создаваемого затравками, и поля самого кластера. Также проводится поиск условия, при котором формируются вертикальные, слабоветвящиеся, обособленные кластеры.

На движение частицы, так же как в уравнении (1), оказывают влияние детерминированная составляющая $\mathbf{u}_0(\mathbf{r},t)$ и стохастическая составляющая $\mathbf{u}(\mathbf{r},t)$. Детерминированную компоненту определяет поле, создаваемое игольчатыми затравками, а стохастическая компонента движения частицы, приводящая к случайным блужданиям по квадратной сетке, описывается алгоритмом блуждания Метрополиса [5]. Вероятность перемещения в соседнее положение определяется через градиент потенциала в соответствующих окрестных точках таким образом, что вероятность прыжка в сторону состояния с более высоким потенциалом выше.

Расчет распределения поля производится на основании следующих посылок. Форма первоначальных затравок на верхней стороне пластины для простоты расчета аппроксимируется гиперболоидом вращения [6]. Между верхней границей (верхней стороной пластины) и нижней прикладывается потенциал. Расчет распределения потенциала производится методом Ламе, который подробно описывается в работе [6]. Как показывают расчеты [6], потенциал поля φ в этом случае является функцией параметра λ , т. е. $\varphi=\varphi(\lambda)$, и задается формулой

$$\varphi(\lambda) = \varphi_0 \frac{\ln\left(\frac{b(\lambda) + \lambda}{b(\lambda) - \lambda}\right)}{\ln\left(\frac{b_{\text{max}} + \lambda_{\text{max}}}{b_{\text{max}} - \lambda_{\text{max}}}\right)},\tag{2}$$

если разность потенциалов между иглой и нижней границей равна $\varphi_r = \varepsilon_{\mathrm{Si}} \varphi_0$, $\varepsilon_{\mathrm{Si}}$ — диэлектрическая проницаемость кремния; φ_0 — параметр размерности разности потенциалов, используемый при моделировании; величина $\left(b^2(\lambda)-\lambda^2\right)^{1/2}$ аппроксимировалась линейной зависимостью [6], т.е. полагалось $\left(b^2(\lambda)-\lambda^2\right)^{1/2}=p\lambda+q$, тогда $b(\lambda)=\left(\lambda^2(1+p^2)+2pq\lambda+q^2\right)^{1/2}$ [6], $p=(d_{\min}-d_{\max}+2D)/(\lambda_{\max}-\lambda_{\min})$, $D=\alpha(\lambda_{\max}-\lambda_{\min})$, $q=[\lambda_{\max}(d_{\max}+2D)-\lambda_{\min}d_{\min}]/(\lambda_{\max}-\lambda_{\min})$, $(\lambda_{\max}-\lambda_{\min})$ — толщина образца; $b_{\max}=b(\lambda_{\max})$; d_{\min} — размер затравки; D — расстояние между затравками; α — варьируемый параметр; d_{\max} — параметр, соответствующий значению λ_{\min} , при котором эквипотенциальные кривые вырождаются в прямую.

При рассмотрении двумерного случая с одной игольчатой затравкой эквипотенциальные кривые описываются уравнением гиперболы с параметрами λ^2 и $(b^2-\lambda^2)$ [6]. Аппроксимация параметра $(b^2-\lambda^2)^{1/2}$ различными зависимостями давала возможность изменять скорость раскрытия ветвей гиперболы с расстоянием от границы и тем самым моделировать как короткодействующие, так и дальнодействующие потенциалы (см. ниже).

Компьютерный алгоритм был построен таким образом, чтобы смоделировать образование структуры дву-

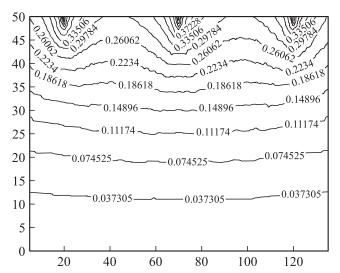


Рис. 1. Распределение электрического потенциала трех эквидистантных затравок. Параметры моделирования, соответствующие приведенным на рисунке данным, следующие: $\left(b^2(\lambda) - \lambda^2\right)^{1/2} = p \cdot \lambda + q$, $\varphi_0 = 1$, $\alpha = 1$.

мерного кластера под воздействием потенциала трех игольчатых затравок. Моделирование проводилось в прямоугольной области $2(D+d_{\max})\times(\lambda_{\max}-\lambda_{\min})$, которая была разбита на квадраты со стороной Δx . Для того чтобы получить суммарное распределение потенциала поля всех затравок, рассчитывалась правая половина поля, создаваемая одной затравкой, помещенной в крайнее положение. Затем, используя принцип суперпозиции полей и симметрию задачи, формировалось суммарное поле трех эквидистантных затравок. Каждой клетке ставилось в соответствие значение рассчитанного поля, и в итоге мы получили дискретное распределение потенциала затравок ϕ_{ij} . Распределение потенциалов в этом случае представлено на рис. 1.

Рост кластера происходил за счет блуждания частицы по квадратной решетке с нижней плоской границы к верхней, где располагались три игольчатые затравки. Алгоритм случайного блуждания основывался на алгоритме Метрополиса [5]. Для вычисления траектории движения частицы, находящейся в клетке (i,j), рассматривалась окрестность, состоящая из четырех ближайших соседей, имеющих общие границы с ячейкой (i,j). Затем вычислялась вероятность перехода из ячейки (i,j) в ячейку (i',j') в указанной окрестности формуле

$$p[(i,j) \to (i',j')] = \frac{\phi_{(i,j)(i',j')}}{\sum_{\Pi} \phi_{(i,j)(i',j')}},$$
 (3)

$$\phi_{(i,j)(i',j')} = \frac{1}{n} + \frac{|\varphi_{i,j} - \varphi_{i',j'}|}{|r_{ij} - r_{i',j'}|},\tag{4}$$

где $\varphi_{ij}, \varphi_{i'j'}$ — потенциал поля в точках (i,j) и (i',j') соответственно, $n \leq 4$ — количество доступных для перехода ячеек, Π — окрестность ячейки (i,j).

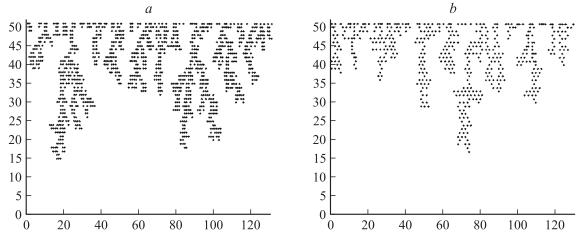


Рис. 2. Результаты компьютерного моделирования согласно стандартному алгоритму необратимого роста, управляемого градиентом, для следующих параметров: $\alpha=1$, $\varphi_0=1$, $\sigma=0.1$, $\beta=1.3\cdot 10^{-5}$. a — параметр прилипания η вычислялся с учетом восьми ближайших соседей, фрактальная размерность $D_f=1.719-1.802$ и количество точек в кластере N=1100; b — параметр прилипания η вычислялся с учетом двенадцати ближайших соседей, фрактальная размерность $D_f=1.612-1.682$ и N=500.

Переход частицы (i, j) в состояние (i', j') происходит в соответствии с вычисленной вероятностью этого перехода. Процесс повторяется до тех пор, пока не будет достигнута верхняя граница или пока частица не "прилипнет" к формирующемуся кластеру. Чтобы частица "прилипла" к кластеру, отношение числа точек кластера в радиусе $R_{\rm xap}$ к числу ближайших ячеек, имеющих общие вершины, должно быть больше некоторой фиксированной величины η (коэффициент прилипания). От величины этого коэффициента зависит, как глубоко частица проникает в глубь кластера и, как это будет показано ниже, внутренняя структура кластера. Остановившаяся частица формирует кластерную структуру. Расстояние, на котором растущий кластер воздействует на частицу, определялось параметром $R_{\rm xap}$. Все точки кластера, попавшие в окружность радиусом $R_{\rm xap}$, вносят соответствующий вклад в статический потенциал, создаваемый для каждой ячейки из ближайшей окрестности, по формуле [7]

$$\psi_{iji'j'}(r_{ij} - r_{i'j'}) = \frac{\sigma_{i'j'}}{|r_{ij} - r_{i'j'}|} e^{-\beta(r_{ij} - r_{i'j'})}, \quad (5)$$

так что

$$\psi_{ij} = \sum_{|r_{ij} - r_{i'j'}| < R_{xap}} \frac{\sigma_{i'j'}}{|r_{ij} - r_{i'j'}|} e^{-\beta(r_{ij} - r_{i'j'})}, \quad (6)$$

где $\sigma_{ij}=\sigma$ — величина заряда элементарной ячейки, $\beta=1/r_0$ — постоянная экранирования, r_0 — радиус экранирования.

Потенциал ψ суммируется с потенциалом ϕ , создаваемым затравками (см. формулу (2)). Вклад в результирующее поле вычисляется только для внешних точек кластера, так как они экранируют внутренние.

Применение описанного выше алгоритма приводит к формированию ветвящихся кластеров, соединяющихся между собой у основания (т.е. неизолированных).

С уменьшением потенциала формируются более вытянутые и более изолированные кластеры, в несколько большей степени "привязанные" к начальным затравкам. Подобные закономерности отмечены в эксперименте [8,9]. Описанный выше алгоритм не приводит к формированию изолированных, неветвящихся, вертикальных кластеров (рис. 2).

Представленные на рис. 2, а, b структуры отличаются условиями прилипания частицы к кластеру. На рис. 2, а структура получена с учетом восьми ближайших соседей, в то время как на рис. 2, в учитывалось влияние двенадцати соседей. Фрактальная размерность рассчитывается методом вычисления зависимости массы кластера от радиуса охватывающей его окружности [10] в логарифмических осях. Для кластеров, показанных на рис. 2, а, величина фрактальной размерности равна $D_f = 1.719 - 1.802$. Аналогичные вычисления для кластеров на рис. 2, b дают фрактальную размерность $D_f = 1.612 - 1.682$. Следует отметить тот факт, что при случайном блуждании по треугольной решетке число ближайших соседей равно двенадцати. Как это хорошо заметно из рис. 2, b, формирующиеся на квадратной решетке структуры имеют элементы треугольной формы. Это обусловлено тем, что число соседей, принимающих участие на конечном этапе формирования кластера, равно двенадцати. Таким образом, треугольные элементы могут образовываться и на квадратных решетках при определенных условиях формирования. Подобные эффекты наблюдались при анодировании кремния в растворах плавиковой кислоты. Так, в [11] были обнаружены фрактальные структуры, похожие на "салфетки Серпинского" (Serpinsky gasket).

Как показано в [12], фрактальная размерность не является универсальной в том смысле, что зависит не только от размерности решетки, используемой при численном моделировании, но и от структуры решетки. В частности, работа [12] предсказывает, что фрактальная

размерность должна быть равна 5/3 для двумерной квадратной решетки и 7/4 для двумерной гексагональной и треугольной решеток. Как свидетельствуют результаты, приведенные на рис. 2, фрактальная размерность в значительной мере зависит и от других параметров моделирования, в частности от коэффициента прилипания, градиента, управляющего ростом, и др.

Для получения изолированных, неветвящихся, вертикальных кластеров был применен алгоритм, сочетающий описанные выше положения, и алгоритм с "движущейся" нижней границей, аналогичный описанному в работе [13] алгоритм. Подобный комбинированный алгоритм приводит к формированию более вытянутых и менее ветвящихся кластеров, что происходит за счет генерации начальных координат частиц преимущественно напротив активно растущих ветвей кластера, и, следовательно, увеличению скорости их роста. Однако такой алгоритм с движущейся границей также не позволяет решить задачу формирования неветвящихся, изолированных, вертикальных кластеров (рис. 3).

Для моделирования медленно спадающих на больших расстояниях потенциалов параметр $(b^2(\lambda) - \lambda^2)^{1/2}$ аппроксимировался логарифмической И обратно пропорциональной зависимостью, полагалось т.е. $(b^2(\lambda) - \lambda^2)^{1/2} = f(\lambda)$ при $f(\lambda) = p \ln(\lambda) + q$, $f(\lambda) = p \ln(\lambda) + q$ $= p/\lambda + q$. При этом "разворот" ветвей гипербол происходит более медленно с расстоянием, т.е. на более далеких расстояниях от верхней границы (рис. 4). Формирующиеся кластерные структуры становятся более вытянутыми. В формуле (2) параметр b может не зависеть от λ. Качественная картина при этом повторяет результат, полученный линейной аппроксимации $f(\lambda)$.

Детальное исследование построения результирующего потенциала и вычисленных вероятностей перехода в

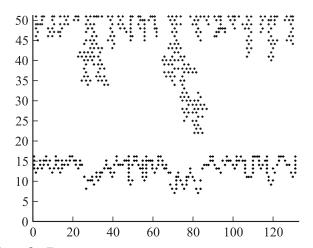


Рис. 3. Типичный кластер, получаемый в рамках второй модели с движущейся границей для следующих значений параметов: $\varphi_0=1$; $\alpha=1$; $\sigma=0.1$; $\beta=1.3\cdot 10^{-5}$; количество точек в кластере N=350, параметр прилипания η вычислялся с учетом двенадцати ближайших соседей. Фрактальная размерность $D_f=1.628$.

различные состояния обнаруживает следующий эффект. На вертикальной линии строго под любой из затравок вероятность перехода вбок выше вероятности переходов в вертикальном направлении. Эти вертикальные линии не являются линиями большего притяжения, как ожидалось из качественных рассмотрений, ввиду максимального значения электрического поля вдоль них, а имеют характер линий локального рассеяния, вероятность ухода с которых выше вероятности остаться на этой линии. Этот эффект связан с тем, что на вертикальной линии потенциал достаточно высок, но является слабо меняющейся величиной от клетки к клетке вдоль этой линии, тогда как при переходе с этой линии в боковую клетку потенциал меняется более значительно. Этот эффект приводит к тому, что, несмотря на потенциалы, меняющиеся в достаточно узкой области, происходит уход блуждающей частицы с вертикали, в результате чего формируются более разветвленные кластеры (рис. 4), чем при подавлении этого эффекта (рис. 5).

С целью подавления отмеченного выше эффекта и анализа условий, необходимых для формирования неветвящихся, изолированных, вертикальных кластеров, была проделана следующая процедура. Вводилась специальная добавка в вероятность прыжка из данной клетки, модулирующая эту вероятность таким образом, чтобы увеличить вероятность прыжка в вертикальном направлении, т. е. определенным образом увеличивалась анизотропия системы. Пусть вычисленная по основному алгоритму вероятность прыгнуть влево p_l , вправо p_r , вниз p_d , вверх p_u , то модулированная вероятность вычисляется следующим образом: влево и вправо $p_l' = p_l - kp$, $p_r' = p_r - kp$; вниз $p_d' = p_d - 2kp$; вверх $p_u' = p_u + 4kp$, где kp — модулирующий коэффициент.

Эта процедура применялась в двух вариантах. Первый — вероятность прыжка модулировалась независимо от положения частицы, второй — модуляция вероятности производилась только напротив положения затравок. В рамках второго варианта мы решили задачу получения неветвящихся, изолированных, вертикальных кластеров (рис. 5), причем рост кластера происходил устойчиво, практически без появления ответвлений. Рассмотренная процедура связана с учетом второго слагаемого в формуле разложения потенциала (см. далее формулу (7) и соответствующие пояснения). В большинстве случаев анизотропия препятствует формированию фрактальных структур [14].

Отметим, что численное моделирование в рамках данных исследований проводилось на основе шести различных алгоритмов.

Физическая интерпретация

Исследуемая проблема имеет непосредственное отношение к задаче формирования пор в полупроводниковых кристаллах, например, в ходе анодирования кремния в растворах плавиковой кислоты. Известно, что в этих условиях формируется поровое пространство,

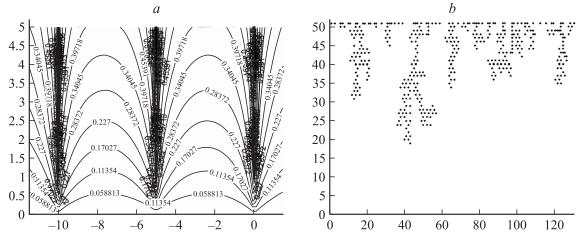


Рис. 4. a — распределение электрического потенциала трех эквидистантных затравок. Параметры моделирования, соответствующие приведенным на рисунке данным, следующие: $\left(b^2(\lambda)-\lambda^2\right)^{1/2}=p/\lambda+q$, $\varphi_0=1$, $\alpha=1$. b — типичный кластер, получаемый в рамках второй модели с движущейся границей для следующих значений параметров: $\sigma=0.1$; $\beta=1.3\cdot 10^{-5}$; количество точек в кластере N=500, параметр прилипания η вычислялся с учетом двенадцати ближайших соседей.

содержащее объекты квантовых размеров. Решение поставленной в данной работе задачи связано с ответом на вопрос о причинах резкой анизотропии в процессах порообразования, приводящих к формированию строго вертикальных, неветвящихся пор ("тренчей").

В нашем случае к области физических параметров, соответствующих задаче анодирования кремниевой пластины в режиме порообразования, относятся следующие значения параметров. Толщина кремниевой пластины составляет $500\,\mu\text{m}$. Число клеток, соответствующих вертикальному размеру, равнялось 50, так что размеры одной элементарной квадратной клетки соответствуют $10^{-3}\times 10^{-3}\,\text{cm}$.

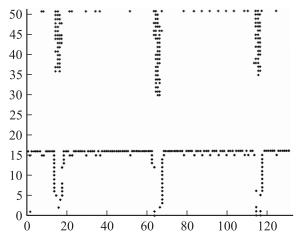


Рис. 5. Типичный кластер, получаемый в рамках третьей модели (второй вариант) с движущейся границей для следующих значений параметров: $\varphi_0=1$; $\alpha=1$; $\sigma=0.1$; $\beta=1.3\cdot 10^{-5}$; количество точек в кластере N=394, параметр прилипания η вычислялся с учетом восьми ближайших соседей. Вероятность модулировалась в "коридоре" толщиной 3 с коэффициентом kp=0.1.

При значениях параметров абсолютной температуры $T=300\,\mathrm{K}$, концентрации легирующей примеси $n=10^{15}\,\mathrm{cm^{-3}}$ и диэлектрической проницаемости кремния $\varepsilon_\mathrm{Si}=11.8$ постоянная экранирования $\beta=1.3\cdot10^{-5}\,\mathrm{cm}$ [7].

Параметр σ соответствует количеству дырок в элементарной клетке объемом $\Delta V = (\Delta x)^3 = 10^{-9} \, \mathrm{cm}^3 \, (10^{-3} \times 10^{-3} \times 10^{-3} \, \mathrm{cm})$. Как показывают оценки, количество дырок вблизи поверхности в кремнии n-типа за счет изгиба зон много меньше, чем количество неравновесных дырок, рождаемых при подсветке образца. Для типичных потоков в наших экспериментах $[15] \ J = 10^{19} \, \mathrm{фотоh} \cdot \mathrm{cm}^{-2} \, \mathrm{u} \ \sigma \leq 0.1 \, (\mathrm{СГСЭ})$. Прикладываемый потенциал не превышал, как правило, $0 \leq \varphi_r \leq 120 \, \mathrm{V}, \ \varphi_r = \varphi_0 \varepsilon_\mathrm{Si}$.

Обсуждение

В работе исследованы компьютерные модели, относящиеся к классу моделей управляемого градиентом роста. Анализ результатов компьютерного моделирования показал, что сочетание детерминированной составляющей скорости частицы, блуждающей по квадратной решетке, со стохастической составляющей приводит к формированию широкого спектра кластерных структур. Эти структуры характеризуются широким диапазоном фрактальных размерностей в зависимости от параметров модели.

Как показывают исследования компьютерных моделей, для получения изолированных, неветвящихся, вертикальных кластеров необходим потенциал, имеющий больший градиент, чем тот, который соответствует распределению электрического напряжения в пластине. В формуле (4) при вычислении вероятности перехода "частицы" в соседнее положение было использовано

первое слагаемое в разложении потенциала

$$\varphi(\mathbf{r}) \approx \varphi(\mathbf{r}_0) + \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}_0)}{\partial \mathbf{r}} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + \dots$$
 (7)

Второе слагаемое содержит градиент потенциала и также может давать вклад в результирующую вероятность. В случае достаточно слабо меняющегося потенциала приближение, учитывающее вклад только первого слагаемого в выражении (7), является оправданным. Именно таким потенциалом на больших расстояниях является потенциал (2), рассматриваемый в нашей задаче (рис. 1). При рассмотрении других типов потенциала необходим дополнительный анализ вклада поправок в потенциал следующего порядка. Учет вклада второго слагаемого дает возможность устранить алгоритмический эффект, рассмотренный выше, который приводит к тому, что вертикальная линия под затравкой обладает рассеивающими свойствами. Учет первого слагаемого в формуле (7) связывает вероятности перехода между состояниями с эквипотенциальными линиями, а учет второго слагаемого в (7) связывает вероятности с силовыми линиями поля.

Потенциалом, заслуживающим специального рассмотрения, является дальнодействующий потенциал упругого напряжения в пластине и деформационное поле дислокаций. На рис. 4 представлен дальнодействующий потенциал, моделирующий свойства упругих напряжений. Как это видно из рис. 4, потенциал сосредоточен в достаточно узком диапазоне. Ветвление пор связано во многом с рассеивающим действием указанного выше алгоритмического эффекта. Подавление этого эффекта в рамках действия потенциала, сосредоточенного в узком диапазоне, приводит к практически полному исчезновению эффекта ветвления пор (рис. 5). Особого внимания требуют также эффекты, когда химические реакции, сопровождающие порообразование, идут только в местах нарушения однородности кристаллической решетки [16].

В настоящей работе также обнаружено, что треугольные элементы могут образовываться на квадратных решетках при определенных условиях формирования. Подобные эффекты действительно наблюдались при анодировании кремния в растворах плавиковой кислоты. Например, в работе [14] продемонстрированы фрактальные структуры, аналогичные "салфеткам Серпинского" (Serpinsky gasket).

Проблема "привязки" развивающегося кластера к первоначальной затравке во многом связана с наличием шума, порождаемым самой моделью [14]. Дело в том, что на начальном этапе моделирования алгоритм, содержащий случайные блуждания, порождает шумовые неустойчивости, и дробовой шум существует в масштабе кластера, являясь своего рода начальным условием для последующих стадий. Если какая-то неустойчивая мода начинает расти, ее рост имеет детерминистический характер, хотя зависимость от начальных условий отнюдь не исключается [14].

В заключение отметим следующее. В работе исследованы компьютерные модели, относящиеся к классу моде-

лей управляемого градиентом роста. Различные алгоритмы этого класса моделей позволяет получить широкий набор кластеров, характеризующихся разнообразными структурами, в том числе и фрактальными. Потенциал, отвечающий распределению обычного электрического поля в кремниевой пластине, приводит к формированию ветвящихся кластеров. Задача формирования неветвящихся, изолированных, вертикальных кластеров была решена посредством алгоритма, соответствующего дальнодействующему потенциалу с большим градиентом, сосредоточенному в достаточно узком диапазоне. Одним из представителей потенциалов такого типа является деформационный потенциал, свойства которого также моделировались и исследовались в рамках данной работы. Дальнейшие исследования данной проблемы будут опубликованы позднее.

Результаты работы могут быть использованы при анализе эффектов анизотропного травления, приводящего к формированию вертикальных стенок. Подобные эффекты наблюдаются как при анодировании [17], так и при плазмохимическом травлении кремния [18].

Список литературы

- [1] Кляцкин В.И., Гурарий Д. // УФН. 1999. Т. 169. № 2. С. 171–207.
- [2] Bisi O., Ossicini S., Pavesi L. // Surf. Sci. Rep. 2000. Vol. 38. P. 1.
- [3] Поляков В.В., Кручинский С.В. // Письма в ЖТФ. 2001.Т. 27. Вып. 14. С. 42–45.
- [4] John G.C., Singh V.A. // Phys. Rep. 1995. Vol. 263. P. 93-151.
- [5] *Гулд X., Тобочник Я.* Компьютерное моделирование в физике. Т. 2. М.: Мир, 1990. 399 с.
- [6] *Миролюбов Н.Н., Костенко М.В., Левинштейн М.Л., Тиходеев Н.Н.* Методы расчета электростатических полей. М.: Высшая школа, 1963. 425 с.
- [7] Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978. 615 с.
- [8] Lehmann V. // J. Electrochem. Soc. 1993. Vol. 140. N 10. P. 2836.
- [9] *Бучин Э.Ю., Проказников А.В.* // Микроэлектроника. 1998. Т. 27. Вып. 2. С. 107–113.
- [10] Федер Е. Фракталы. М.: Мир, 1991. 254 с.
- [11] Levy-Clement C., Lagoubi A., Tomkiewicz M. // J. Electrohem. Soc. 1994. Vol. 141. N 4. P. 958–967.
- [12] *Туркевич Л., Шер Г.* Фракталы в физике. М.: Мир, 1988. 310 с.
- [13] Smith R.L., Chuang S.-F., Collins S.D. // J. Electr. Matherials. 1988. Vol. 17. N 6. P. 553–541.
- [14] Сандер Л. Фракталы в физике. М.: Мир, 1988. 336 с.
- [15] Buchin E.Yu., Prokaznikov A.V., Churilov A.B. // Appl. Surf. Sci. 1996. Vol. 102. P. 431.
- [16] Prokaznikov A.V., Svetovoy V.B. // Phys. Low-Dim. Structures. 2002. Vol. 9/10. P. 65–69.
- [17] *Grigoras K., Niskanen A.J., Franssila S.* // J. Micromech and Microengin. 2001. Vol. 11. P. 371–375.
- [18] Jansen H. // J. Micromech and Microengin. 1995. Vol. 5. P. 115–120.