

УДК 539.2; 533.9

РОЛЬ АНИЗОТРОПИИ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ В ОБРАЗОВАНИИ ПЕРИОДИЧЕСКОГО РЕЛЬЕФА ПРИ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

А.В. ПУНЬКО

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
П. Бровка, 6, Минск, 220013, Беларусь

Поступила в редакцию 14 мая 2008

Исследуется влияние анизотропии поверхностного натяжения на возможность образования периодических поверхностных структур (ППС). Результаты сопоставляются с экспериментальными данными по образованию ППС на кремнии, обработанном плотной компрессионной плазмой.

Ключевые слова: анизотропия, поверхностное натяжение, периодические структуры, ППС.

Введение

Неоднократно наблюдалось возникновение ППС на полупроводниках и металлах при использовании различных типов энергетического воздействия: лазерного излучения [1–2], компрессионной плазмы [3] и т.п. Наиболее широкое распространение при интерпретации этого явления получила модель возникновения ППС в результате интерференции поверхностных электромагнитных волн с падающим излучением. Однако при отсутствии когерентности излучения (поток плазмы) ППС также образуются, что предполагает наличие других факторов. В настоящей работе проведена оценка влияния анизотропии поверхностного натяжения на возможность образования периодического поверхностного рельефа.

Постановка задачи

Равновесная форма кристалла (при фиксированных температуре T , химическом потенциале μ и объеме V) определяется условием минимальности термодинамического потенциала Ω , или, что то же, условием минимальности его поверхностной части [4]:

$$\Omega_s = \iint_S \alpha d\xi, \quad (1)$$

где интеграл от коэффициента поверхностного натяжения α берется по всей поверхности S кристалла.

Пусть $z=z(x, y)$ — уравнение поверхности кристалла, обеспечивающей минимум Ω . Обозначим через p и q величины частных производных

$$p = \frac{\partial z}{\partial x}(x, y), q = \frac{\partial z}{\partial y}(x, y), \quad (2)$$

определяющих направление касательных к поверхности в каждой ее точке. Плотность поверхностной энергии α может быть выражена в виде их функции: $\alpha = \alpha(p, q)$. Равновесная форма при этом определится условием минимальности функционала:

$$\int \alpha(p, q) \sqrt{1 + p^2 + q^2} dx dy \rightarrow \min \quad (3)$$

при условии постоянства объема вещества, ограниченного поверхностью:

$$\iint z dx dy = \text{const}. \quad (4)$$

Для плотности поверхностной энергии использовалось выражение [5]:

$$\alpha(p, q) = \alpha(p) = \frac{\alpha_0 (1 + |p|)}{\sqrt{1 + p^2}} - \frac{4\beta_0 p^2}{1 + p^2}, \quad (5)$$

где α_0 и β_0 — постоянные. Здесь предполагается анизотропия поверхностного натяжения α только в направлении оси OX.

Сопоставив уравнения (3)–(5), получаем вариационную задачу:

$$\begin{cases} \int F(p) dx \rightarrow \min \\ \int z dx = \text{const} \end{cases}, \quad (6)$$

где

$$F(p) = \alpha_0 (1 + |p|) - \frac{4\beta_0 p^2}{1 + p^2} \quad (7)$$

Аналитическое решение методами вариационного исчисления

Вариационная задача (6) относится к классу изопериметрических [6]. Решим ее в соответствии с методикой, изложенной в [6].

Введя множитель Лагранжа λ , записываем новый функционал I^* :

$$I^* = \int (F + \lambda z) dx = \int F^* dx. \quad (8)$$

Уравнение Эйлера для нового функционала:

$$\frac{\partial F^*}{\partial z} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F^*}{\partial p} \right) = 0, \quad (9)$$

т.е. $\lambda - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial F}{\partial p} \right) = 0$, или:

$$\frac{\partial F}{\partial p} = \lambda x - \lambda C_1, \quad (10)$$

где C_1 — константа.

Зная явный вид $F(p)$ из (7), дифференцируя, получим:

$$\frac{\partial F}{\partial p} = \alpha_0 \operatorname{sign} p + \frac{4\beta_0 p p^2 - 2}{p^2 + 1} p^{5/2}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial p^2} = -\frac{4\beta_0 (2p^4 - 11p^2 + 2)}{p^2 + 1} p^{7/2}.$$

Тогда из (10) получим:

$$x = C_1 + \frac{1}{\lambda} \frac{\partial F}{\partial p} = C_1 + \frac{1}{\lambda} \left(\alpha_0 \operatorname{sign} p + \frac{4\beta_0 p p^2 - 2}{p^2 + 1} p^{5/2} \right). \quad (12)$$

Мы выразили x , как функцию p и λ . Теперь надо получить такое же выражение для z . Из определения: $dz = p dx$, или:

$$dz = p \frac{\partial x}{\partial p} dp. \quad (13)$$

Дифференцирование (10) дает

$$\frac{\partial^2 F}{\partial p^2} = \lambda \frac{\partial x}{\partial p}. \quad (10')$$

Тогда (13) переписывается:

$$dz = \frac{p}{\lambda} \frac{\partial^2 F}{\partial p^2} dp, \quad (13')$$

или, учитывая (11):

$$dz = -\frac{1}{\lambda} \frac{4\beta_0 p (2p^4 - 11p^2 + 2)}{p^2 + 1} p^{7/2} dp. \quad (14)$$

Интегрируя (14), получаем:

$$z = C_2 + \frac{1}{\lambda} \frac{4\beta_0 p^2 (2p^2 - 1)}{p^2 + 1} p^{5/2}, \quad (15)$$

где C_2 — константа. Это и есть искомое выражение для z .

Объединяя (12) и (15), получим:

$$x = C_1 + \frac{1}{\lambda} \left(\alpha_0 \operatorname{sign} p + \frac{4\beta_0 p p^2 - 2}{p^2 + 1} p^{5/2} \right) \quad (16)$$

$$z = C_2 + \frac{1}{\lambda} \frac{4\beta_0 p^2 (2p^2 - 1)}{p^2 + 1} p^{5/2}.$$

Таким образом, кривая $z=z(x)$ задана параметрически с параметром p . Параметр λ является масштабным фактором и определяется объемом, ограниченным рассматриваемой поверхностью. Постоянные C_1 и C_2 определяют смещение рассматриваемой системы в плоскости XOZ . Из вышеизложенного следует, что основные особенности в поведении решения можно наблюдать, положив C_1, C_2 любыми, а λ — любым, отличным от нуля.

Положим: $C_1=C_2=0, \lambda=1$. Система (16) примет вид:

$$x = \alpha_0 \operatorname{sign} p + \frac{4\beta_0 p^2 - 2}{p^2 + 1}^{5/2},$$

$$z = \frac{4\beta_0 p^2 - 2p^2 - 1}{p^2 + 1}^{5/2}.$$
(17)

Геометрический смысл параметра p (2) — тангенс угла наклона поверхности в данной точке. Следовательно, p может принимать значения из интервала $(-\infty; +\infty)$.

На рис. 1, *а, б* приведены графики зависимости $z=z(x)$ при различных значениях соотношения α_0/β_0 . Стрелками указано направление перемещения точки $(x(p_0), z(p_0))$ при увеличении p_0 . Форма кривой своеобразна ("шаман-кривая", [7]): одному значению x может соответствовать до четырех значений z .

Две парные ветки графиков на рис. 1 с одинаковым углом в основании образуют часть профиля поверхности минимальной энергии. Интерпретация: каждый участок поверхности обеспечивает минимизацию энергии локально, принимая форму уголка с параметрами, соответствующими (17). Итоговый профиль обеспечивается "сшивкой" таких пар.

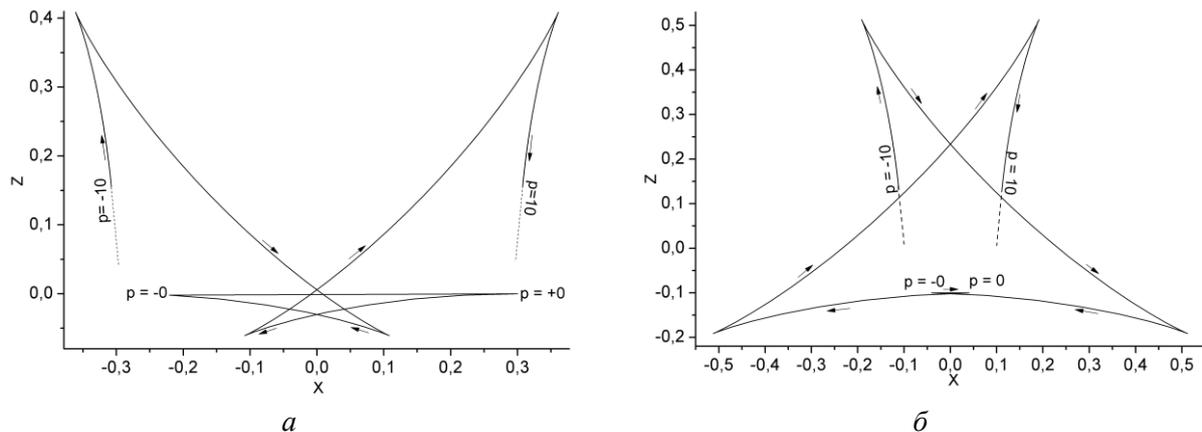


Рис. 1. График зависимости $z=z(x)$: *а* — при $\alpha_0/\beta_0=1,5$; *б* — $\alpha_0/\beta_0=0,33$

В итоге приходим к следующим выводам.

Анизотропия поверхностного натяжения может приводить к образованию на поверхности чередующихся участков подъема и спуска, которая, таким образом, приобретает т.н. "волнистый" рельеф. Количество участков подъема и спуска будет соразмерно: этого требует условие конечности ограниченного поверхностью объема.

Существует неоднозначность решения поставленной задачи: та же поверхностная энергия может быть получена разными способами чередования и протяженностями участков подъема и спуска.

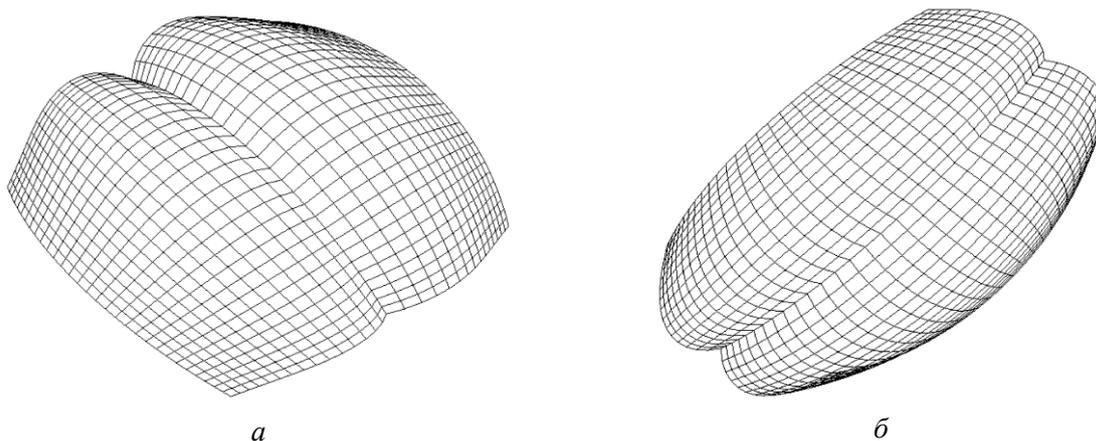


Рис. 2. Фрагмент огибающей поверхности минимальной энергии: *a* — при $\alpha_0/\beta_0=3$; *б* — при $\alpha_0/\beta_0=1,6$

Геометрическая интерпретация Вульфа

Решением вариационной задачи (3)–(4) является семейство плоскостей, параметрическое уравнение огибающей которых может быть представлено следующим образом [4]:

$$px + qy - z = \frac{1}{\lambda} \alpha \sqrt{1 + p^2 + q^2}, \quad (18)$$

где p, q играют роль параметров.

В соответствии с [4] для (18) использовалась геометрическая интерпретация Г.В.Вульфа: множество точек, являющихся решением вариационной задачи (3)–(4), есть семейство концов векторов с направляющими косинусами $p, q, -1$ и длиной $\alpha(p, q)$. Т.е. плотность поверхностной энергии, соответствующая данному направлению, определяет расстояние от начала координат до точки, в которой перпендикулярно соответствующему вектору строится плоскость. Набор таких плоскостей для различных пар (p, q) отсекает от ограничивающего объема равновесную поверхность.

Таким образом, огибающая поверхность строилась, как множество точек вида

$$A \left(\frac{p \alpha(p, q)}{\sqrt{1 + p^2 + q^2}}; \frac{q \alpha(p, q)}{\sqrt{1 + p^2 + q^2}}; \frac{-\alpha(p, q)}{\sqrt{1 + p^2 + q^2}} \right), \quad (19)$$

где p и q пробегает некоторые интервалы (соображения по выбору границ интервалов приведены выше).

Выбор в (18) масштабного параметра λ определяется условием (4), соответствующим постоянству объема под поверхностью. Таким образом, без дополнительных предположений мы можем получить лишь информацию о форме неоднородностей поверхности, но не об их характерном размере.

На рис. 2, *a, б* приведены фрагменты равновесной поверхности кристалла для различных соотношений параметров α_0, β_0 . Репликация данного фрагмента в плоскости образца может обеспечить морфологию поверхности, соответствующую ППС.

Расчетные данные сопоставлялись с экспериментальными из [3], где были обнаружены ППС на кремнии, обработанном компрессионной плазмой. На большей части поверхности соотношение длина/диаметр цилиндрических структур составляло десятки — сотни единиц; реже наблюдались структуры с соотношением порядка $5 \div 10$. Теоретический анализ с использованием геометрической интерпретации Вульфа дает для этого соотношение $3 \div 6$.

Заключение

Таким образом, одной из причин формирования периодических структур на поверхности кристалла может являться анизотропия его свойств, вследствие чего минимизация поверхностной энергии будет обеспечиваться гофрированным профилем.

THE ROLE OF SURFACE TENSION'S ANISOTROPY IN THE PROCESS OF PERIODIC RELIEF FORMATION UNDER HIGH-ENERGY INFLUENCE

A.V. PUNKO

Abstract

The influence of surface tension's anisotropy on the possibility of periodic surface structures formation is investigated. The results are compared with experimental data of surface structures formation on silicon, processed with compression plasma flow.

Литература

1. Ахманов С.А., Емельянов В.И., Коротеев Н.И., Семиногов В.Н. // УФН. 1985. Т. 147, № 4. С. 675–745.
2. Бугаев А.А., Лукошкин В.А., Урпин В.А., Яковлев Д.Г. // ЖТФ. 1988. Т. 58, № 5. С. 908–914.
3. Uglov V.V., Anishchik V.M., Astashynski V.V., et al. // Surface and Coatings Technology. 2002. Vol.158–159, P. 273–276.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. // Статистическая физика. Ч. 1. Москва, 1976.
5. Лифшиц И.М., Чернов А.А. // Кристаллография, 1959. Т. 4, № 5. С. 788–791.
6. Эльсгольц Л.Э. // Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление. Москва, 1969.
7. Курочкина В.А., Морозов А.И. // ЖТФ. 1990. Т. 60. № 4. С. 77–82.