

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Ярославский государственный университет им. П.Г.Демидова»

На правах рукописи

МЕТЛИЦКАЯ Алена Владимировна

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
САМООРГАНИЗАЦИИ НАНОСТРУКТУР ПРИ ИОННОМ
РАСПЫЛЕНИИ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ**

Специальность 05.13.18 - Математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук,
профессор
Рудый Александр Степанович

Ярославль 2014

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	3
Глава 1. Обзор математических моделей эрозии.....	20
1.1. Развитие теории распыления поверхности ионной бомбардировкой.....	20
1.2. Стохастические и релаксационные эффекты высшего порядка.....	28
Глава 2. Пространственно-нелокальная модель эрозии.....	41
2.1. Вывод нелокального уравнения эрозии поверхности ионной бомбардировкой.....	41
2.2. Регуляризация и обезразмеривание нелокального уравнения эрозии.....	50
2.3. Состояния равновесия нелокального уравнения эрозии.....	54
2.3.1. Террасы и плоскости.....	54
2.3.2. Устойчивость террас и плоскостей.....	59
2.4. Волновые решения нелокального уравнения эрозии.....	65
Глава 3. Механизм формирования волнового нанорельефа в рамках модели Бредли-Харпера.....	73
3.1. Постановка математической задачи.....	75
3.2. Устойчивость плоского профиля.....	80
3.3. Анализ нелинейной краевой задачи. Бифуркации пространственно неоднородного рельефа.....	83
3.4. Анализ нормальной формы и основной результат.....	90
3.5. Выводы и комментарии к полученным результатам.....	95
Заключение.....	97
Список литературы.....	101

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования

Начиная с 2000 года, промышленная микроэлектроника преодолела рубеж проектных норм 100 нм и, таким образом, трансформировалась в наноэлектронику. В настоящее время ведущие мировые производители (Intel, USA) достигли пространственного разрешения в критических элементах (затворных структурах интегральных транзисторов) 32 нм, а на очереди – заданная ITRS [1] проектная норма 22 нм. До настоящего времени массовое производство ультрабольших интегральных схем (УБИС) с суб-100 нм топологическими нормами обеспечивала коротковолновая UV-литография ((UV - ultraviolet) длина волны 193 нм), причем, для достижения разрешения в 45 нм и менее, необходимо существенное усложнение литографического процесса применением фазовых корректирующих шаблонов, иммерсионного режима экспонирования, двойного паттернирования и т.п. [2]. В результате современное промышленное литографическое оборудование является самой дорогостоящей частью комплекса технологического оборудования для производства УБИС оборудование, обеспечивающее минимальные топологические размеры (на текущий момент времени), в РФ не поставляется по причинам экономического и политического характера. На настоящий момент для импорта доступны модели отстающие (по разрешению) на 3 - 4 ступени от современного уровня, т.е. предназначенные для производства по 90-нм нормам.

Масштабирование интегральных приборов в область менее 32 нм показало, что существующие оптические литографы неспособны справиться с этой задачей без уменьшения длины волны в область EUV (extreme ultraviolet) до значений 13,5 нм. Физические проблемы, встретившиеся при разработке и создании такого оборудования, затрагивают все аспекты создания литографической машины: от разработки мощных надежных источников излучения, оптической системы литографа и до необходимости создания новых шаблонов и резистов.

Эти проблемы привели к тому, что EUV-литограф первоначально был изготовлен только в виде двух опытных машин фирмы ASML Inc. (Голландия) EUV Alpha Demo Tool [3], которые были установлены в исследовательских центрах CNSE (Albany, USA) и IMEC (Leuven, Belgium), и которые постоянно совершенствовались и дорабатывались. Помимо двух, упомянутых прототипов машин, ASML Inc. поступили заказы на шесть систем NXE: 3100, из которых все шесть были отгружены. По состоянию на первый квартал 2013 года, на системах NXE: 3100 было проэкспонировано более 30 000 пластин на предприятиях заказчиков. В 2013 году ASML Inc. получила уже 11 заказов на следующую модель NXE: 3300B. Промышленное внедрение EUV-литографии ожидается не ранее 2015 года.

Рассматривая альтернативные варианты технологий формирования суб-100 нм структур, в первую очередь следует обратить внимание на возможности электронно-лучевой (ЭЛ) литографии, являющейся в настоящее время развитой технологией [4] использующейся в производстве шаблонов для оптической литографии, а также в альтернативной технологии наноимпринта (нанопечатная литография) [5]. Физические принципы электронно-лучевой литографии заключаются в модификации свойств пленки электронно-чувствительного резиста сфокусированным электронным пучком и последующем химическом проявлении (удалении) экспонированного участка резиста.

В последнее время исследования в области электронно-литографических методов интенсифицировались, в том числе и в связи с относительно медленным решением проблем в EUV-литографии. В лабораторных условиях при формировании отдельных нанообъектов было достигнуто разрешение электронно-литографических методов вплоть до 5 нм [6]. Одновременно были продемонстрированы потенциальные возможности молекулярной наноэлектроники [7] и одноэлектроники [8].

Параллельно с упомянутыми выше работами велись исследования по расширению возможностей ЭЛ-литографии для использования, если не в массовом, то в мелкосерийном производстве изделий наноэлектроники. Успехи

здесь были достигнуты рядом компаний-разработчиков, предложивших и создавших метод многолучевой ЭЛ-литографии [9,10], что на порядок и более повысило производительность таких машин, по сравнению с литографами с единственным пучком.

Однако нельзя считать проблемы ЭЛ-литографии для формирования суб-100 нм элементов всецело решенными. В данной области, как и в оптической литографии, действует ряд факторов, ограничивающих разрешение метода. В частности, это известный эффект близости, связанный с рассеянием и переотражением электронов пучка, экспонирующего резист. Другим фактором, ограничивающим применение ЭЛ-литографии для формирования наноструктур методом прямого экспонирования резиста, является низкая устойчивость электронно-чувствительных резистов к химически активной плазме, применяемой для переноса рисунка маски в функциональный нижележащий слой. Это часто приводит к необходимости использования в электронной литографии двух- и трехслойных масок [11], значительно усложняющих и удлиняющих литографический процесс.

Еще одним недостатком ЭЛ-литографии является низкая производительность, и, как следствие, низкая эффективность методов ЭЛ-литографии для крупносерийного промышленного производства. Таким образом, разработка альтернативной существующим технологиям микро- и нанoeлектроники, и в то же время, легко в них интегрируемой технологии формирования на поверхности полупроводника рисунка нанометрового масштаба является актуальной задачей.

Альтернативой UV- и EUV-литографии может служить технология самоорганизации наноструктур [12,13], позволяющая формировать упорядоченные и хаотические наноструктуры непосредственно на поверхности кремниевой пластины, либо создавать наномаски для последующего легирования, как, например, в работе [12]. Данная технология является безмасочной и безрезистной разновидностью литографии. В основе альтернативной технологии

лежит явление самоорганизации наноструктур при распылении поверхности ионной бомбардировкой, в частности волнообразного нанорельефа (ВНР).

В отличие от ЭЛ-литографии эта технология позволяет формировать массивы наноструктур (например, тренчей или нанопроволок) одновременно на всей поверхности кремниевой пластины. Применение технологии самоорганизации наноструктур в сочетании с ЭЛ-литографией может привести к повышению производительности литографического процесса и не потребует использования дорогостоящего литографического оборудования высокого разрешения. Исходя из сказанного, можно сделать вывод о перспективности разработки технологии формирования нанорельефа на поверхности твердых тел методом самоорганизации наноструктур при распылении поверхности.

В виду большого числа параметров, определяющих процесс формирования наноструктур при ионном распылении поверхности, а именно:

- энергия ионов,
- плотность потока ионов,
- угол бомбардировки,
- время распыления,
- плотность атомов мишени,
- коэффициент распыления конкретной системы материал-ион распыляющего пучка,
- параметры раstra,
- структура материала мишени,
- шероховатость поверхности и т.д.

их экспериментальный подбор для получения нанорельефа, а тем более нанорельефа требуемого типа является трудоемкой задачей, требующей длительных усилий большого коллектива исследователей. В то же время ряд математических моделей, адекватно описывающих процессы развития мезоскопической топографии (уравнение Вандервоста-Элст) и формирования рельефа микроскопического (уравнение Бредли-Харпера) и нанометрового

масштаба (нелокальное уравнение эрозии) при распылении, позволяет решить эту задачу без дорогостоящего эксперимента.

Для удобства практического использования результатов математического моделирования, они могут быть представлены в виде пакетов программ, позволяющих рассчитывать область существования требуемого типа рельефа для следующего набора варьируемых параметров

- энергия ионов,
- плотность потока ионов,
- угол бомбардировки,
- время распыления,
- форма и размеры раstra,

Таким образом, разработка теоретических основ пучковых технологий в форме математических моделей самоорганизации наноструктур и компьютерных программ для расчета технологических параметров, основанных на экспериментальных закономерностях ионного распыления поверхности твердых тел, является актуальной.

Степень разработанности темы исследования

В настоящее время процесс самоорганизации наноструктур при эрозии поверхности полупроводников ионной бомбардировкой недостаточно изучен. Практическим применением явления самоорганизации наноструктур занимается сравнительно узкий круг исследователей, из которых практических значимых результатов добилась группа В.К. Смирнова [12]. Ею разработаны экспериментальные основы технологии формирования наноструктур, получившей название пучковых технологий.

Экспериментальные исследования в области пучковых технологий базируются на ряде моделей эрозии поверхности, из которых общепринятой считается модель Бредли-Харпера [14]. Эта модель имеет ряд недостатков, как с точки зрения корректности описания процесса распыления, так и точки зрения математической постановки задач. Недостатком модели Бредли-Харпера в первую

очередь является ее пространственная локальность, тогда как реальный процесс распыления нелокален, что существенно при малых латеральных масштабах рельефа. Из сказанного следует, что построение математической модели процесса эрозии поверхности, учитывающей пространственную нелокальность распыления, является необходимым этапом разработки теоретических основ пучковых технологий. Такая модель впервые была предложена в работе А.С. Рудого и др. [19].

Природа волнообразного рельефа, вызывала и продолжает вызывать множество споров. Волнообразный нанорельеф (ВНР) формируется на поверхности проводников, полупроводников и диэлектриков при облучении ионами как инертных, так и химически активных газов. Наиболее подробно изучен процесс зарождения и развития ВНР на поверхности кремния [15, 16]. Установлено, что ВНР формируется в определенном диапазоне углов падения ионов, ширина которого определяется энергией и типом первичного пучка. Эти же параметры определяют длину волны рельефа и глубину, на которой происходит его зарождение. Следует отметить, что значения этих величин различны для каждого набора экспериментальных условий (тип первичных ионов, их энергия и угол падения). Экспериментально установлено, что глубина (или доза облучения) является наименьшей при использовании ионов азота. Она на порядок меньше, чем при облучении Si ионами O_2^+ , и на два порядка меньше, чем при использовании ионов Ar^+ [13].

Большинство исследователей считает, что образование ВНР обусловлено исключительно явлениями эрозионного характера, однако накопленные к настоящему времени экспериментальные факты свидетельствуют о том, что процесс формирования волнообразного рельефа возможно является двухстадийным, и состоит из стадии образования зародышевого рельефа и последующего развития поверхностной топографии при ионном распылении поверхности. Механизм образования зародышевого рельефа, очевидно, связан с формированием модифицированного (аморфного) слоя и развитием в нем

«гидродинамической» неустойчивости. На это указывает тот факт, что формирование рельефа начинается только при определенной дозе первичных ионов (степени аморфизации модифицированного слоя), а длина волны зависит от толщины модифицированного слоя.

На качественном уровне модифицированный слой можно рассматривать как замороженную жидкость, которая течет только в области линейных каскадов под действие объемной силы, создаваемой, как и сами каскады, первичными ионами, влетающими под некоторым углом к поверхности [18]. Однако гидродинамической модели модифицированного слоя на данный момент не существует.

Развитие поверхностной топографии при ионном распылении, в частности образование ВНР, описывается с использованием двух подходов. В первом – стохастическом подходе - предполагает включение случайных флуктуаций в среднюю плотность потока ионов. Второй подход предполагает изучение соответствующих эволюционных краевых задач. Например, для нелокального уравнения эрозии или уравнения, которое было предложено в работе М. Бредли и Дж. Харпера. Следует отметить, что в рамках стохастического подхода обычно рассматриваются те же самые уравнения, но в их коэффициенты включаются «случайные» функции. В работе избран детерминистический вариант подхода к задаче и показано, что он вполне удовлетворительно объясняет феномен образования нанорельефа. Более того, он позволяет получить асимптотические формулы, описывающие такой рельеф, провести сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными. При стохастическом подходе такое сравнение весьма затруднительно.

Наиболее известной из детерминистических моделей является уравнение Бредли-Харпера, в рамках которого образование ВНР объясняется опережающим ростом одной из гармоник, на которые может быть разложена исходная неоднородность на некоторой гладкой поверхности [14]. Как уже отмечалось, модель Бредли-Харпера является локальной, т.е. координаты точек падения первичного иона и выхода вторичного иона в ней считаются совпадающими.

Пространственная нелокальность, как характерная особенность процесса распыления, впервые была теоретически обоснована Петером Зигмундом в работе [17]. Под нелокальностью в данном случае понимается пространственная удаленность точки выхода вторичного иона b от точки внедрения первичного иона i . На рисунке 1 видно, что выход вторичного иона наиболее вероятен в точке b , так как она лежит на самой близкой к центру c изоэнергетической поверхности (эллипсоиде вращения), на которой энерговыделение больше, чем на внешних эллипсоидах, которым принадлежат соседние с b точки распыляемой поверхности. Параметр нелокальности (отрезок ib) зависит от угла бомбардировки, что в свою очередь определяет угловую зависимость коэффициента распыления.

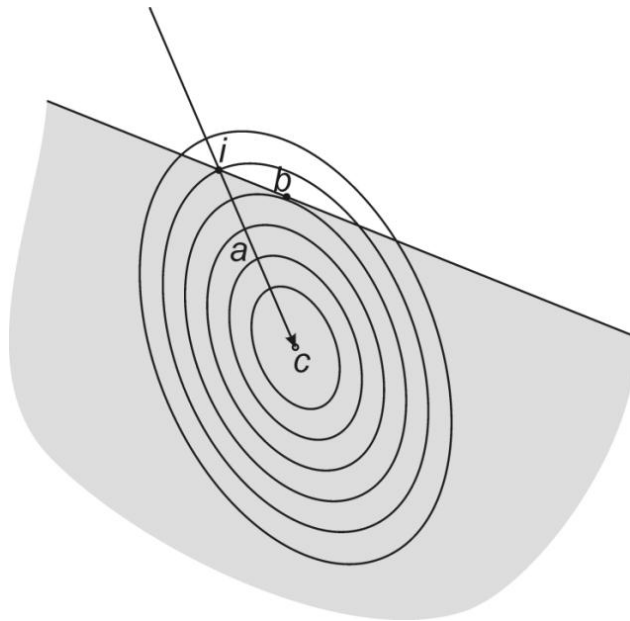


Рисунок 1 - Поверхности, на которых средняя величина плотности энергии, выделенной в точке c , постоянна. i и b – точки внедрения первичного иона и выхода вторичного иона, соответственно. Стрелкой показана усредненная траектория первичного иона

Впоследствии М. Бредли и Дж. Харпер, развивая подход П. Зигмунда, показали, что на коэффициент распыления влияет не только угол бомбардировки,

но и радиус кривизны поверхности [14]. Ими рассматривался случай, когда средняя длина пробега первичного иона a (глубина центра энерговыведения при нормальной бомбардировке) была много меньше радиуса кривизны $a \ll R$. В работе [14] было получено уравнение эрозии поверхности ионной бомбардировкой, учитывающее радиус кривизны поверхности.

Уравнение Бредли-Харпера предназначалось, в первую очередь, для объяснения развития ВНР, который согласно существовавшей на тот момент модели эрозии (уравнение Вандервоста и Элст (1)) вообще не должен был бы развиваться

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = -\frac{J}{\rho} \cos^2 \Theta \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Y(\Theta_0 - \Theta) \cos(\Theta_0 - \Theta)}{\cos \Theta} \right), \quad (1)$$

где Θ - угол наклона между локальной нормалью к поверхности и осью z , Θ_0 - угол бомбардировки, J - плотность потока ионов, ρ - плотность атомов мишени, Y - коэффициент распыления. В работе [14] рассматривалась трехмерная модель эрозии, которая позволяла объяснить образование, как перпендикулярных направлению бомбардировки, так и параллельных ему волн, наблюдаемых при угле бомбардировки $\Theta_0 \geq 70^\circ$. Поскольку практически важным является процесс образование ВНР при $\Theta_0 \in [40^\circ, 65^\circ]$, достаточно исследовать двумерный случай, в котором уравнение Бредли-Харпера имеет вид

$$\frac{\partial z}{\partial t} = -v_0(\Theta_0) + v'_0(\Theta_0) \frac{\partial z}{\partial x} + \frac{Ja}{\rho} Y(\Theta_0) \Gamma(\Theta_0) \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}, \quad (2)$$

где $v_0(\Theta_0), v'_0(\Theta_0)$ - параметры, характеризующие скорость распыления, $\Gamma(\Theta_0)$ - параметр уравнения, зависящий от угла бомбардировки.

Это уравнение интересно тем, что параметр $\Gamma(\Theta_0)$ - величина положительная только при скользящих углах бомбардировки [14]. Для

параболических уравнений с отрицательным коэффициентом диффузии (коэффициентом при производной второго порядка) существует так называемый пример Жака Адамара, показывающий, что в этом случае нет непрерывной зависимости решения от начальных условий, т.е. не выполняется один из трех критериев корректности. Таким образом, задача Коши для уравнения (2) относится к числу некорректно поставленных задач. Для исправления ситуации в уравнение (2) в работе [14] вводится производная четвертого порядка с отрицательным коэффициентом, учитывающая поверхностную диффузию атомов мишени.

Учет влияния кривизны поверхности позволил найти качественное объяснение развития волнообразного рельефа. Так в работе [14] было показано, что уравнению (2) удовлетворяют экспоненциально растущие волнообразные возмущения вида $z(x,t) = A_0 \exp(\lambda t) \exp[i(\omega t - kx)]$ и утверждалось, что экспериментально наблюдаемым волнам соответствуют решения с максимальным значением инкремента λ . Заметим, что решения уравнения (2) сходятся только благодаря учету производной четвертого порядка, которая согласно Дж. Картеру [20] дает крайне незначительный вклад в скорость изменения рельефа поверхности, но зато с математической точки зрения задача Коши становится корректной. Следует отметить, что анализ в работе [14] проведен в рамках линейного приближения, что не позволяет в принципе оценить амплитуду сформированного рельефа.

Поскольку процесс распыления, как следует из рисунка 1, и приведенных выше рассуждений, является нелокальным, для адекватного описания эрозии поверхности необходимо учитывать нелокальность процесса распыления. Нелокальное уравнение эрозии было предложено в работах [19, 21]. В работе [19] было показано существование решений в виде бегущих волн и определена область существования ВНР.

Краевые задачи в работе [19] не исследовались, т.к. в случае, например, периодических граничных условий краевая задача является некорректной в смысле Адамара. В работе [21] в уравнение эрозии была введена вторая

производная с малым параметром, причем это было сделано формально для регуляризации уравнения. На самом деле действительно существуют физические механизмы сглаживания поверхности и регуляризации уравнения эрозии (например, поверхностная самодиффузия). Однако соответствующие члены уравнения не могут быть выведены в рамках геометрического подхода, т.к. имеют иную физическую природу. Формально самодиффузия может быть учтена введением в уравнение второй производной с малым параметром $Dz''(\xi)$, где параметр D имеет смысл коэффициента поверхностной диффузии.

В процессе распыления происходит аморфизация и изменение фазового состава поверхностного слоя, что в свою очередь приводит к изменению параметра D . Таким образом, с одной стороны D является управляющим параметром, а с другой стороны, он не может быть оценен теоретически в рамках теории П. Зигмунда и определен экспериментально. Единственным способом оценки коэффициента диффузии является расчет его критических значений, соответствующих тем или иным диссипативным структурам

Цели и задачи исследования

Целью работы является исследование математических моделей эрозии поверхности ионной бомбардировкой и выявление на основе полученных результатов механизма формирования волнообразного нанорельефа.

Поставленная цель достигается путем решения следующих задач:

- исследование устойчивости состояний равновесия в рамках нелокальной модели эрозии;
- исследование устойчивости однородных состояний равновесия уравнения Бредли-Харпера;
- сопоставление механизмов формирования волнообразного нанорельефа в рамках нелокального уравнения эрозии и уравнения Бредли-Харпера с экспериментальными данными.

Научная новизна

Получены результаты, раскрывающие механизмы формирования наноструктур в процессах ионного распыления:

- получены состояния равновесия в виде плоского профиля и пространственно-неоднородные решения в виде террас для нелинейного нелокального уравнения эрозии;
- определены условия устойчивости плоского профиля и пространственно-неоднородных решений нелинейного нелокального уравнения эрозии;
- построены волновые решения пространственно-нелокального уравнения эрозии, линеаризованного на нулевом состоянии равновесия. Показано, что при потере устойчивости плоского профиля от состояния равновесия бифурцируют решения в виде высокомодовых бегущих волн;
- исследована периодическая краевая задача для одной из версий уравнения Бредли-Харпера методами качественной теории дифференциальных уравнений с бесконечномерным фазовым пространством (пространством начальных условий);
- выявлен механизм возникновения широкого класса пространственно-неоднородных форм рельефа, который формируется в процессе ионной бомбардировки;
- для соответствующих решений получены асимптотические формулы и выведены условия их устойчивости, т.е. условия их физической реализуемости.

Эти результаты получены с использованием метода инвариантных многообразий, нормальных форм, а также асимптотических методов анализа. Следовательно, являются строго обоснованными с математической точки зрения.

Таким образом, результаты диссертационной работы являются новыми.

Теоретическая и практическая значимость работы

Полученные в диссертационной работе результаты представляют интерес для интегральной электроники как теоретические основы безмасочной и безрезистной литографии и как основы пучковых технологий. Результаты работы объясняют ряд экспериментальных фактов, таких как формирование террас и волнообразного нанорельефа. В ходе анализа моделей эрозии выделен управляющий параметр – коэффициент диффузии, определяющий устойчивость рассматриваемой системы, определены его критические значения и области устойчивости состояний равновесия. Полученные асимптотические формулы и дисперсионные соотношения позволяют рассчитать параметры волнообразного нанорельефа и выбрать режимы распыления, обеспечивающие требуемые геометрические параметры волн.

Результаты работы уже нашли применение при разработке ряда технологических процессов, основанных на самоорганизации волнообразного нанорельефа на поверхности кремния. Явление формирования высокоаспектного ВНР на поверхности твердых тел при ионной бомбардировке используется для повышения степени черноты и коэффициента поглощения солнечных элементов на основе кремния и других материалов. Технология формирования системы когерентных полос применяется для изготовления дифракционных и фазовых решеток с периодом до 20 нм для области экстремального ультрафиолета.

В перспективе процесс, известный как surface roughening – наноструктурирование поверхности ионным распылением может использоваться для повышения шероховатости поверхности и увеличения скорости пролиферации клеток и приживляемости имплантатов.

Методология и методы исследования

С точки зрения логической структуры деятельности, методология исследования основана на систематизации имеющихся данных по моделированию распыления твердых тел ионной бомбардировкой, проверке и анализе полученных результатов и определении спектра краевых задач, необходимых для

понимания процессов формирования нанорельефа при ионном распылении поверхности. В работе исследованы краевые задачи, моделирующие процессы ионного распыления поверхности на основе двух уравнений эрозии поверхности ионной бомбардировкой: уравнения Бредли и Харпера и нелокального уравнения эрозии.

Новым, с точки зрения подхода к теории распыления, является учет эффекта нелокальности процесса распыления, играющего существенную роль при формировании рельефа нанометрового масштаба. Как уже отмечалось, модель Бредли-Харпера является локальной, т.е. координаты точек падения первичного иона и выхода вторичного иона в ней совпадают, тогда как процесс распыления нелокален, что впервые было теоретически обосновано Петером Зигмундом. Для решения ряда краевых задач, там, где необходим учет эффекта нелокальности распыления, будет использована нелокальная модель эрозии, основанная на последовательном применении теории распыления П. Зигмунда.

Для решения поставленных задач в работе использованы современные методы анализа динамических систем с бесконечномерным фазовым пространством в сочетании с численными методами исследования дифференциальных уравнений. Были использованы следующие разделы качественной теории дифференциальных уравнений:

- метод интегральных многообразий;
- аппарат теории нормальных форм Пуанкаре-Дюлака;
- асимптотические методы анализа;
- спектральная теория дифференциальных операторов.

Эти методы позволят получить асимптотические формулы, а также алгоритмы для компьютерного анализа моделей формирования нанорельефа. Результаты анализа уравнения Бредли-Харпера и нелокального уравнения эрозии получены в форме, которая позволяет интерпретировать экспериментальные результаты и управлять параметрами формируемых наноструктур.

Положения, выносимые на защиту

Для нелокального уравнения эрозии показано существование некоторых видов неоднородных состояний равновесия, которые могут быть проинтерпретированы как плоскости и террасы. Определены условия их устойчивости. Получен безразмерный комплекс параметров, определяющих устойчивость состояний равновесия, и определены его критические значения.

Волновые решения пространственно-нелокального уравнения эрозии, линеаризованного на нулевом состоянии равновесия. Показано, что при потере устойчивости плоского профиля от состояния равновесия бифурцируют решения в виде высокомодовых бегущих волн.

Исследована периодическая краевая задача для уравнения Бредли-Харпера. При этом выведены условия, при которых может быть сформирован пространственно неоднородный (волновой) рельеф.

Для соответствующих решений краевой задачи приведены асимптотические формулы.

Приведены условия устойчивости соответствующих решений.

Степень достоверности и апробация результатов

Все полученные результаты строго обоснованы, в каждом параграфе присутствуют утверждения в виде лемм и теорем, которые имеют математические доказательства. Методики, примененные в данной работе, аргументированы и основаны на известных результатах качественной теории дифференциальных уравнений.

В работе использованы современные методы анализа динамических систем:

- метод интегральных многообразий;
- аппарат теории нормальных форм Пуанкаре-Дюлака;
- асимптотические методы анализа;
- спектральная теория дифференциальных операторов,

что позволило получить выносимые на защиту результаты. Результаты работы апробированы на научном семинаре «Нелинейной динамики и синергетики»

ЯрГУ, представлены на расширенном заседании кафедры микроэлектроники ЯрГУ и на международных научных конференциях:

1. A.S. Rudy, A.V. Metlitskaya Spatially Nonlocal Model of Surface Erosion by Ion Bombardment // Abstracts of SIMS Europe 2008, Muenster, September 14-16, 2008, p. 19.

2. А.С.Рудый, А.В. Метлицкая, П.А.Кузнецов О нелокальности процесса распыления и ее роли в формировании наноструктур при ионной бомбардировке поверхности // Сборник трудов научно-практической межрегиональной конференции «Квантовые компьютеры, микро- и нанoeлектроника», Ярославль, 22-23 сентября 2008 г., с. 125-131.

3. A.S. Rudy, A.V. Metlitskaya Surface Erosion by Moving Ion Beam // Abstracts of SIMS Europe 2010, Muenster, September 19-21, 2010, p. 19.

4. А.В. Метлицкая Формирования волнового нанорельефа при эрозии поверхности ионной бомбардировкой // Сборник тезисов международной молодежной научно-практической конференции «ПУТЬ В НАУКУ», Ярославль, 22-26 апреля 2013 г., с. 57-59.

5. Alexander Rudy, Anatolii Kulikov, Dmitrii Kulikov, Alena Metlitskaya Nanorelief formation within the Bradley-Harper model // Abstracts of SIMS Europe 2014, Muenster, September 7-9, 2014, p. 72.

Основные результаты данного исследования представлены в отчетах по государственному контракту № 14.740.11.0474 от «1» октября 2010 г. с Министерством образования и науки РФ, проводимого в рамках федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы по лоту «Проведение научных исследований целевыми аспирантами по следующим областям: нанотехнологии и наноматериалы, механотроника и создание микросистемной техники, создание биосовместимых материалов» по теме: «Моделирование процессов самоорганизации наноструктур при эрозии поверхности полупроводников ионным пучком».

Ряд результатов работы представлен в отчете по ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» ГК № П559 от «17» мая 2010 г. «Разработка теоретических основ пучковых технологий для наноэлектроники в рамках пространственно нелокальной модели эрозии поверхности ионной бомбардировкой».

ГЛАВА 1. ОБЗОР МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ЭРОЗИИ

Данная глава основана на обзоре Дж. Картера [20] – ведущего эксперта в области распыления поверхности ионной бомбардировкой. Обзор Дж. Картера содержит исчерпывающий перечень работ, внесших вклад в развитие теории эрозии поверхности ионной бомбардировкой и самоорганизации диссипативных структур. В нем в хронологическом порядке представлена история зарождения и развития моделей эрозии поверхности, подвергнутой ионной бомбардировке, изложены общепризнанные на настоящий момент подходы к ее математическому описанию. Однако глава не является простым переводом обзора Дж. Картера, т.к. изменена структура изложения материала и добавлены авторские комментарии, указывающие на некоторые недочеты существующих моделей эрозии поверхности ионной бомбардировкой. Кроме того, исправлены очевидные ошибки в уравнениях, приведенных в обзоре Дж. Картера.

1.1. Развитие теории распыления поверхности ионной бомбардировкой

Первое зарегистрированное наблюдение процесса распыления относится к 1852 году и принадлежит В. Грове [22], который обратил внимание на распад катодов в трубках тлеющего разряда. Вскоре было установлено, что этот процесс вызван ударами высокоэнергетических ионов о катод, выбивающих атомы поверхности. Но многие из ранних исследований давали ненадежные и невоспроизводимые результаты, пока не стало понятно (Пеннинг и Моубис 1940), что давление в этих устройствах было слишком большое, а длина свободного пробега выброшенных атомов была настолько маленькая, что многие из распыленных атомов возвращались на поверхность. В течение 150 лет с момента первого наблюдения проводились многочисленные, более тщательно разработанные экспериментальные исследования параметров процесса распыления, включая измерения коэффициента распыления (количество выбитых атомов, кластеров атомов или молекул, приходящихся на один падающий ион), а также измерения распределения энергии, направления эмиссии и заряда

возбужденных состояний вторичных ионов и их зависимости от параметров первичных ионов и мишени в широком диапазоне значений. В число этих переменных входит масса первичных ионов, их тип, энергия, азимутальные и полярные углы относительно поверхностной нормали и заданного кристаллографического направления поверхности, плотности потока ионов и массы подложки, ее типа, кристаллографической ориентации и температуры.

В результате этих исследований появилось более ясное понимание физических процессов, ответственных за распыление. Существует огромное количество обзоров по данной теме, часть которых будет рассмотрена ниже (Картер и Коллигон 1968, Бериш 1981, Залм 1989). Поскольку процесс распыления ведет к эрозии подложки, появляется возможность модификации морфологии поверхности, что и составляет предмет данного обзора. Чтобы лучше оценить, как происходит развитие морфологии поверхности, как оно может быть предсказано, проконтролировано и как, в конечном счете, поверхность может быть приведена к требуемому виду, полезно проанализировать некоторые из наиболее значимых особенностей процесса распыления и модели, предложенные для объяснения этих особенностей. Они будут представлены в следующем разделе и сопровождаются оценкой локальной скорости эрозии; здесь предполагается, что коэффициент распыления зависит только от локального угла бомбардировки поверхности ионным пучком. Это предположение, допускающее развитие поверхности (как в пространстве, так и во времени), позволяет рассматривать ее как перемещающийся волновой фронт, вследствие чего можно применять некоторые оптические методы. В частности, для предсказания развития поверхности может использоваться метод характеристик или восстановление волнового фронта методом элементарной волны Гюйгенса. Оба способа достаточно хорошо изучены, и выбор наиболее подходящего метода будет проиллюстрирован применительно к конкретной системе [20].

Существует множество теорий и моделей, объясняющих основные особенности процесса распыления, но в настоящее время наиболее широко распространены теории, разработанные Томпсоном (1959) и Зигмундом (1969),

идея которых заключается в описании радиационного разрушения в объеме материала. Если энергии сталкивающегося с поверхностью иона достаточно для преодоления отталкивающего потенциального барьера, создаваемого поверхностными атомами, то он проникнет в твердое тело, будучи отклоненным своим первым столкновением с поверхностным атомом. Он будет продолжать двигаться в твердом теле, теряя энергию в последующих столкновениях и отклонениях, до тех пор, пока не придет, в конечном счете, в состояние покоя, когда его кинетическая энергия слишком мала, чтобы преодолеть внутренние потенциальные барьеры. Энергия, переданная атомам твердого тела в процессе торможения, может быть достаточно велика, чтобы выбить их из положения равновесия. При каждом столкновении могут быть образованы вакансии и атом отдачи. Если атомы отдачи обладают достаточным запасом энергии, то они вызовут дальнейшие смещения атомов, называемое столкновительным каскадом. При этом будет возрастать количество атомов отдачи, а их энергия будет постепенно убывать. В конечном счете, энергия атомов отдачи сама собой рассеивается в процессах столкновения. Эта самая быстрая или столкновительная фаза занимает порядка 10^{-15} с. Объем, занятый этими баллистическими процессами, зависит от энергии ионов и их массы, а также массы атомов мишени, и может быть рассчитан как пространственное распределение энергии, переданной атомам мишени (Уинтербон и др. 1970).

Эти вычисления могут быть наиболее просто и точно выполнены, в том случае если энергии иона и атома не слишком малы, и в то же время массы иона и атомов мишени не слишком велики, тогда средние расстояния, на которых происходят последовательные столкновения, будут больше чем межатомные расстояния твердого тела. В этом случае каскад столкновений может рассматриваться как разреженный или линейный, а эквивалентное условие для локальной плотности энерговыделения состоит в не превышении соответствующих термодинамических параметров твердого тела, например, удельной теплоты плавления. Если это требование не выполняется, то событие будет правильнее рассматривать как энергетический выброс и перераспределение

энергии. Это относится как к столкновительной, так и к более поздней фазе процесса, который может быть приближенно описан в рамках формализма теплопередачи (Сейтц и Козлер 1956, Зигмунд 1974).

Поскольку места проникновения ионов в твердое тело будут статистически распределены, индивидуальные ионные траектории, их конечные точки, и параметры столкновительного объема будут также статистически распределенными. Но для большого количества событий (числа соударений) можно оценить средние значения этих параметров и моменты более высокого порядка. В линейном каскадном режиме, область соударений имеет приблизительно эллипсоидальную форму. Поверхности одинакового энерговыделения представляют собой эллипсоиды вращения с большой осью, совпадающей с направлением движения ионов, центры которых расположены ниже поверхности, на глубине, увеличивающейся с ростом энергии ионов.

В результате такого распределения энергии, атомы на поверхности, получившие энергию и направленный к поверхности импульс, достаточные для преодоления энергии связи, будут выброшены или распылены с поверхности. Они будут распределены по энергии, направлению эмиссии и по числу атомов на падающий ион в силу статистической природы столкновительных процессов. Тем не менее, можно определить средний коэффициент распыления Y , который будет линейно зависеть от скорости энерговыделения в упругих соударениях вблизи поверхности и будет обратно пропорционален энергии связи атомов мишени с поверхностью.

Кроме того, поскольку ось усредненного столкновительного каскада совпадает с направлением падения ионов, энергия, выделенная вблизи поверхности, будет зависеть от угла бомбардировки, а следовательно коэффициент распыления будет иметь вид $Y(\Theta)$. Простые геометрические построения показывают, что при возрастании Θ от первоначального нулевого значения при нормальном падении ионов, область пересечения эллипсоидального каскадного объема с поверхностью увеличиваются так, что коэффициент распыления тоже увеличивается. Однако, если угол падения будет и дальше

возрастать, то атомы отдачи, образованные вблизи поверхности, будут покидать ее без генерации более высоких поколений атомов отдачи. Таким образом, происходит сокращение всей совокупности атомов отдачи и уменьшение коэффициента распыления. Наконец, с приближением угла падения ионов к скользящему углу, растет количество отраженных ионов, а коэффициент распыления стремится к нулю. Это поведение коэффициента распыления изображено на рис. 2, заимствованном из экспериментальных работ по распылению Al, Ti, Ta и Ag низкоэнергетическими (1,05 кэВ) ионами Ar^+ (Очеснер 1975). При таких низких энергиях, распыление может быть произведено гораздо меньшим числом столкновений типа ион-атом и атом-атом вблизи поверхности, чем в каскадном приближении, рассмотренном выше. Из рис. 2 видно, что для не слишком больших углов падения экспериментальные данные (Очеснер 1975) $Y(\Theta)$ могут быть аппроксимированы зависимостью $\cos^{-1} \Theta$.

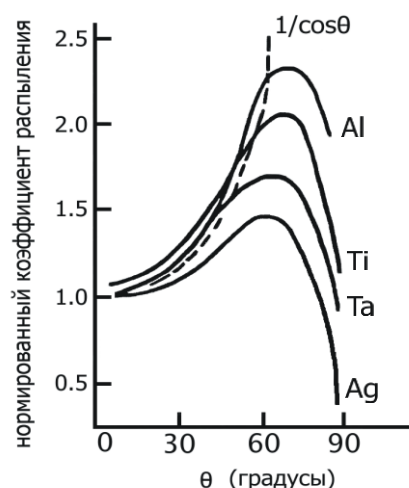


Рисунок 2 - Коэффициент распыления, нормированный к единице, для нормального падения ионов на поверхность, являющийся функцией угла падения Θ по отношению к нормали поверхности в случае бомбардировки поликристаллов Al, Ti, Ta и Ag ионами Ar^+ с энергией 1,05 кэВ (из обзора Дж. Картера [20])

Данный подход, справедливый в предположении, что мишень является бесструктурной, может быть приспособлен для описания выхода ионов из кристаллических материалов. В случае, если ионы падают параллельно или почти параллельно кристаллическим рядам и плоскостям, межатомные силы этих рядов и плоскостей могут вынуждать ионы совершать колебательные движения, в процессе их перемещения внутрь кристалла посредством каналирования (Робинсон и Оуэн 1963, Леманн и Лейбфрид 1965, Линдхард 1965). Эти направляющие структуры, ограничивающие сближение между ионами и атомами мишени, позволяют ионам проникать более глубоко в кристалл и уменьшают энерговыделение вблизи поверхности. В результате коэффициенты распыления уменьшаются. Это наиболее заметно для открытых или прозрачных кристаллических поверхностей с низкой поверхностной плотностью атомов и для всех случаев, когда ионы падают параллельно атомным рядам и плоскостям. Последнее ведет к более сложному поведению коэффициента распыления при изменении полярного и азимутального углов падения ионов, чем то, которое предполагалось выше и является зависящим от кристаллографии поверхности (Ондерделинден 1966, Робинсон 1981) [20].

Когда условия для линейного каскадного процесса не выполнены и плотности локального энерговыделения велики, обычно наблюдаемые коэффициенты распыления оказываются намного выше, чем предсказывает формализм линейных каскадов (Андерсен и Бей 1973, Томпсон и Джохар 1979, Андерсен и др. 1998). Текущие модели такого возрастания основаны на образовании локальных областей перегрева с последующим тепловым переносом и эффективным возрастанием испарения или возгонки с поверхности (Зигмунд и Клаузен 1981, Клаузен 1982, Картер 1980). Вообще говоря, эти условия редко встречаются в современных прикладных задачах распыления и эрозии, вследствие чего не будут рассмотрены в дальнейшем.

Другие эффекты, возникающие в ходе распыления при любых условиях выделения энергии, могут иметь значение в определении развития поверхностной морфологии, и они связаны с процессами смещения атомов. Так как распыление

включает в себя выброс поверхностных атомов, то происходит неизбежное образование вакансий и, кроме того, одновременное создание вакансий и дефектов внедрения под поверхность. Некоторые из точечных дефектов могут рекомбинировать и аннигилировать или объединяться в протяженные дефекты. Другие могут мигрировать к поверхности и в случае попадания в междоузлие образуют радиационно-индуцированные адатомы. Оба типа дефектов могут перемещаться по поверхности и для некоторых кристаллографических поверхностей, которые будут рассмотрены ниже, их перемещение не может быть полностью случайным, а должно быть вынужденным [20].

Случайная и вынужденная диффузии могут приводить к весьма загадочным, но воспроизводимым разнообразным регулярным поверхностным структурам, которые могут найти полезное применение. Вдобавок ко всему, эти дефекты, к которым можно отнести незадействованные или оборванные химические связи и локальную перегруппировку атомов, могут влиять на реакции, происходящие на поверхности. В число таких реакций может входить возникновение предпочтительных мест зародышеобразования, если при распылении имеет место соосаждение атомов, а также изменение скоростей газофазных химических реакций и травления, если распыление происходит в присутствии химически активных паров. В последнем случае процесс физического распыления заменяется на радиационно-опосредованное химическое распыление. Наконец, когда падающие ионы проникают и накапливаются в материале подложки, скорость потери энергии последующими ионами, будет изменяться, вследствие чего изменится коэффициент распыления материала подложки. В частности, в веществах с ковалентной связью накопление дефектов может привести к фазовой нестабильности и переходу вещества в аморфное состояние. Потеря кристалличности может изменить процесс каналирования, который, в свою очередь, изменит коэффициент распыления подобных материалов.

На основе приведенного короткого обзора процесса одиночного соударения иона с поверхностью и последующих процессов распыления можно перейти к обобщению для усредненных эффектов в случае соударений многих ионов. Если

предположить, что однородный в пространстве и во времени пучок ионов с пространственно-усредненной плотностью потока J падает вдоль направления Oz на элемент поверхности, который наклонен под полярным углом Θ к плоскости xOy , то нормаль к поверхности, будет наклонена под соответствующим углом к оси z . И если среднее значение коэффициента распыления $Y(\Theta)$ является функцией только этого полярного угла, то скорость локальной эрозии вдоль нормали к поверхности $\vec{n}$ (рис. 3) вычисляется по формуле

$$c = \frac{JY(\Theta)\cos\Theta}{\rho}, \quad (3)$$

где ρ – плотность атомов в подложке, тогда как плотность потока, приходящаяся на элемент поверхности, уменьшается при проектировании этого элемента на плоскость xOy . Эквивалентная скорость эрозии поверхности в направлении Oz или скорость уменьшения высоты поверхности при фиксированных (x, y) равна

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{c}{\cos\Theta} = \frac{JY(\Theta)}{\rho}. \quad (4)$$

Если, с другой стороны, однородный поток ионов той же плотности падает в направлении, образующем полярный угол Θ_0 с осью Oz , но с тем же азимутом, что и рассматриваемый элемент поверхности, то эквивалентная скорость уменьшения высоты поверхности равна

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{JY(\Theta - \Theta_0)\cos(\Theta - \Theta_0)}{\rho\cos\Theta_0} = \frac{JY(\Theta - \Theta_0)(\cos\Theta + \sin\Theta_0\operatorname{tg}\Theta)}{N} \quad (5)$$

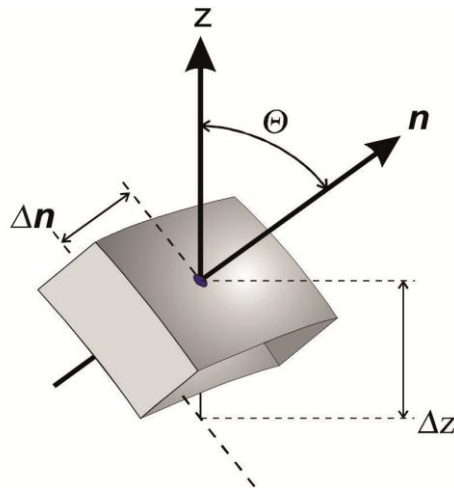


Рисунок 3 - Смещение элемента распыляемой поверхности вдоль нормали к поверхности n и вдоль оси z

Заметим, что уравнения, приведенные в обзоре Картера [20], содержат очевидные ошибки. Во-первых, в уравнении (4) правая часть должна быть отрицательной, т.к. речь идет о понижении поверхности за счет распыления. Предположение, что ось z направлена вниз, не соответствует последующим выражениям. Во-вторых, в уравнении (5) в знаменателе должен быть косинус Θ , а не Θ_0 (см., например, (4), (7) и рис. 3). Таким образом, уравнение (5) должно иметь вид

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{JY(\Theta - \Theta_0)\cos(\Theta - \Theta_0)}{\rho \cos \Theta} = -\frac{JY(\Theta - \Theta_0)(\cos \Theta_0 + \sin \Theta_0 \operatorname{tg} \Theta)}{\rho}. \quad (6)$$

1.2. Стохастические и релаксационные эффекты высшего порядка

Подход к описанию мелкомасштабных флуктуаций основан на учете как случайных возмущений и примесей так и увеличения эрозии в некоторых областях (Стьюарт и Томпсон). Согласно Дж. Картеру [20] ионы достигают распыляемой поверхности беспорядочно в пространстве и во времени, а сама поверхность состоит из рядов дискретных атомов, вследствие чего величина коэффициента распыления является не детерминированной, а распределенной

около среднего значения. Поэтому процесс эрозии является стохастическим и может описываться как шумовой процесс.

Беннинговен (1971) использовал это описание при оценке способа, которым первоначально плоская поверхность эродирует в процессе ионной бомбардировке при послойном анализе состава материала методами вторичной ионной масс-спектрометрии. Беннинговен предположил, что подложка должна представлять собой систему «горизонтальных» атомных слоев, лежащих в плоскости xOy . Когда атомы эродированы из первого слоя, то второй слой частично остается незащищенным от распыления и, следовательно, нижележащие слои будут проявляться с вероятностью, пропорциональной толщине слоя покрывающих их атомов. В результате поверхность становится неровной вместе с распределением слоев по глубине, которое при небольших флюенсах описывается распределением Пуассона по глубине, а с увеличением плотности потока ионов переходит в распределение Гаусса.

Эти статистические результаты подобны тем, которые можно получить, используя модель подложки с «вертикальными» слоями при беспорядочном падении частиц в местах распыления поверхности. В рамках данного подхода средняя плотность потока ионов должна быть заменена на флуктуирующую величину для определения скоростей эрозии, в результате чего, получается система, в которой шум носит мультипликативный характер (т.е. флуктуации плотности потока ионов перемножаются с флуктуациями коэффициента распыления, обусловленными шероховатостью поверхности). Однако при теоретическом исследовании поверхностного распыления Лоритсен и др. (1996) показали, что с некоторой небольшой погрешностью результирующий шум может рассматриваться как величина аддитивная. Таким образом, среднее значение плотности потока ионов может использоваться, как и прежде, для определения скоростей эрозии, однако добавочный стохастический член $\eta(x,t)$ обязательно должен быть включен в описание развития рельефа поверхности. В предположении, что статистика падения ионов подчиняется распределению Гаусса, стандартное отклонение шумового члена эквивалентно средней скорости

эрозии плоской поверхности, однако, поскольку система является стохастической, неоднородности на поверхности будут возникать случайным образом относительно среднего профиля.

Главный недостаток этого подхода заключается в том, что общие представления о микроскопических флуктуациях поверхности не могут быть описаны с помощью каких-либо конкретных формул для хотя бы приближенного описания структуры поверхности. Следует отметить, что стохастический подход к детерминированным процессам всегда применяется при недостаточном понимании физического явления и невозможности его формального описания. Поэтому дальше стохастический подход не используется, а рассматривается образование упорядоченного рельефа в рамках детерминистического подхода к описанию эрозии поверхности.

Зигмунд [17] показал, что поскольку энергия, передаваемая падающим ионом, пространственно распределена внутри мишени, то коэффициент распыления будет зависеть от рельефа поверхности в некоторой окрестности точки падения. Подобная зависимость обусловлена наличием выступов на поверхности, в которые частично попадают столкновительные каскады. Такие области распыляются медленнее, чем впадины, что потенциально ведет к развитию неустойчивости распыляемого профиля.

Впоследствии Картер и др., аппроксимируя эллиптическую поверхность постоянной плотности энерговыделения сферической, показали, что коэффициент распыления может быть описан суммой компоненты зависящей от наклона поверхности и компоненты, линейно зависящей от локальной кривизны. Одновременно М. Бредли и Дж. Харпер (1988) [14] развили более точное описание, основанное на представлении об эллипсоидальных контурах плотности энерговыделения, и оценили зависимость коэффициента распыления и скорости эрозии от градиента и кривизны поверхности в терминах параметров столкновительных каскадов. В данном описании детерминистическая скорость эрозии описывается выражением

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{JY(\Theta)}{N \cos \Theta} [\cos \Theta - \Gamma_x(\Theta) a K_x - \Gamma_y(\Theta) a K_y], \quad (7)$$

где K – это кривизна в направлениях x и y , $\Gamma(\Theta)$ – некоторая теоретически определяемая функция от аргумента Θ , линейно зависящая от размеров столкновительного каскада, a – средняя глубина столкновительных каскадов.

Если поверхностные градиенты малы, то локальная кривизна K может быть аппроксимирована выражениями

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \text{ и } \frac{\partial^2 h}{\partial y^2}. \quad (8)$$

Еще раз отметим, что согласно М. Бредли и Дж. Харперу [14] при нормальном угле бомбардировки $\Gamma < 0$, и только при скользящих углах бомбардировки $\Gamma > 0$. Если правильно расставить знаки в уравнении (7), то знаки при вторых производных будут отрицательными. Выше уже говорилось, что в этом случае задача Коши является некорректной.

Позднее Макеев и Барабаси (1997) использовали подобный подход, однако, описывали поверхность в терминах Тэйлоровского разложения в определенной точке поверхности. Они пришли к выводу, что следующие члены

$$\frac{\partial^4 h}{\partial x^4} \text{ и } \frac{\partial^4 h}{\partial y^4} \quad (9)$$

также важны для определения скорости локальной эрозии, но противоположны по знаку членам второго порядка и ведут к стабилизации поверхности. В то время, как Картер (1999) считает, что частные пространственные производные высших порядков не дают особого вклада в скорость эрозии, необходимо понимать, что именно они определяют динамику задачи об эрозии поверхности ионной бомбардировкой.

Эффекты, описываемые производными высшего порядка, зависят от деталей процесса энергоснабжения и их влияния на коэффициент распыления, кроме того, некоторые поверхностные атомные отдачи, приведенные в движение столкновительными процессами, могут оказаться неспособными преодолеть поверхностный энергетический барьер и будут двигаться параллельно поверхности. Будет возникать направленный поток таких атомов отдачи вместе со случайной компонентой, которая представляет собой обусловленный столкновениями эквивалент диффузионного процесса. Можно показать, что это ведет к процессу локального увеличения числа атомов в большей степени, чем эрозия, что приводит к скорости нормального поверхностного роста пропорциональной пространственной производной второго порядка от высоты поверхности (Картер и Вишняков 1996).

Все эти процессы появляются в результате перераспределения атомов или в направлении бомбардировки, или в перпендикулярном ей направлении, и являются по своей сути тепловыми процессами. Кроме того, могут иметь место термически активированные процессы, приводящие в итоге к поверхностной релаксации. Если температура поверхности высока настолько, что атомы могут испаряться с поверхности, и давление окружающего пара так велико, что может происходить пере конденсация, то процессы роста осуществляются со скоростью, пропорциональной плотности поверхностной свободной энергии и пространственной производной второго порядка (Виллаин 1991, Карунасари и др. 1989). При низких температурах объемная диффузия может привести к атомному переносу по нормали к поверхности, что в свою очередь ведет к локальному росту неоднородностей со скоростью, пропорциональной пространственной производной третьего порядка от их высоты (Мюллинс 1959). В то же время при низких температурах, которые наиболее часто встречаются на практике, процессы преобладающей поверхностной релаксации являются следствием поверхностной атомной диффузии. Эта диффузия появляется благодаря изменению локального химического потенциала μ поверхности, который в первом приближении может быть записан как

$$\mu = \mu_0 + \Omega\gamma(K_x + K_y), \quad (10)$$

где μ_0 – химический потенциал плоской поверхности по отношению к окружающему ее пространству, Ω – атомный объем, γ – плотность поверхностной свободной энергии. Градиент химического потенциала поверхности приводит к росту плотности потока ионов, а градиент плотности потока ионов приводит к нормальной скорости роста на поверхности, описываемой (Мюллинс 1959, Картер 1976) выражением

$$\frac{\gamma n}{N^2 kT} \left[D_x \frac{\partial^2 K_x}{\partial s_x^2} + D_y \frac{\partial^2 K_y}{\partial s_y^2} \right], \quad (11)$$

где n – плотность диффундирующих поверхностных атомов, k – постоянная Больцмана, T – температура подложки, D_x , D_y – коэффициенты поверхностной диффузии соответственно в направлениях x и y , которые могут отличаться, если процесс диффузии изотропен, s_x и s_y – расстояния, измеряемые вдоль поверхности. Поверхностные коэффициенты диффузии будут зависеть от температуры как

$$D = D_0 \exp\left(\frac{-Q}{kT}\right), \quad (12)$$

где Q – энергия активации для диффузии. Если градиент поверхности мал, то дробные члены в формуле (11) можно заменить на члены вида $D\partial^4 h/\partial x^4$. Поскольку, если поверхностные атомы перемещаются в ходе столкновений и их движение управляется градиентом химического потенциала, то мы должны заменить D на эффективный баллистический коэффициент диффузии.

Кроме того, дефекты возникающие в объеме подложки, мигрируют к поверхности и формируют адатомы или дефекты, диффундирующие поперек поверхности (Мичли и Комса 1991, Эрлебачер и др. 1999). Этот процесс влияет на число подвижных образований в большей степени, чем эффективный коэффициент диффузии. Что в свою очередь приводит к зависимости скорости роста неоднородностей от частной производной четвертого порядка. С другой стороны, если сам процесс перемещения перераспределяет атомы по поверхности, следует ожидать повышения эффективного коэффициента диффузии, аналогично тому как локальная кривизна поверхности влияет на коэффициента распыления, поскольку оба процесса (диффузия и распыление) являются результатом поверхностного энерговыделения. В этом случае скорость нормального поверхностного роста, пропорциональная частной производной четвертого порядка от высоты рельефа поверхности, была вычислена Дж. Картером (Картер 1998).

Предполагается, что в случае анизотропной среды процессы вышеописанной диффузии не имеют выделенных направлений для плотности потока ионов. Для некоторых материалов это допущение неверно (например, гранецентрированные кубические кристаллы), у которых существуют барьеры на границах атомных плоскостей. Этот барьер, известный как барьер Эрлиха-Свобельского (Эрлих и Худда 1966), получается в результате модификации атомных связей на границах атомных плоскостей. Атомы, мигрируя по плоскостям, имеют свойство прикрепляться к краям вышележащих плоскостей и образуют направленный восходящий поток атомов. В простейшем приближении (Виллайн 1991) величина атомного потока будет линейно зависеть от градиента поверхности. Таким образом, появится скорость локального роста, пропорциональная градиенту этого потока и, следовательно, пространственной частной производной второго порядка от высоты поверхности. Знак у производной такой же, как и у рассмотренного выше коэффициента распыления, зависящего от кривизны поверхности. Это может служить альтернативным механизмом дестабилизации морфологии поверхности. Однако направленный

поток является более сложной функцией градиента поверхности, нежели линейная зависимость. В связи с этим можно предложить несколько видов аппроксимаций высших порядков (Джонсон и др. 1994).

Как будет показано ниже, процесс дестабилизации поверхности может привести к различным видам морфологии поверхности, которые будут появляться вследствие зависимости коэффициент распыления от кривизны поверхности. В общем виде скорость локального нормального роста неоднородностей, причиной которого является поток ионов j_s , описывается выражением

$$\frac{\nabla j_s \cos \Theta}{N}. \quad (13)$$

В дополнение к эффектам диффузионного переноса в аморфных материалах могут наблюдаться эффекты релаксации неоднородностей посредством вязкого течения, возникающего вследствие миграции дефектов. Полупроводники, подвергнутые ионной бомбардировке, могут переходить в аморфное состояние. Вязкое течение в этих материалах и в полупроводниковых оксидах наблюдалось в исследованиях Волкерта (1991) и Сноксефа (1994). Следуя развитому ранее подходу к влиянию эффектов вязкого течения на развитие поверхностной морфологии, Мюллинс (1959) и Чесона и др. (1994) показали, что эти процессы приводят к нормальному росту неоднородностей со скоростью пропорциональной величине градиента поверхности. Впоследствии Картер (1997) показал, что эта скорость может быть выражена как

$$J \gamma \rho \cos \Theta, \quad (14)$$

где ρ – обусловленная бомбардировкой вязкость, приходящаяся на единицу плотности ионного потока, пропорциональная плотности нерегенерировавших дефектов на один падающий ион.

Если все вышеуказанные процессы дают вклад в модификацию морфологии поверхности, тогда общее нелинейное уравнение для описания развития локального рельефа поверхности, согласно Дж. Картеру [20], может быть получено путем объединения приведенных выше уравнений, т.е.

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -g - \beta_x \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| + \beta_y \left| \frac{\partial h}{\partial y} \right| + \delta_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \delta_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \kappa_x \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} + \kappa_y \frac{\partial^4 h}{\partial y^4} + \frac{\nabla j_x}{N} - \eta(x, y, t), \quad (15)$$

Уравнение (15) не может быть решено аналитическими методами и пока что численные методы также не применялись для решения уравнения в общем виде. Тем не менее, эти методы использовались для анализа и решения упрощенного варианта уравнения, являющегося его аппроксимацией для некоторых частных случаев

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -g - \beta_x \left| \frac{\partial h}{\partial x} \right| + \beta_y \left| \frac{\partial h}{\partial y} \right| + \delta_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \delta_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + k_x \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} + k_y \frac{\partial^4 h}{\partial y^4} + \frac{\nabla j_x}{N}, \quad (16)$$

где объемный коэффициент диффузии и процессы переконденсации и испарения не учитываются, g следует из уравнения (6), а коэффициенты β , δ , k вычисляются методами, описанными в обзоре Дж. Картера [20].

М. Бредли и Дж. Харпер (1988) [14] рассмотрели случай однородного ионного потока, падающего параллельно xOz плоскостям под углом Θ к оси Oz на поверхность, лежащую в плоскости Oy , полагая, что имеют место только распыление, зависящее от кривизны поверхности, и изотропная тепловая поверхностная диффузия. Авторы также предполагали, что градиенты поверхности настолько малы, что в уравнении (16) можно положить

$$\alpha \approx \tan \alpha \approx \sin \alpha \approx \frac{\partial h}{\partial x} \cos \alpha \approx 1 \quad (17)$$

и коэффициент распыления $Y(\Theta - \alpha)$ может быть разложен до первого порядка относительно $Y(\Theta)$ [20]. При этих обстоятельствах, уравнение (16) упрощается до следующего выражения

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} = & -\frac{JY(\Theta)}{N} + \frac{J}{N} \frac{\partial[Y(\Theta)\cos\Theta]}{\partial\Theta} \frac{\partial h}{\partial x} + \delta_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \delta_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} - \\ & -k \left(\frac{\partial^4 h}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 h}{\partial y^4} \right), \end{aligned} \quad (18)$$

где $k = D_s \gamma \nu / n^2 k_B T > 0$, D_s – поверхностная диффузия, γ – поверхностная свободная энергия, приходящая на единицу площади, ν – поверхностное натяжение [14].

Уравнение (18) было получено в работе [14] как линейное уравнение, где кривизна в направлении координатных осей вычисляется по «линеаризованной» формуле, т.е. полагается пропорциональной $\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$ и $\frac{\partial^2 h}{\partial y^2}$ соответственно. В этой работе выполнен элементарный анализ этого уравнения и выделен класс решений, который называют обычно «плоские бегущие волны». Если ввести некоторые обозначения, упрощающие его анализ

$$\alpha = \alpha(\Theta) = \frac{JY(\Theta)}{N}, \quad \beta = \beta(\Theta) = \frac{J}{N} \frac{\partial(Y(\Theta)\cos\Theta)}{\partial\Theta},$$

то уравнение (18) допускает решения вида

$$h_1(t, x, y) = -\alpha t.$$

Если положить

$$h(t, x, y) = -\alpha t + u(t, x, y),$$

то уравнение для $u(t, x, y)$ примет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \beta \frac{\partial u}{\partial x} + \delta_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \delta_y \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - k \Delta^2 u, \quad (19)$$

где Δ – оператор Лапласа.

Уравнение (19) имеет решения в виде плоских бегущих волн:

$$u = A \exp(\lambda t + i\omega_x x + i\omega_y y),$$

если выполняется соотношение

$$\lambda = i\beta\omega_x - \delta_x\omega_x^2 - \delta_y\omega_y^2 - k(\omega_x^2 + \omega_y^2)^2.$$

Критерием устойчивости решения служит неравенство

$$\operatorname{Re} \lambda = \lambda_1 = -\delta_x\omega_x^2 - \delta_y\omega_y^2 - k(\omega_x^2 + \omega_y^2)^2 < 0.$$

В работе [14] обсуждается вопрос о выборе параметров, при которых это неравенство выполнено. Этот анализ нельзя считать полностью окончательным в силу следующих аргументов.

Во-первых, такой анализ устойчивости нельзя априори считать полновесным, так как при его реализации исследована устойчивость решения

$h_1(t, x, y)$ лишь в классе плоских бегущих волн. Нет достаточных оснований считать, что все возмущения сводятся к возмущению вида $A \exp(i\omega_x x + i\omega_y y)$.

Во-вторых, уравнение (18) допускает и другие решения. Например,

$$h_2(t, x, y) = \alpha_0 t + \alpha_1 x + \alpha_2 y,$$

где α_0, α_1 связаны соотношением

$$\alpha_0 = -\alpha + \beta \alpha_1,$$

а α_2 – произвольная постоянная. Поэтому требуется более детальный анализ уравнения (18) для физически осмысленных решений этого уравнения.

Например, если рассмотреть лишь те решения (18), которые не зависят от y , то получим уравнение

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\alpha + \beta \frac{\partial h}{\partial x} + \beta_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - k \frac{\partial^4 h}{\partial x^4}. \quad (20)$$

Для этого уравнения возможны две ситуации. Можно рассмотреть случай, когда $x \in (-\infty, +\infty)$, т.е. распыляемая поверхность «бесконечна». Второй случай возникает, если $x \in [0; l]$, т.е. образец имеет длину l . Хорошо известно, что это две разные с точки зрения математики задачи, а выбор зависит от их физической постановки. При рассмотрении второго варианта, когда образец имеет длину l , исследование существенным образом зависит от выбора условий при $x = 0$, $x = l$.

Существует еще один аспект, связанный с рассмотрением подхода, предложенного в работе [14]. На самом деле М. Бредли и Дж. Харпер исходили из того, что дисперсия зависит от K_x, K_y – кривизны поверхности в направлении осей Ox, Oy , и в дальнейшем полагали, что обе кривизны в первом приближении

пропорциональны вторым производным. Более детальный учет кривизны в простейшем случае приведет к нелинейному варианту уравнению (19)

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\alpha + \beta \frac{\partial h}{\partial x} + \beta_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \left(1 + \frac{\partial h}{\partial x} \right)^{\frac{1}{2}} - k \frac{\partial^4 h}{\partial x^4}. \quad (21)$$

Исходя из общих соображений, в задачах эрозии поверхности более естественно использовать нелинейные уравнения, т.к. линейные уравнения не позволяют вычислить амплитуду рельефа. Вопрос о нелинейных слагаемых в уравнении (20) остается открытым, так как кроме нелинейности, обусловленной кривизной поверхности (21), могут быть и иные нелинейные слагаемые.

ГЛАВА 2. ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕЛОКАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ЭРОЗИИ

2.1. Вывод нелокального уравнения эрозии поверхности ионной бомбардировкой

В работах [19, 21] была предложена модель, в рамках которой исходная поверхность рассматривалась как суперпозиция $z(x, 0) = \bar{z}(x, 0) + \tilde{z}(x, 0)$ гладкого рельефа $\bar{z}(x, 0)$, для которого $a \ll R$, и малых возмущений $\tilde{z}(x, 0)$. Угол между локальной нормалью к поверхности и осью z составлял $\bar{\Theta} + \tilde{\Theta}$, где $\bar{\Theta}$ и $\tilde{\Theta}$ – углы между осью z и локальными нормальными к $\bar{z}(x, 0)$ и $\tilde{z}(x, 0)$, соответственно. Средняя протяженность возмущения

$$l = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_{i+1} - x_i), \quad (22)$$

где x_i определяется условием $z(x_i) = 0$, – величина порядка средней длины пробега иона $l \sim a$.

Если рассматривать поверхностную топографию $z(x, t)$ как суперпозицию $z(x, t) = \bar{z}(x, t) + \tilde{z}(x, t)$ микроскопического $\bar{z}(x, t)$ и субмикронного $\tilde{z}(x, t)$ рельефов (рис. 4), то угол наклона локальной нормали $\vec{n}$ к оси z может быть представлен как $\Theta = \bar{\Theta} + \tilde{\Theta}$. Также предполагается, что распыляемая среда является однородной, средняя длина пробега иона постоянна и равна $|\vec{l}|$, а поверхность постоянной энергии, выделяемой первичным ионом, имеет вид сферы. В соответствии с этими предположениями, центры сфер (центры энерговыделения) будут расположены на кривой, полученной трансляцией $\bar{z}(x, t)$ на вектор $\vec{l}$ (рис. 4). Если на поверхности, описываемой кривой $\bar{z}(x, t)$, образуется нанорельеф $\tilde{z}(x, t)$, то центры энерговыделения будут расположены на кривой, полученной трансляцией $\tilde{z}(x, t)$ на вектор $\vec{l}$ (рис. 4).

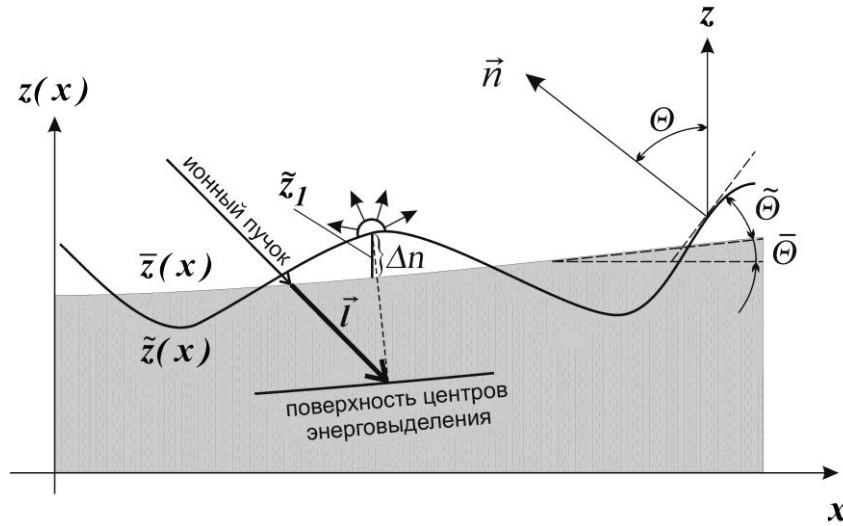


Рисунок 4 - Влияние субмикронной топографии z_1 в точке выхода вторичного атома x на коэффициент распыления в рамках модели Зигмунда

В рамках детерминистического подхода предполагается, что каждый центр энерговыведения приводит к эмиссии Y атомов из определенной точки поверхности. Эта точка расположена ближе других к данному центру, т.е. находится в месте пересечения нормали с поверхностью $\bar{z}(x,t)$. Тогда число атомов $d\bar{N}_s$, распыленных с элемента поверхности $d\bar{S}$, будет равно произведению числа центров энерговыведения на такой же площадке $d\bar{S}$, полученной трансляцией элемента $d\bar{S}$ на вектор $\vec{l}$, на коэффициента распыления $Y(\Theta_0 - \bar{\Theta})$.

Скорость движения элемента поверхности $d\bar{S}$ вдоль локальной нормали к $\bar{z}(x,t)$ выражается через произведение числа атомов, распыленных с элемента поверхности в секунду $d\bar{N}_s/dt$ и объема, занимаемого одним атомом в мишени $1/\rho$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{d\bar{N}_s}{dt} \frac{1}{\rho}, \quad (23)$$

где ρ – плотность атомов. Скорость эмиссии атомов с поверхности вычисляется как

$$\frac{d\bar{N}_s}{dt} = \frac{d\bar{N}_i}{dt} Y(\Theta_0 - \Theta), \quad (24)$$

где $d\bar{N}_i/dt$ – скорость генерации центров энерговыведения, участвующих в распылении данного элемента поверхности $d\bar{S}$. Таким образом, локальная скорость понижения поверхности без нанорельефа будет иметь вид

$$\frac{\partial \bar{z}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \frac{Y(\Theta_0 - \Theta)}{\cos \Theta} \frac{d\bar{N}_i}{dt}. \quad (25)$$

При выводе уравнения эрозии нанорельефа можно воспользоваться приведенной выше схемой, т.е. по-прежнему рассматривать распыление элемента $d\bar{S}$ поверхности $\bar{z}(x, t)$, но в коэффициенте распыления в выражении (24) учесть поправки, связанные с изменением высоты нанорельефа в точках выхода вторичного иона и внедрения первичного иона (рис. 5). С учетом зависимости от локальной топографии $\tilde{z}_1 = \tilde{z}(x)$ в точке выхода вторичного атома (рис. 4) и в точке внедрения первичного иона $\tilde{z}_2 = \tilde{z}(x - l_x)$ (рис. 5), коэффициент распыления в выражении (25) может быть представлен как $Y(\Theta_0 - \Theta) = Y[(\Theta_0 - \bar{\Theta}), \tilde{z}_1, \tilde{z}_2]$. Здесь $l_x = l \sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \cos \bar{\Theta}$ - параметр, физический смысл которого иллюстрирует рис. 6.

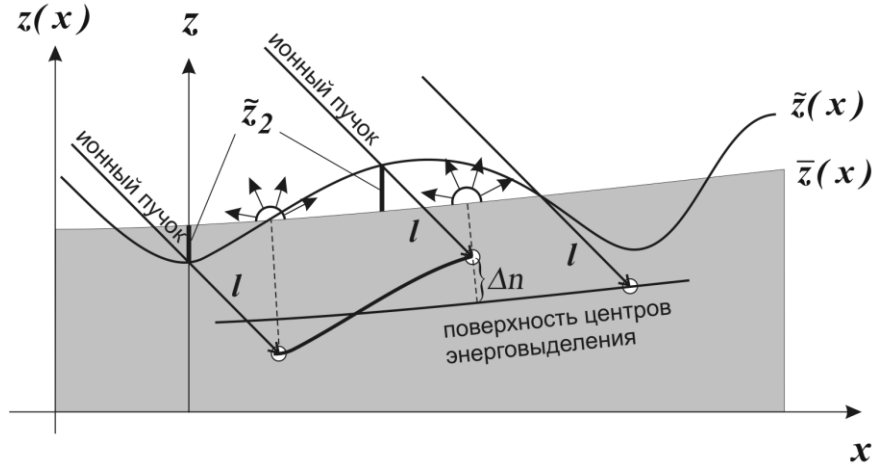


Рисунок 5 - Влияние субмикронной топографии $\tilde{z}_2$ в точке внедрения первичного иона $x-l_x$ на коэффициент распыления в точке x в рамках модели Зигмунда

Введенный выше коэффициент распыления – неизвестная функция локального угла бомбардировки и параметров $\tilde{z}_1$, $\tilde{z}_2$. При условии малости $\tilde{z}_1$, $\tilde{z}_2$ она может быть разложена в степенной ряд, ограниченный линейными членами

$$Y[\Theta_0 - \bar{\Theta}, \tilde{z}_1, \tilde{z}_2,] = Y(\Theta_0 - \bar{\Theta}) - \kappa \tilde{z}_1 + \kappa \tilde{z}_2, \quad (26)$$

где

$$\kappa = |(\partial Y / \partial n)(\partial n / \partial \tilde{z})|_{\tilde{z}=0} = \partial Y / \partial n | \cos \bar{\Theta}. \quad (27)$$

Здесь учтено, что согласно рис. 4, $\Delta n = \tilde{z}_1 \cos \bar{\Theta}$. Знак коэффициента разложения определяется физическими соображениями: минус при $\tilde{z}_1$ означает, что коэффициент распыления в точке x убывает с ростом $\tilde{z}_1$ и наоборот.

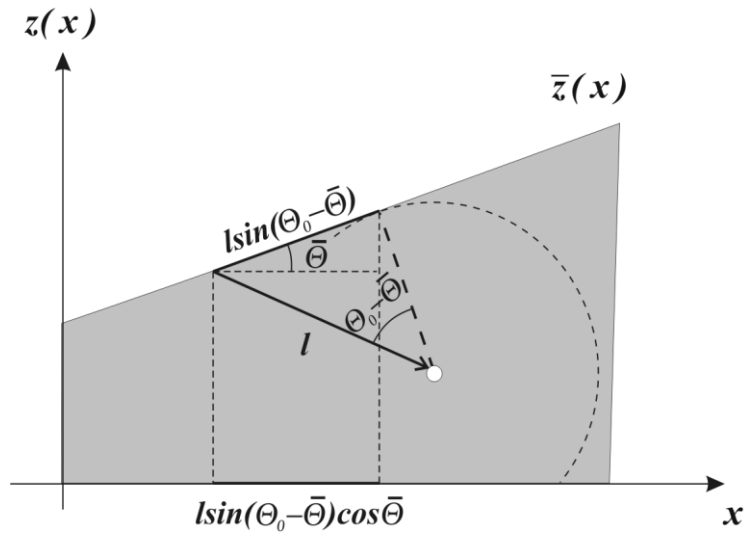


Рисунок 6 - Оценка параметра l_x в первом приближении, не учитывающем зависимость l_x от z_1 , z_2 и полагаящем, что изоэнергетические поверхности имеют форму сферы

Параметр κ может быть оценен разными способами, например, исходя из формулы Ямамуры [23].

$$Y(\Theta_0) = \frac{Y_0}{\cos^\beta \Theta_0} \exp(\alpha - \alpha / \cos \Theta_0). \quad (28)$$

С учетом соотношения $n = l \cos \Theta_0$ коэффициент распыления может быть представлен в виде функции n – глубины залегания центра энерговыведения

$$Y(n) = Y_0 l^\beta \frac{\exp(\alpha - \alpha l / n)}{n^\beta}. \quad (29)$$

Дифференцирование (29) по n приводит к выражению

$$\frac{\partial Y}{\partial n} = Y(\Theta_0) \frac{\alpha - \beta \cos \Theta_0}{l \cos^2 \Theta_0}. \quad (30)$$

Подчеркнем, что выражение (30), согласно рис. 4 имеет смысл производной по нормали к поверхности $\bar{z}(x,t)$. Поэтому, чтобы получить параметр κ уравнение (30) следует домножить на $\cos \bar{\Theta}$, а угол Θ_0 заменить на $\Theta_0 - \bar{\Theta}$

$$\kappa = \left| \frac{\partial Y}{\partial n} \right| \cos \bar{\Theta} = -Y(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \frac{\alpha - \beta \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})}{l \cos^2(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \cos \bar{\Theta}. \quad (31)$$

Если теперь вернуться к выражению (23) и повторить вывод уравнения (25) с учетом (26) и (31), то можно найти скорость эмиссии атомов с элемента $d\bar{S}$ поверхности $\bar{z}(x,t)$. Если $\tilde{\Theta}(x-l_x) = 0$, то число ионов эмитированных с площадки dS в одну секунду (рис. 7) определяется скоростью генерации центров энерговыведения $d\bar{N}_i / dt$ под элементом поверхности $d\bar{S}$. Последняя вычисляется как произведение плотности потока $J_0 \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})$ и площади элемента $d\bar{S}$:

$$\frac{d\bar{N}_i}{dt} = J_0 \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta}) d\bar{S}, \quad (32)$$

где $\Theta_0 - \bar{\Theta}$ угол между локальной нормалью и направлением бомбардировки. Если $\tilde{\Theta}(x-l_x) \neq 0$, то центры энерговыведения будут образовываться на элементе площадью $d\tilde{S}$, повернутом относительно $d\bar{S}$ на угол $\tilde{\Theta}$. Таким образом, угол между нормалью к $d\tilde{S}$ и направлением бомбардировки будет равен $\Theta_0 - \bar{\Theta} - \tilde{\Theta}$. С учетом соотношения $d\bar{S} = \cos \tilde{\Theta} d\tilde{S}$ выражение для скорости генерации центров энерговыведения на элементе $d\tilde{S}$ примет вид

$$\frac{d\tilde{N}_i}{dt} = J_0 [\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta}) + \sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \operatorname{tg} \tilde{\Theta}] d\bar{S}. \quad (33)$$

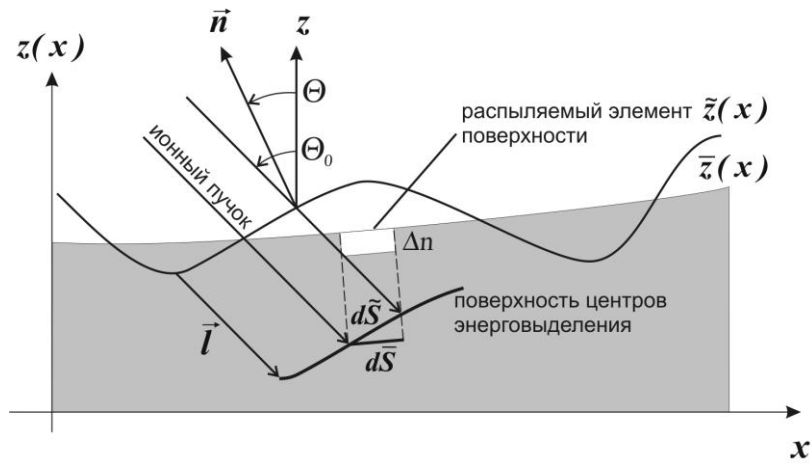


Рисунок 7 - Влияние угла наклона субмикронного рельефа в точке внедрения иона $x - l_x$ на скорость распыления в точке x

В уравнении (33) $\tilde{\Theta}$ – угол наклона нанорельефа в точке внедрения первичного иона $x - l_x$, поэтому целесообразно выразить $\text{tg}\tilde{\Theta}$ через производную $\tilde{z}'_2$. Из очевидных соотношений $\Theta = \bar{\Theta} + \tilde{\Theta}$ и

$$\bar{z}' + \tilde{z}'_2 = \frac{\text{tg}\bar{\Theta} + \text{tg}\tilde{\Theta}}{1 - \text{tg}\bar{\Theta}\text{tg}\tilde{\Theta}}, \quad (34)$$

следует, что

$$\tilde{z}'_2 = \frac{\text{tg}\tilde{\Theta} + \text{tg}^2\bar{\Theta}\text{tg}\tilde{\Theta}}{1 - \text{tg}\bar{\Theta}\text{tg}\tilde{\Theta}}. \quad (35)$$

Уравнение (35) приводит к выражению

$$\text{tg}\tilde{\Theta} = \frac{\cos^2\bar{\Theta}\tilde{z}'_2}{1 + \tilde{z}'_2 \sin\bar{\Theta}\cos\bar{\Theta}}. \quad (36)$$

Подстановка (36) в уравнение (33) дает

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{N}_i}{dt} &= J_0 \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta} - \tilde{\Theta}) d\tilde{S} = \\ &= J_0 \left[\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta}) + \sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \frac{\cos^2 \bar{\Theta} \tilde{z}'_2}{1 + \tilde{z}'_2 \sin \bar{\Theta} \cos \bar{\Theta}} \right] d\bar{S}. \end{aligned} \quad (37)$$

Следовательно, число атомов выбиваемых с единицы поверхности, согласно (25), будет равно

$$\frac{dN_s}{dt} = J_0 Y(\Theta_0 - \bar{\Theta}, \tilde{z}_1, \tilde{z}_2) \left[\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta}) + \sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \frac{\cos^2 \bar{\Theta} \tilde{z}'_2}{1 + \tilde{z}'_2 \sin \bar{\Theta} \cos \bar{\Theta}} \right]. \quad (38)$$

В соответствии с уравнениями (24), (38) скорость движения единичного элемента поверхности вдоль локальной нормали равна

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{J_0}{\rho} Y(\Theta_0 - \bar{\Theta}, \tilde{z}_1, \tilde{z}_2) \left[\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta}) + \sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \frac{\cos^2 \bar{\Theta} \tilde{z}'_2}{1 + \tilde{z}'_2 \sin \bar{\Theta} \cos \bar{\Theta}} \right], \quad (39)$$

а вертикальная скорость эрозии с учетом соотношения (26) составляет

$$\begin{aligned} \frac{\partial z}{\partial t} &= -\frac{J_0}{\rho \cos \bar{\Theta}} [Y(\Theta_0 - \bar{\Theta}) - \kappa(\tilde{z}_1 - \tilde{z}_2)] \times \\ &\times \left[\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta}) + \sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \frac{\cos^2 \bar{\Theta} \tilde{z}'_2}{1 + \tilde{z}'_2 \sin \bar{\Theta} \cos \bar{\Theta}} \right]. \end{aligned} \quad (40)$$

Если учесть соотношение $z = \bar{z} + \tilde{z}$, то в уравнении (40) можно выделить слагаемые, описывающие скорость понижения микро- и нанорельефа

$$\frac{\partial \bar{z}}{\partial t} = -\frac{J_0}{\rho} Y(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \frac{\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})}{\cos \bar{\Theta}} \quad (41)$$

$$\frac{\partial \tilde{z}}{\partial t} = -\frac{J_0}{\rho \cos \bar{\Theta}} \left[-\kappa(\tilde{z}_1 - \tilde{z}_2) \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta}) + Y \sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \frac{\cos^2 \bar{\Theta} \tilde{z}'_2}{1 + \tilde{z}'_2 \sin \bar{\Theta} \cos \bar{\Theta}} - \right. \\ \left. -\kappa(\tilde{z}_1 - \tilde{z}_2) \sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \frac{\cos^2 \bar{\Theta} \tilde{z}'_2}{1 + \tilde{z}'_2 \sin \bar{\Theta} \cos \bar{\Theta}} \right]. \quad (42)$$

Из них соотношение (41), описывающее эволюцию микроскопического рельефа, совпадает с известным уравнением (1).

Чтобы получить окончательный вид уравнения эрозии остается раскрыть скобки в (42) и подставить выражение (31)

$$\frac{\partial \tilde{z}}{\partial t} = -\frac{J_0 Y}{\rho} \frac{\alpha - \beta \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})}{l \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} (\tilde{z}_1 - \tilde{z}_2) - \\ -\frac{J_0 Y}{\rho} \cos \bar{\Theta} \sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \left[1 + \frac{\alpha - \beta \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})}{\cos^2(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \cos \bar{\Theta} \frac{\tilde{z}_1 - \tilde{z}_2}{l} \right] \frac{\tilde{z}'_2}{1 + \tilde{z}'_2 \sin \bar{\Theta} \cos \bar{\Theta}} \quad (43)$$

Для удобства правая часть уравнения (43) разбита на линейное и нелинейное слагаемые, но уравнение может быть записано и в более компактном виде

$$\frac{\partial \tilde{z}}{\partial t} = \frac{J_0 Y}{\rho} [\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})] \left\{ \frac{\tilde{z}_1 - \tilde{z}_2}{l} - \frac{\sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \cos \bar{\Theta}}{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \times \right. \\ \left. \times \left[1 - \frac{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})}{\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \cos \bar{\Theta} \frac{\tilde{z}_1 - \tilde{z}_2}{l} \right] \frac{\tilde{z}'_2}{1 + \tilde{z}'_2 \sin \bar{\Theta} \cos \bar{\Theta}} \right\}. \quad (44)$$

Уравнения (41), (44) представляют собой математические модели эволюции поверхностной топографии микроскопического и нанометрового масштаба при ионном распылении поверхности. Уравнение (44) принадлежит классу пространственно-нелокальных уравнений и описывает эволюцию возмущений нанометрового масштаба, обусловленную нелокальностью процесса распыления. Действительно, если в уравнении (44) положить $\Theta_0 = \bar{\Theta} = 0$ и, следовательно, $a_x = 0$, а $z_1 = z_2$, то получим выражение

$$\frac{\partial \tilde{z}}{\partial t} = 0, \quad (45)$$

означающее, что нанометровый рельеф не эволюционирует при нормальной бомбардировке.

Этот результат полностью соответствует экспериментальным данным в том смысле, что при распылении изначально гладкой поверхности нормальной бомбардировкой нанорельефа не возникает. С другой стороны известно, что нормальная бомбардировка используется для полировки поверхности, т.е. изначально рельеф сглаживается ионной бомбардировкой. Это означает, что существует диссипативный процесс, для обозначения которого в дальнейшем будет использоваться термин «поверхностная диффузия».

2.2. Регуляризация и обезразмеривание нелокального уравнения эрозии

Для учета процессов релаксации нанорельефа в уравнение (44) необходимо ввести диффузионный член с коэффициентом D

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{z}}{\partial t} = & D\tilde{z}'' + \frac{J_0 Y}{\rho} [\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})] \left\{ \frac{\tilde{z}_1 - \tilde{z}_2}{l} - \frac{\sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \cos \bar{\Theta}}{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \times \right. \\ & \left. \times \left[1 - \frac{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})}{\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \cos \bar{\Theta} \frac{\tilde{z}_1 - \tilde{z}_2}{l} \right] \frac{\tilde{z}_2'}{1 + \tilde{z}_2' \sin \bar{\Theta} \cos \bar{\Theta}} \right\}. \end{aligned} \quad (46)$$

Этот параметр имеет смысл коэффициента поверхностной диффузии и описывает процессы поверхностного массопереноса, индуцированного ионной бомбардировкой. Последнее означает, что интенсивные вакансионные и междоузельные диффузионные процессы имеют место в области линейных каскадов на стадии термализации атомов мишени. При наличии поверхностного градиента концентрации атомов мишени (поверхностных неоднородностей) эти процессы приобретают направленный характер. Таким образом, D имеет смысл

эффективного, т.е. усредненного по поверхности и по времени, коэффициента самодиффузии.

Пусть n – поверхностная концентрация атомов мишени $n = dN/dS$, где $dN = \rho \tilde{z} dS$ и, следовательно, $n = \rho \tilde{z}$. Согласно первому закону Фика $\vec{j} = -D \rho (\partial \tilde{z} / \partial x) \vec{i}$, где $\vec{j}$ – плотность потока ионов через нормальный к потоку единичный отрезок поверхности имеет размерность $m^{-1}c^{-1}$. Из уравнения непрерывности $\partial n / \partial t = -\text{div } \vec{j}$ следует второе уравнение Фика в виде $\partial \tilde{z} / \partial t = D \partial^2 \tilde{z} / \partial x^2$. Именно этот вклад процесса релаксации поверхностных неоднородностей в локальную скорость понижения поверхности учтен в уравнении (46).

Для анализа уравнения (46) его удобно привести к безразмерному виду, перейдя к следующим безразмерным переменным:

$$\tau = \frac{t}{\Pi}; \quad \xi = \frac{x}{l_x}; \quad \varsigma = \frac{\tilde{z}}{l}. \quad (47)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varsigma_1}{\partial \tau} = & \frac{D\Pi}{l_x^2} \varsigma_1'' + \frac{J_0 Y \Pi}{\rho l} [\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})] \left\{ \frac{\varsigma_1 - \varsigma_2}{l} - \frac{l_x}{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \times \right. \\ & \times \left[1 - \frac{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})}{\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \cos \bar{\Theta} \frac{\varsigma_1 - \varsigma_2}{l} \right] \frac{1}{l_x} \frac{\varsigma_2'}{1 + \tilde{z}_2' \sin \bar{\Theta} \cos \bar{\Theta}} \Big\}. \end{aligned} \quad (48)$$

где учтено, что $\sin(\Theta_0 - \bar{\Theta}) \cos \bar{\Theta} = l_x / l$.

После очевидных преобразований, уравнение (48) принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varsigma_1}{\partial \tau} = & \frac{D\Pi}{l_x^2} \varsigma_1'' + \frac{J_0 Y}{\rho l} \Pi \left(\beta - \frac{\alpha}{\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \right) \left\{ (\varsigma_1 - \varsigma_2) - \frac{1}{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \times \right. \\ & \times \left[1 - \frac{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})}{\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \cos \bar{\Theta} (\varsigma_1 - \varsigma_2) \right] \frac{\varsigma_2'}{1 + \varsigma_2' \frac{l \sin \bar{\Theta} \cos \bar{\Theta}}{l_x}} \Big\}. \end{aligned} \quad (49)$$

Уравнение (49) может быть преобразовано в более удобную форму

$$\frac{\partial \varsigma_1}{\partial \tau} = \frac{D\Pi}{l_x^2} \varsigma_1'' + \frac{J_0\Pi}{\rho l} Y\left(\beta - \frac{\alpha}{\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})}\right) \left\{ (\varsigma_1 - \varsigma_2) - \frac{1}{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \times \right. \\ \left. \times \left[1 - \frac{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})}{\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \cos \bar{\Theta} (\varsigma_1 - \varsigma_2) \right] \frac{\varsigma_2'}{1 + \frac{\sin \bar{\Theta}}{\sin(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \varsigma_2'} \right\}. \quad (50)$$

Здесь использованы следующие обозначения

$$c = \frac{1}{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \quad (51)$$

и выбрана следующая нормировка

$$\frac{J_0\Pi}{l\rho c} Y(\Theta_0 - \bar{\Theta}) = 1, \quad (52)$$

определяющая временной масштаб, как

$$\Pi = \frac{l\rho c}{J_0 Y(\Theta_0 - \bar{\Theta})}. \quad (53)$$

С учетом выбранных нормировок уравнение (51) преобразуется к виду

$$\frac{\partial \varsigma_1}{\partial \tau} = \varepsilon \varsigma_1'' + \varsigma_1 - \varsigma_2 - \frac{1}{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \times \\ \times \left[1 - \frac{\beta - \alpha / \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})}{\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \cos \bar{\Theta} (\varsigma_1 - \varsigma_2) \right] \frac{\varsigma_2'}{1 + \frac{\sin \bar{\Theta}}{\sin(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \varsigma_2'}, \quad (54)$$

где $\varepsilon = D\Pi / l_x^2$, $\Theta_0 \neq 0$ или

$$\frac{\partial \varsigma_1}{\partial \tau} = \varepsilon \varsigma_1'' + \varsigma_1 - \varsigma_2 - c \left[1 - \frac{\cos \bar{\Theta}}{c \cos(\Theta_0 - \bar{\Theta})} (\varsigma_1 - \varsigma_2) \right] \frac{\varsigma_2'}{1 + \frac{\sin \bar{\Theta}}{\sin(\Theta_0 - \bar{\Theta})} \varsigma_2'} \quad (55)$$

При $\bar{\Theta} \simeq 0$ уравнение преобразуется к более простому виду

$$\frac{\partial \varsigma_1}{\partial \tau} = \varepsilon \varsigma_1'' + \varsigma_1 - \varsigma_2 - c \left[1 - \frac{\beta - \alpha / \cos \Theta_0}{\cos \Theta_0} (\varsigma_1 - \varsigma_2) \right] \varsigma_2' \quad (56)$$

или

$$\frac{\partial \varsigma_1}{\partial \tau} = \varepsilon \varsigma_1'' + \varsigma_1 - \varsigma_2 - c \varsigma_2' + \frac{1}{\cos \Theta_0} (\varsigma_1 - \varsigma_2) \varsigma_2' \quad (57)$$

И только при условии малоуглового рельефа и $\varsigma \ll l$ уравнение (51) может быть заменено на его линеаризованный вариант, изученный в работе [21]

$$\frac{\partial \varsigma_1}{\partial \tau} = \varepsilon \varsigma_1'' - c \varsigma_2' + \varsigma_1 - \varsigma_2 \quad (58)$$

Параметр c имеет особенность при $\cos(\Theta_0 - \bar{\Theta}) = \alpha / \beta$, где отношение α / β зависит от параметров мишени и ионного пучка. Например, в системе Si – N₂⁺ при энергии пучка 5 кэВ это соотношение равно 0,2588, следовательно, критическое значение угла бомбардировки составляет $\Theta_0 = 75^\circ + \bar{\Theta}$. Если распыление поверхности производится в целях формирования или модификации поверхностной топографии, угол бомбардировки редко превышает 70°. Поскольку

микроскопический рельеф является низкоаспектным, условие $\Theta_0 < 75^\circ + \bar{\Theta}$ выполняется практически всегда.

2.3. Состояния равновесия нелокального уравнения эрозии

2.3.1. Террасы и плоскости

Из экспериментов известно, что при длительной бомбардировке поверхностная топография переходит в устойчивую форму, имеющую вид так называемых террас [13, 24]. Подобные структуры могут быть описаны линейными функциями вида (59), а доказательство существования подобных решений для уравнения (57) может служить наглядной иллюстрацией адекватности нелокального уравнения эрозии реальному процессу распыления.

Решения уравнения (57), описывающие «террасы», в самом общем случае имеют вид линейных функций

$$\zeta = a\xi + b(\tau). \quad (59)$$

Поскольку формулировка граничных условий в виду хаотичности «террас» не представляется возможной, постоянная a может быть определена исходя из принципа минимального производства энтропии, или минимальной скорости распыления поверхности. Отметим, что речь идет не о скорости распыления нанорельефа, а о скорости понижения поверхности в целом.

Подстановка (59) в (57) приводит к уравнению

$$\dot{b} = a \left(1 - c + \frac{a}{\cos \Theta_0} \right), \quad (60)$$

интегрирование которого дает зависимость решения (59) от времени

$$b(\tau) = a \left(1 - c + \frac{a}{\cos \Theta_0} \right) \tau + \zeta_0. \quad (61)$$

Таким образом, решения (59) уравнения (57) будут иметь вид

$$\bar{\zeta} = a\zeta + a \left(1 - c + \frac{a}{\cos \Theta_0} \right) \tau + \zeta_0. \quad (62)$$

Известно, что при эрозии поверхности распылением реализуются режимы, при которых скорость понижения поверхности минимальна. Этот экспериментальный факт полностью согласуется с принципом минимального производства энтропии. Минимальной скоростью распыления террас будет при условии

$$1 - c + \frac{a}{\cos \Theta_0} = 0, \quad (63)$$

из которого можно выразить параметр

$$a_c = (c - 1) \cos \Theta_0 \equiv \left(\frac{\cos \Theta_0}{\beta \cos \Theta_0 - \alpha} - 1 \right) \cos \Theta_0. \quad (64)$$

Соотношение $\operatorname{tg} \Theta_c = a_c$ позволяет найти углы наклона локальной нормали к оси z , при которых существует данное состояние равновесия

$$\Theta_c = \operatorname{arctg} \left[\left(\frac{\cos \Theta_0}{\beta \cos \Theta_0 - \alpha} - 1 \right) \cos \Theta_0 \right]. \quad (65)$$

На рис. 8 приведены графики зависимости Θ_c от угла бомбардировки Θ_0 и прямой $\Theta_c = \Theta_0 - 90^\circ$, выше которой выполняется очевидное условие $\Theta_0 - \Theta_c < 90^\circ$. Из рис. 8 видно, что при $\Theta_0 > 75^\circ$ зависимость $\Theta_c(\Theta_0)$ целиком лежит ниже прямой $\Theta_c = \Theta_0 - 90^\circ$ в области, где распыление невозможно и, следовательно, невозможно образование террас с такими склонами.

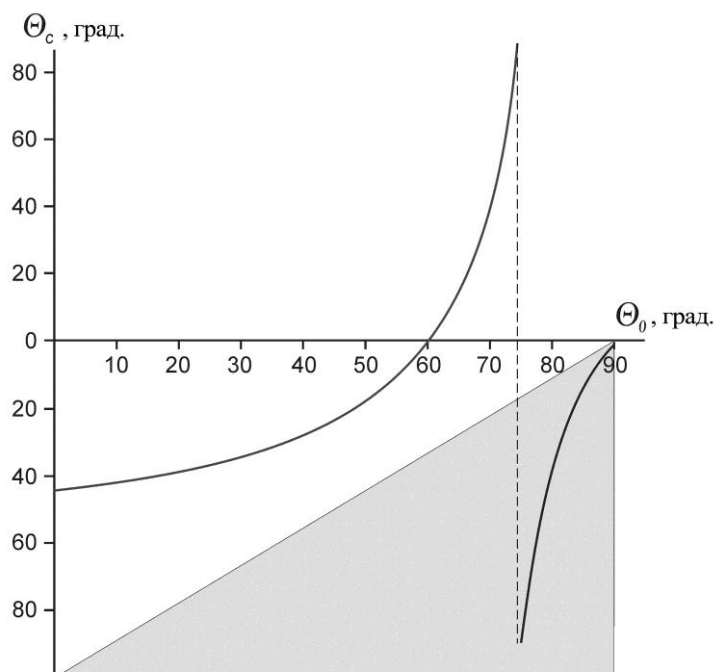


Рисунок 8 - Зависимость критического угла наклона распыляемой поверхности от угла бомбардировки. Серый фон – область, в которой угол между локальной нормалью и направлением потока ионов $\Theta_0 - \Theta_c > 90^\circ$ и террасы не формируются

Примеры террас приведены на рис. 9 и 10 для двух возможных диапазонов изменения угла бомбардировки $\Theta_0 \in [0^\circ, 60^\circ]$ и $\Theta_0 \in [60^\circ, 75^\circ]$. При $\Theta_0 \in [0^\circ, 60^\circ]$

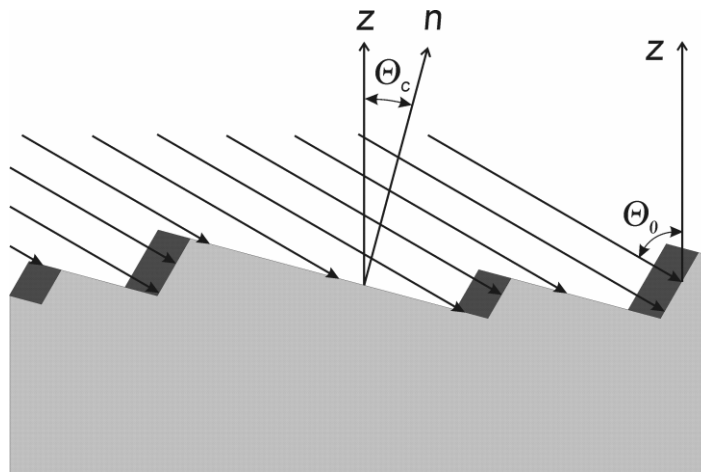


Рисунок 9 - Структуры, отвечающие принципу минимальной скорости распыления при $\Theta_0 \in [0^\circ, 60^\circ]$, где $\Theta_c < 0$. Тёмные параллелограммы – объёмы, распыляемые за конечный промежуток времени

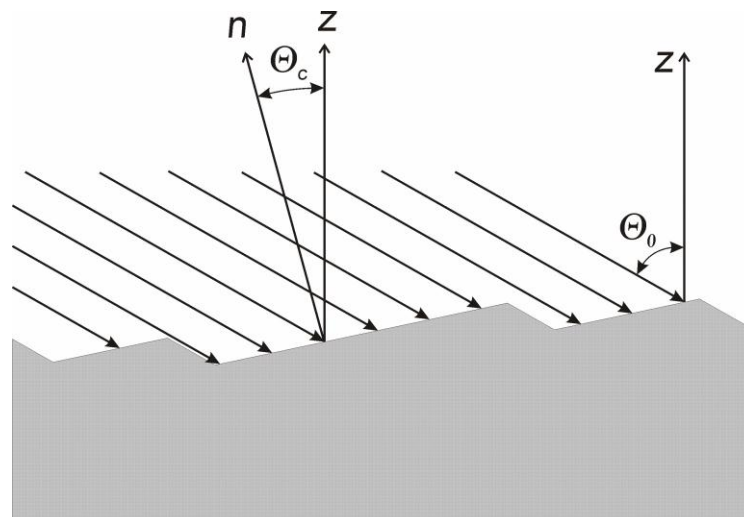


Рисунок 10 - Структуры, отвечающие принципу минимальной скорости распыления при $\Theta_0 \in [60^\circ, 75^\circ]$. Левый и правый склоны стационарны, т.к. $\Theta_l = \Theta_c$,
а $\Theta_r = \Theta_0 - 90^\circ$

(рис. 9) условию минимальной скорости распыления соответствуют длинные пологие правые склоны, расположенные под углом к нормали $\Theta = \Theta_{rc}$, где $\Theta_{rc} < 0$. На левом склоне минимальная скорость распыления достигается только при их нормальном расположении к направлению бомбардировки. При этом левые

склоны, распыляясь, смещаются вправо. Отметим, что в реальной системе распыления левых склонов может и не происходить, т.к. они могут развернуться в плоскости xOy таким образом, что для них будет выполняться условие (63).

При малых углах бомбардировки эти условия не выполняются, т.е. левый склон становится короче правого, и террасы не должны формироваться. Этот вывод подтверждается экспериментальными данными (см. рис. 11), согласно которым ВНР и риплы, переходящие со временем в террасы, лежат в диапазоне углов $\Theta_0 = 43^\circ \div 63^\circ$.

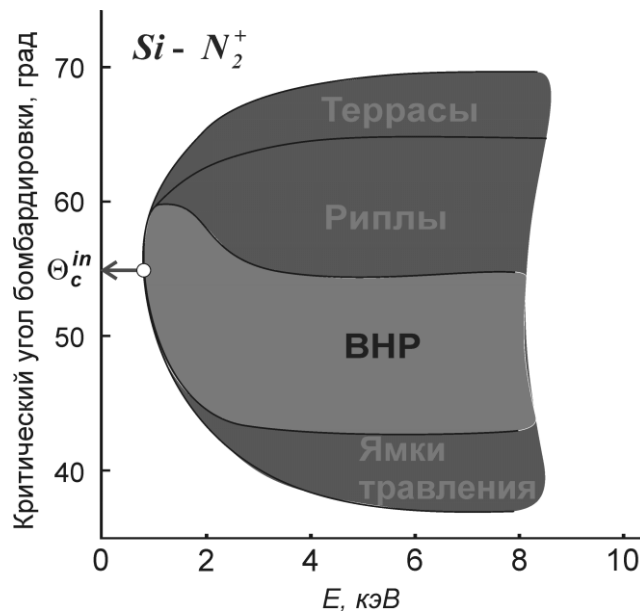


Рисунок 11 - Область существования пространственно-временных структур на фазовой плоскости Θ_0, E , где E – энергия первичного пучка [15]

При $\Theta_0 \in [60^\circ, 75^\circ]$ (рис. 8) длина склона уже не имеет значения, если выполняются следующие условия: левый склон удовлетворяет условию $\Theta_l = \Theta_c$, правый склон – условию $\Theta_r = \Theta_0 - 90^\circ$. Такие структуры согласно рис. 11 формируются в диапазоне углов бомбардировки $\Theta_0 = 63^\circ \div 70^\circ$. Отметим, что в этом диапазоне террасы образуются сразу, минуя ВНР и риплы, что объясняется природой возникновения ВНР (и риплов как некогорентной разновидности ВНР),

рассматриваемой в разделе 2.4. При больших углах бомбардировки толщина модифицированного слоя мала и недостаточна для развития гидродинамической неустойчивости, поэтому ВНР и риплов не возникает.

В соответствии с рис. 8 при $\Theta_0 > 75^\circ$ стационарных, линейных, кусочно-непрерывных решений не существует. Действительно, экспериментально наблюдаемый в этом диапазоне рельеф параллелен направлению бомбардировки, и его описание выходит за рамки рассматриваемой двумерной модели.

Окончательный вид решения уравнения (57) в исходных переменных будет следующим

$$z = \left(\frac{1}{\beta - \alpha / \cos \Theta_0} - 1 \right) \operatorname{ctg} \Theta_0 x + x_0, \quad (66)$$

где x_0 произвольная постоянная, $\Theta_0 \in [0^\circ, 75^\circ]$. Здесь, в рамках детерминистического подхода величина x_0 не может быть определена. Ее выбор носит случайный характер.

2.3.2. Устойчивость террас и плоскостей

Особый интерес представляют состояния равновесия, т.е. решения в виде террас и плоскостей, для которых выполняется условие (63). В таком случае возможны два варианта: $a = (c - 1) \cos \Theta_0$, т.е. рассмотренный выше, и $a = 0$. Ниже исследуется устойчивость обоих состояний равновесия [24]. Для этого рассматриваются малые возмущения $V(\xi, \tau)$ на состоянии равновесия $\bar{\zeta}(\xi) = a\xi + \xi_0$, для которых общее решение имеет вид

$$\zeta(\xi, \tau) = \bar{\zeta}(\xi) + V(\xi, \tau). \quad (67)$$

Подстановка (67) в (57) и очевидные преобразования позволяют получить уравнение для возмущений

$$\frac{\partial V_1}{\partial \tau} = \varepsilon V_1'' - cV_2' + V_1 - V_2 + \frac{1}{\cos \Theta_0} (a + V_1 - V_2)(a + V_2') + (1 - c)a \quad (68)$$

При $a = (c - 1)\cos \Theta_0$ уравнение (68) преобразуется к виду

$$\frac{\partial V_1}{\partial \tau} = \varepsilon V_1'' - V_2' + c(V_1 - V_2) + \frac{1}{\cos \Theta_0} (V_1 - V_2)V_2'. \quad (69)$$

Если $a = 0$, то уравнение (68) принимает вид

$$\frac{\partial V_1}{\partial \tau} = \varepsilon V_1'' - cV_2' + V_1 - V_2 + \frac{1}{\cos \Theta_0} (V_1 - V_2)V_2', \quad (70)$$

где $V_1 = V(\xi, \tau)$, $V_2(\xi, \tau) = V(\xi - 1, \tau)$.

Уравнение (70) целесообразно дополнить краевыми условиями. Здесь будет рассмотрен их простейший вариант

$$V(\xi + 2, \tau) \equiv V(\xi, \tau). \quad (71)$$

Данное условие отражает, в частности, тот факт, что уравнение (68) зависит одновременно и от ξ , и от пространственного отклонения $l_x = 1$ в выбранной нормировке.

В силу того обстоятельства, что постоянная ξ_0 выбиралась произвольно, можно без нарушения общности считать выполнимым равенство

$$\int_0^2 V(\xi, \tau) d\xi \equiv 0 \quad (72)$$

Более того, функция $V(\xi, \tau)$ может быть разложена в комплексный ряд Фурье

$$V(\xi, \tau) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n(\tau) e^{i\pi n \xi}, \quad (73)$$

где $C_0(\tau) \equiv 0$, а $C_n(\tau) = C_n^*(t)$.

При изучении краевой задачи (69), (70), (71), (72) её следует дополнить начальными условиями

$$V(\xi, 0) = f(\xi), \quad (74)$$

где $f(\xi)$ – известная функция, которая задает начальные возмущения. Если $f(\xi) \in H_2$, то можно показать, что задачи (69), (70), (71), (72), (74) локально корректно разрешимы. Здесь через H_2 обозначено пространство Соболева [26] функций имеющих период равный 2 и имеющих нулевое среднее $\int_0^2 f(\xi) d\xi = 0$.

Следующим шагом алгоритма анализа является линеаризация краевой задачи (69), (70), (71), (72), (74) в нулевом решении

$$\frac{\partial V_1}{\partial \tau} = \varepsilon V_1'' - a_1 V_2' + a_2 (V_1 - V_2), \quad (75)$$

$$V(\xi + 2, \tau) \equiv V(\xi, \tau), \quad (76)$$

$$\int_0^2 V(\xi, \tau) d\xi = 0, \quad (77)$$

где $a_1 = 1$, $a_2 = c$ при $a = (c-1)\cos\Theta_0$ (стационарные решения в виде террас) и, наоборот, $a_1 = c$, $a_2 = 1$ при $a = 0$ (плоская поверхность).

В силу того, что функции $\exp(i\pi n\xi)$ на $[-1,1]$ образуют полную ортогональную систему функций, частные решения задачи (75)–(77) следует искать в виде

$$V(\xi, \tau) = V_n(\xi, \tau) = y_n(\tau) \exp(i\pi n\xi) \equiv \exp(\lambda_n \tau) \exp(i\pi n\xi). \quad (78)$$

Простая подстановка показывает, что

$$\lambda_n = -(\pi n)^2 \varepsilon - a_1 (-1)^n i (\pi n) + a_2 (1 - (-1)^n), \quad (79)$$

где $n \neq 0$ в силу условия (72).

При выводе равенства (79) учтено $\exp(-i\pi n) = (-1)^n$.

Следует различить два случая:

- 1) $n = 2m - 1$,
- 2) $n = 2m$.

При чётном n получаем равенство

$$\operatorname{Re} \lambda_{2m} = -4\pi^2 m^2 \varepsilon < 0, \quad (80)$$

при всех рассматриваемых m .

При нечётном n имеем

$$\alpha_m = \operatorname{Re} \lambda_{2m-1} = -\pi^2 (2m-1)^2 \varepsilon + 2a_2, \quad (81)$$

$$\beta_m = \operatorname{Im} \lambda_{2m-1} = \pi (2m-1) a_1. \quad (82)$$

Простая проверка показывает, что при

$$\varepsilon > \varepsilon_{c1} = \frac{2a_2}{\pi^2} \quad (83)$$

все $\alpha_m < 0$, и поэтому нулевое решение задачи (75) – (77), а, следовательно, и задачи (69)–(72) асимптотически устойчиво. Последнее означает, что в случае, когда исходная поверхность плоская, т.е. $a_2 = 1$, нулевое решение теряет устойчивость при $\varepsilon < \varepsilon_{c1} = 2 / \pi^2 \equiv 0,20264$.

Если же исходный рельеф имеет вид террас, т.е. $a_2 = c$, то нулевое решение остается устойчиво при условии

$$\varepsilon > \varepsilon_{c2} = \frac{2c}{\pi^2}, \quad (84)$$

где величина параметра c , согласно соотношению

$$c = \frac{1}{\beta - \alpha / \cos \Theta_0} \quad (85)$$

определяется углом бомбардировки Θ_0 . Подстановка (85) в (84) дает условие устойчивости террас

$$\varepsilon > \varepsilon_{c2} = \frac{2}{\pi^2(\beta - \alpha / \cos \Theta_0)}. \quad (86)$$

Из графика зависимости $\varepsilon_{c2}(\Theta_0)$, представленного на рис. 12, видно, что на отрезке $[70^\circ, 75^\circ]$ может выполняться соотношение $\varepsilon_{c2} > \varepsilon > \varepsilon_{c1}$, при котором устойчивы плоскости и неустойчивы террасы. Причем, чем больше угол, тем труднее удовлетворить условию (86), поэтому в данном диапазоне углов террасы формироваться не должны. Этот вывод подтверждается экспериментальными данными, представленными на рис. 11, согласно которым область существования

террас ограничена диапазоном $[65^\circ, 70^\circ]$. В этой области террасы формируются при распылении плоской поверхности, минуя стадию ВНР.

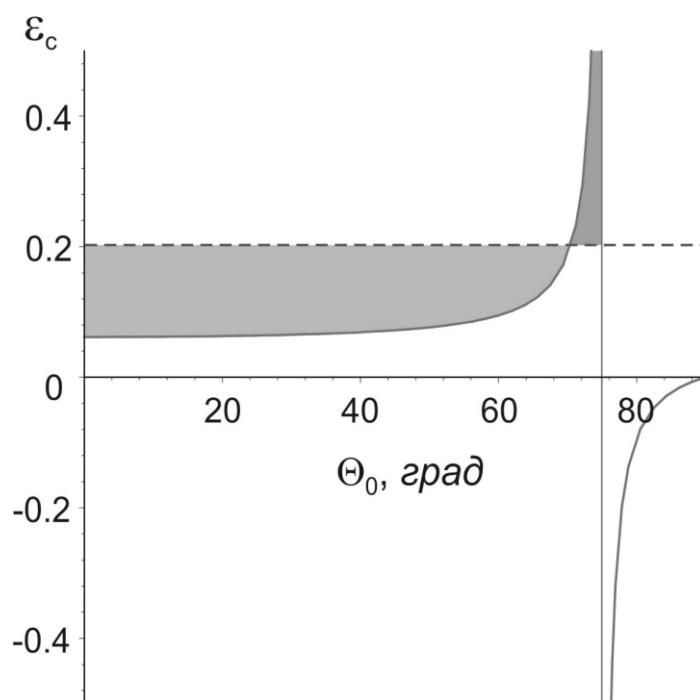


Рисунок 12 - Зависимость параметра ε_{c2} (террасы) от угла бомбардировки.

Пунктиром показано значение критического коэффициента диффузии ε_{c1} для решения в виде плоскости. Серый фон ниже значения ε_{c1} – область существования террас. Серый фон выше значения ε_{c1} – область, где устойчивы плоскости и неустойчивы террасы

При $\Theta_0 > 75^\circ$, как показано на рис. 12, критическое значение коэффициента диффузии отрицательно. Однако это противоречие снимается тем, что в указанном диапазоне углов бомбардировки для стационарных решений уравнения (57) не выполняется условие $\Theta_0 - \Theta_c < 90^\circ$, поэтому при скользящих углах бомбардировки террасы не образуются. Согласно рис. 12 в этом диапазоне углов сохраняется плоская поверхность.

2.4. Волновые решения нелокального уравнения эрозии

Наибольший интерес из всех диссипативных структур, образующихся при распылении поверхности ионной бомбардировкой, представляют бегущие волны. Основным вопросом для исследователей и разработчиков в области нанотехнологий является вопрос о механизме их возникновения. Ответ на него позволит целенаправленно управлять процессом формирования волнообразного рельефа и получать массивы когерентных волнообразных структур с высоким аспектным соотношением.

Существуют две конкурирующие теории, согласно которым зарождение волн связано с процессами:

- потери гидродинамической устойчивости модифицированного слоя, рассматриваемого как неньютоновская жидкость;
- потери устойчивости состояний равновесия в виде плоской поверхности в рамках распылительных моделей (уравнение Бредли-Харпера, нелокальная модель эрозии и т.д.).

В пользу гидродинамической модели говорит зависимость длины волны от толщины аморфизованного слоя h (глубины жидкости), которая зависит от угла бомбардировки и энергии ионов. Эксперимент показывает, что длина волны ВНР возрастает с увеличением энергии ионов и уменьшением угла бомбардировки [13], т.е. с увеличением толщины модифицированного слоя. Другими словами, ВНР ведет себя как волны на мелкой воде, для которых должно выполняться условие $\lambda \gg h$.

Анализ волновых решений нелокального уравнения эрозии, который будет выполнен ниже, подтверждает предположение, что механизм зарождения ВНР и, соответственно, длина волны не связаны с процессом распыления. Распыление только развивает зародышевый рельеф или, наоборот, сглаживает его в зависимости от того, попадает ли данная волна в область существования волновых решений уравнения эрозии или нет.

Чтобы получить решения в виде бегущей волны достаточно рассмотреть краевую задачу с периодическими граничными условиями для линейного уравнения (58)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varsigma_1}{\partial \tau} &= \varepsilon \varsigma_1'' - c \varsigma_2' + \varsigma_1 - \varsigma_2 \\ \varsigma_1(\tau, \xi) &= \varsigma_1(\tau, \xi + L); \quad \varsigma_1(0, \xi) = f(\xi) \end{aligned}, \quad (87)$$

где $L = L_0 / l_x$ – безразмерный параметр. Длина L_0 определяется, как правило, размерами растра, составляющими от одного до нескольких микрометров, $f(\xi)$ – функция, описывающая исходный волновой рельеф «гидродинамической» природы. Отметим, что уравнение (75) при $a_1 = 1$, $a_2 = c$ совпадает с (87).

Для решения краевой задачи (87) далее используется стандартный метод разделения переменных (метод Фурье), согласно которому решение ищется в виде

$$\varsigma(\xi, \tau) = e^{\mu \tau} V(\xi). \quad (88)$$

Подстановка (88) в уравнение (87) приводит к задаче на собственные значения и собственные функции следующего оператора

$$\begin{aligned} \varepsilon V''(\xi) - cV'(\xi - 1) + V(\xi) - V(\xi - 1) &= \mu V(\xi) \\ V(\xi) &= V(\xi + L); \quad V(\xi) = f(\xi) \end{aligned}, \quad (89)$$

которые ищутся в виде

$$V(\xi) = e^{q\xi}. \quad (90)$$

Функция, определенная равенством (90), должна удовлетворять краевому условию (89), т.е. $e^{qL} = 1$. Из этого уравнения следует, что

$$q_n = i \frac{2\pi}{L} n, \quad n = 0, \pm 1, \dots \quad (91)$$

Подстановка (90) с учетом (91) в уравнение (89) дает собственные значения оператора (89)

$$\mu_n = \varepsilon q_n^2 - c q_n e^{-q_n} - e^{-q_n} + 1. \quad (92)$$

Если положить $q_n = i\kappa_n$, то в новых обозначениях собственные значения примут вид $\mu_n = 1 - \varepsilon \kappa_n^2 - (1 + i c \kappa_n) e^{-i\kappa_n}$ или

$$\mu_n = 1 - \varepsilon \kappa_n^2 - (1 + i c \kappa_n)(\cos \kappa_n - i \sin \kappa_n), \quad (93)$$

где $\kappa_n = 2\pi n / L$. Принимая во внимание, что $\mu_n = \mu'_n + i\mu''_n$, можно разделить в (93) действительную и мнимую части

$$\begin{aligned} \mu'_n &= 1 - \varepsilon \kappa_n^2 - \cos \kappa_n - c \kappa_n \sin \kappa_n, \\ \mu''_n &= \sin \kappa_n - c \kappa_n \cos \kappa_n \end{aligned} \quad (94)$$

Если дополнить периодическую краевую задачу (87) начальным условием $u(0, x) = f(x)$, то можно найти ее решение в следующем виде

$$u(\tau, \xi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e^{\mu'_n \tau} e^{i(\mu''_n \tau + n\xi)}, \quad (95)$$

где $f_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(\xi) e^{-in\xi} d\xi$ – коэффициенты Фурье функции $f(\xi)$, которая описывает возможные и часто случайные начальные возмущения (возмущения, которые возможны до начала технологического процесса).

Формула (95) записана в комплексной форме. Ее можно переписать в действительном виде, если учесть то обстоятельство, что $f_{-n} = \bar{f}_n$, где черта означает знак комплексного сопряжения. Вводя обозначения $f_n' = \text{Re } f_n$, $f_n'' = \text{Im } f_n$, действительную часть (95) можно представить в следующем виде

$$u(\xi, \tau) = f_0 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{\mu_n' \tau} \left(f_n' \cos(\mu_n'' \tau + n\xi) - f_n'' \sin(\mu_n'' \tau + n\xi) \right).$$

Если считать, что природа ВНР связана только с процессами распыления, то сценарий образования волнообразного нанорельефа выглядит следующим образом. Все параметры, входящие в безразмерный комплекс s , при заданных условиях распыления – величины постоянные. В процессе распыления может изменяться только коэффициент диффузии, что связано с изменением структуры и химического состава поверхности твердого тела. При переходе в аморфное состояние вклад диффузионных процессов в эрозию поверхности уменьшается и все значения μ_n' , первоначально находящиеся в нижней полуплоскости, начинают двигаться в сторону оси абсцисс на плоскости $[n, \mu']$, где n – номер моды. На рис. 13 – 15 показан момент перехода вещественной части спектра собственных значений оператора (89) в верхнюю полуплоскость при углах бомбардировки $\Theta_0 = 25^\circ - 65^\circ$.

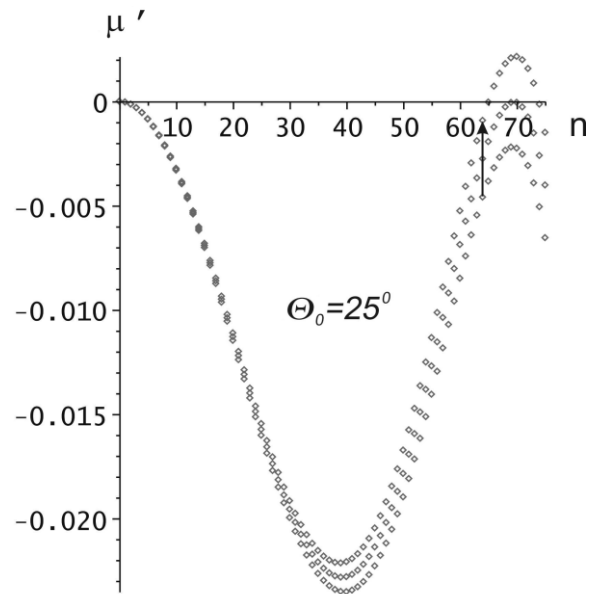


Рисунок 13 - Переход вещественной части точки $n = 70$ спектра собственных значений оператора (89) в верхнюю полуплоскость при $\Theta_0 = 25^\circ$, $D = 0,5645 \cdot 10^{-16}$.

Стрелкой показано направления движения точек

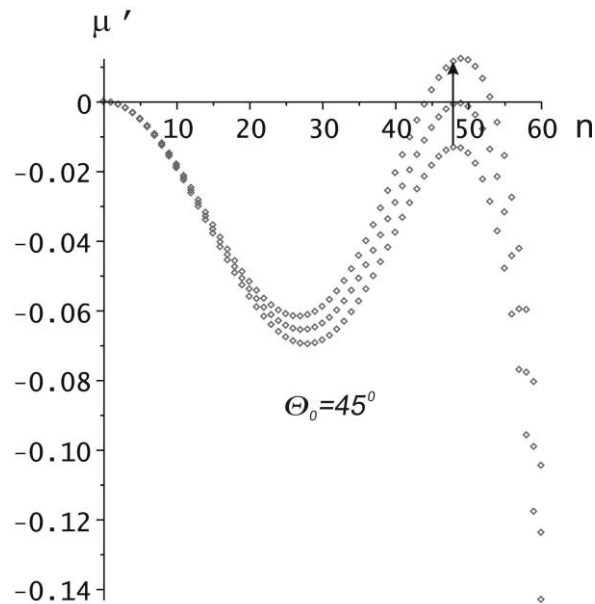


Рисунок 14 - Переход вещественной части точки $n = 49$ спектра собственных значений оператора (89) в верхнюю полуплоскость при $\Theta_0 = 45^\circ$, $D = 5,120 \cdot 10^{-16}$

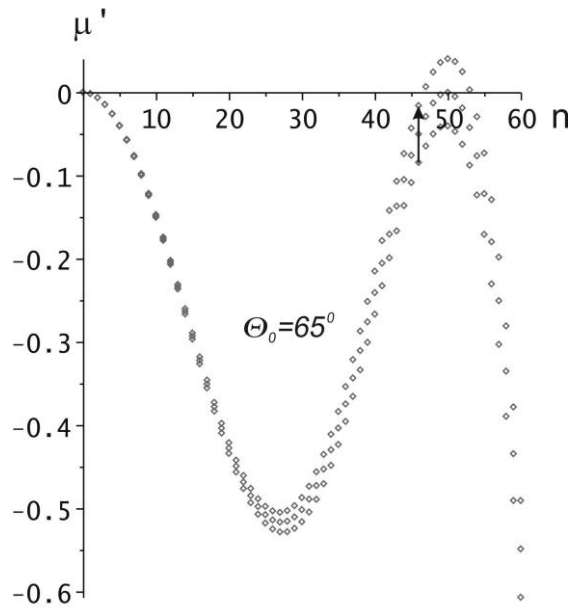


Рисунок 15 - Переход вещественной части точки $n = 50$ спектра собственных значений оператора (89) в верхнюю полуплоскость при $\Theta_0 = 65^\circ$, $D = 25,95 \cdot 10^{-16}$

Зависимость критического значения коэффициента диффузии и номера моды от угла бомбардировки показана в Таблице 1. Для приведенных в таблице углов бомбардировки и стандартных размеров раstra $L = 1 \text{ мкм}$ длины волн лежат в диапазоне от 14 до 21 нм.

Интересно отметить, что в точке фазовой плоскости с координатами $\Theta_0 = 55^\circ$, $\varepsilon_{c3} = 0,2027$ критические значения коэффициента диффузии для задач (75) – (77) и (87) практически совпадают $\varepsilon_{c1} = 0,2026$. Приведенная в табл. 1 зависимость критических значений безразмерного коэффициента диффузии от угла бомбардировки показана на рис. 16. Как следует из табл. 1 и рис. 16, для прочих углов бомбардировки всегда выполняется условие $\varepsilon_{c3} \geq \varepsilon_{c1}$, т.е. потеря устойчивости плоского профиля при периодических условиях на границах раstra происходит несколько раньше.

Таблица 1 - Зависимость критического значения коэффициента диффузии и номера моды от угла бомбардировки

$\Theta_0, \text{град}$	$D, 10^{-16} \text{ м}^2 / \text{с}$	ε_{c3}	n
25	0,5645	0,2127	70
30	1,065	0,2111	61
35	1,876	0,2093	55
40	3,152	0,2072	51
45	5,120	0,2052	49
50	8,087	0,2033	48
55	12,44	0,2027	47
60	18,49	0,2053	48
65	25,95	0,2184	50
70	32,46	0,2791	53

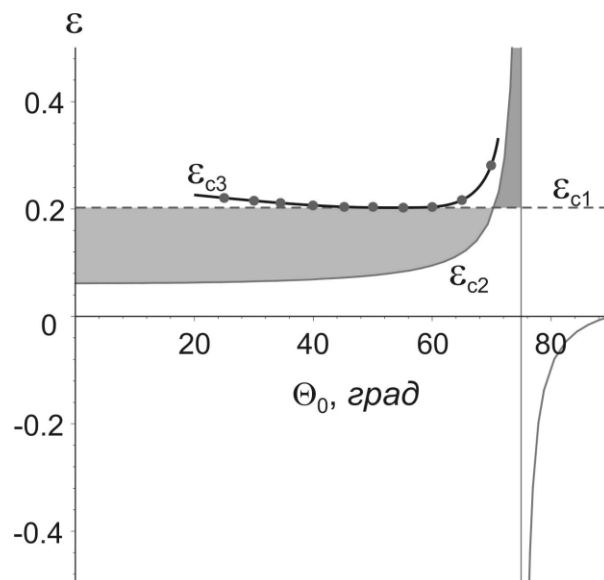


Рисунок 16 - Зависимость критических значений управляющих параметров: ε_{c1} – плоскости; ε_{c2} – террасы; ε_{c3} – волны от угла бомбардировки. Точки – значения

ε_{c3} из табл. 1

В области $[65^\circ, 70^\circ]$ условие $\varepsilon = \varepsilon_{c3}$ может выполняться, когда система находится еще в докритической для «гидродинамики» области. Согласно табл. 1 здесь должны зарождаться волны с длиной ~ 20 нм, о существовании которых можно судить на основании рис. 17, приведенного в работе [13]. Действительно, малая глубина модифицированного слоя может быть получена только при больших углах бомбардировки, т.е. при $\Theta_0 > 60^\circ$. Очевидно, что при этих углах бомбардировки параметр ε попадает в область ВНР раньше, чем при малых углах.

Отметим, что здесь речь идет о ВНР с длиной волны от 14 до 21 нм. Экспериментально наблюдаемый ВНР имеет «гидродинамическую» природу и, соответственно, другие длины волн (рис. 17). Параметром, отвечающим за развитие «гидродинамической» неустойчивости, является коэффициент поверхностного натяжения, который также изменяется в процессе бомбардировки. ВНР «гидродинамической» природы может возникать как в докритической области, где еще устойчив плоский профиль, так и в закритической области. Задача (87) охватывает оба случая, причем в обоих случаях исходный ВНР затухает, т.к. низкие моды (рис. 13 – 15) всегда находятся в нижней полуплоскости. Это согласуется с тем экспериментальным фактом, что ВНР существует лишь ограниченное время и самостоятельно не достигает высокого аспектного соотношения.

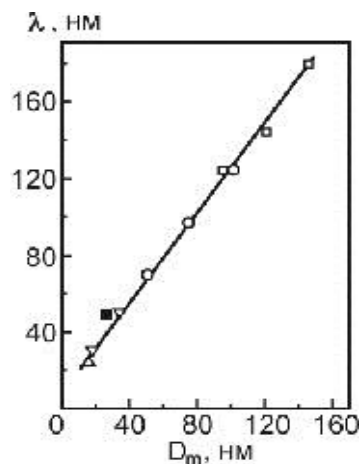


Рисунок 17 - Зависимость длины волны λ от глубины раstra в системе $N_2^+ - Si$

ГЛАВА 3. МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ ВОЛНОВОГО НАНОРЕЛЬЕФА В РАМКАХ МОДЕЛИ БРЕДЛИ-ХАРПЕРА

Для описания эволюции топографии поверхности, подвергнутой ионной бомбардировке, в настоящее время используется несколько математических моделей. Все эти модели базируются на основополагающих работах П. Зигмунда (см., например, [27]). Из них следует отметить три основные:

1. уравнение Вандерворста-Элст;
2. уравнение Бредли-Харпера;
3. нелокальное уравнение эрозии.

Исторически первой моделью эрозии является уравнение Вандерворста-Элст [28]. Это квазилинейное уравнение первого порядка, которое в наиболее общем может быть представлено как

$$\frac{\partial z}{\partial t} = F\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)$$

или

$$\frac{\partial z}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} F(z),$$

где функции $z = z(t, x)$ - уравнения поверхности мишени, сформировавшейся в момент времени t в точке с координатой x . В большинстве случаев рельеф поверхности является цилиндрическими, т.е. независимым от y . Первое уравнение входит в класс уравнений Гамильтона-Якоби [29], которые были изучены в работах [30 - 32].

Для этих уравнений характерна задача Коши, когда

$$z(t_0, x) = \varphi(x),$$

где $\varphi(x)$ заданная функция. Решения уравнения «повторяют» вид $\varphi(x)$. Например, в простейшем случае

$$\frac{\partial z}{\partial t} = k \frac{\partial z}{\partial x}, \quad k = \text{const},$$

решение имеет вид бегущей волны $z = \varphi(x + kt)$, т.е. решение полностью определяется видом $\varphi(x)$.

В смысле приложения к рассматриваемой физической задаче последнее утверждение означает, что рельеф поверхности определяется ее начальным профилем, что противоречит экспериментальным результатам, где неоднократно наблюдалось формирование волнового нанорельефа на исходной гладкой поверхности. Тем не менее, уравнение Вандерворста-Элст адекватно описывает процесс развития всех поверхностных неоднородностей микроскопического масштаба. В этих случаях [33] задача Коши, как это и принято, интегрируется методом характеристик.

Недостатки модели Вандерворста-Элст были частично устранены в модели Бредли-Харпера, которая учитывала зависимость коэффициента распыления от кривизны поверхности и вклад диффузии в развитие поверхностной топографии. Третьей по счету моделью стала, рассмотренная в предыдущей главе, нелокальная модель эрозии, в которой учтены эффекты нелокальности распыления.

Вторая модель эрозии поверхности ионной бомбардировкой была предложена в работе [14], где было выведено уравнение, которое в теории распыления называют уравнением Бредли-Харпера, а иногда уравнением Курамото-Сивашинского [41,42]. Отметим, что уравнение Курамото-Сивашинского было предложено ранее для описания динамики некоторых процессов химической кинетики, а также гидродинамики. В последнее время появились различные его модификации и обобщения, в том числе и уравнение, предложенное М. Бредли и Дж. Харпером. В ряде случаев уравнение Бредли-

Харпера удастся свести к классической версии уравнения Курамото-Сивашинского.

Ниже рассматривается вариант этого уравнения, описывающий цилиндрическую поверхность, т.е. поверхность, рельеф который зависит от t, x , но не зависят от второй пространственной переменной y . С физической точки зрения такое предположение вполне приемлемо, т.к. именно такой рельеф формируется в большинстве случаев и представляет интерес точки зрения его практического использования. В заключение отметим, что нелокальное уравнение эрозии также можно считать обобщением уравнения Курамото-Сивашинского, в котором учтены более тонкие эффекты распыления.

3.1. Постановка математической задачи

Следуя работе [14], в перенормированном виде уравнение Бредли-Харпера можно записать как

$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} = & -\alpha + a \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right) + a_1 \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + a_2 \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^3 - \\ & - b \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + b_1 \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + b_2 \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - d \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} \end{aligned} \quad (96)$$

В уравнении (96) функция $z = h(t, x)$ задает форму поверхности, полученную в результате распыления мишени в момент времени t и в точке с координатой x . Коэффициенты в правой части уравнения зависят от следующих параметров процесса:

- интенсивности потока (в первую очередь b),
- угла между направлением потока ионов и нормалью к невозмущенной поверхности,
- плотности материала подложки и т.д.

Параметр $\alpha > 0$, если следовать терминологии Дж. Картера [20], можно называть скоростью эрозии (скоростью понижения поверхности). Способам ее вычисления

отчасти посвящена работа П. Зигмунда [27]. Наконец, $d > 0$ - коэффициент «поверхностной диффузии» или иначе коэффициент при диссипативном члене.

Нетрудно видеть, что уравнение (96) имеет решение

$$h(t, x) = h_0 - \alpha t \quad (h_0 \in R), \quad (97)$$

которое задает так называемый «плоский» профиль для поверхности, подвергнутой бомбардировке. Постоянная h_0 в формуле (97) произвольна и зависит от выбора системы координат. Положим

$$u(t, x) = h(t, x) - (h_0 - \alpha t),$$

где $u(t, x)$ - нормированное отклонение от плоского профиля. В результате для новой неизвестной функции получим следующее дифференциальное уравнение в частных производных

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} = & a \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) + a_1 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + a_2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^3 - \\ & - b \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b_1 \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b_2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - d \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}. \end{aligned} \quad (98)$$

Как и в работах [14,34,35] уравнение (98) будем рассматривать вместе с периодическими краевыми условиями, которые с учетом нормировок имеют вид

$$u(t, x + 2\pi) = u(t, x). \quad (99)$$

Замечание. Как известно краевые условия (99) могут быть записаны и в полной форме

$$u(t, 0) = u(t, 2\pi), \quad \left. \frac{\partial^k u}{\partial x^k} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial^k u}{\partial x^k} \right|_{x=2\pi}, \quad k = 1, 2, 3,$$

а форма периодических краевых условий в виде (99) в последнее время стала чаще употребляемой.

Отметим сразу, что краевая задача (98), (99) допускает семейство решений

$$u(t, x) = C,$$

где C - произвольная действительная постоянная. Более того, уравнение (98) инвариантно относительно преобразований Галилея

$$u \rightarrow u + C.$$

Два последних замечания позволяют в дальнейшем изучать окрестность нулевого состояния равновесия $u = 0$. При этом сведение задачи к изучению нулевого состояния равновесия не уменьшает общности, так как речь идет лишь об изменении точки отчета в выбранной системе координат.

Уравнение (98) и краевые условия (99) дополним начальным условием

$$u(0, x) = f(x). \quad (100)$$

Тогда получим смешанную задачу (98), (99), (100). Пусть $f(x) \in H_2^4$. Последнее означает, что для этой функции выполнены следующие условия:

- 1) $f(x) \in W_2^4[0, 2\pi]$;
- 2) $f(x)$ имеет период 2π .

Здесь через $W_2^4[0, 2\pi]$ обозначено классическое пространство Соболева [26].

Напомним, что $f(x) \in W_2^p[0, 2\pi]$, $p \in N$ (множеству натуральных чисел), если у

$f(x)$ существуют обобщенные производные $f'(x), f''(x), \dots, f^{(p)}(x)$ до порядка p включительно, которые интегрируемы с квадратом на указанном отрезке $[0, 2\pi]$ ($f^{(j)}(x) \in L_2(0, 2\pi)$, $j = 1, \dots, p$), то есть $\int_0^{2\pi} \left(f^{(j)}(x)\right)^2 dx < \infty$. Из теорем вложения Соболева [26] вытекает, что если $f(x) \in H_2^4$, то $f(x) \in C^3(R)$, т.е. эта функция имеет непрерывные производные до третьего порядка включительно.

Рассмотрим линейный дифференциальный оператор

$$A(b)v = -dv^{IV} - bv'' + av',$$

где $v = v(x)$, а область определения оператора A состоит из достаточно гладких функций $v(x)$, имеющих период 2π . Непосредственной подстановкой проверяется, что этот линейный дифференциальный оператор $A(b)$ имеет счетное множество собственных значений

$$\begin{aligned} \lambda_n(b) &= \tau_n + i\sigma_n, \\ \tau_n &= -dn^4 + bn^2, \quad \sigma_n = an, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \end{aligned}$$

которые соответствуют собственным функциям

$$v_n(x) = \exp(inx), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Отметим также предельное равенство

$$\lim_{|n| \rightarrow \infty} \left| \frac{\sigma_n}{\tau_n} \right| = 0,$$

и неравенство

$$\tau_n < 0,$$

которое выполнено, если n заведомо велико по модулю. Последние два замечания позволяют сделать вывод, что линейный дифференциальный оператор A является производящим оператором аналитической полугруппы линейных ограниченных операторов $T(t)$ (см. [36]). При этом для операторов $T(t)$ имеет место оценка

$$\|T(t)\| \leq M \exp(\gamma_{\max} t),$$

где $\gamma_{\max} = \max_{n \in R} \{\tau_n\} + \delta$, $\delta = \text{const} > 0$, $M > 0$.

Из результатов, изложенных в монографии [36] вытекает, что смешанная задача (98), (99), (100) корректно разрешима (входит в класс абстрактных параболических уравнений). В несколько иной терминологии при выполнении включения $f(x) \in H_2^4$ это пространство служит фазовым пространством (пространством начальных условий) для решений краевой задачи (98), (99). Смешанная задача (98), (99), (100) порождает гладкий локальный полупоток

$$f(x) \rightarrow u(t, x) = f_t(x),$$

для которого при $t \in (0, t_0)$ справедливо включение

$$f_t(x) \in H_2^p,$$

где p любое натуральное число. В свою очередь, справедливо также включение $f_t(x) \in C^\infty$, т.е. при указанных t функции $f_t(x)$ имеют любое число непрерывных производных по переменной x .

В данной главе будет рассмотрен вопрос о существовании и устойчивости ненулевых пространственно неоднородных решений у рассматриваемой нелинейной краевой задачи, Т.е. решений $u(t, x) \neq 0$, для которых дополнительно справедливо условие $\frac{\partial u}{\partial x} \neq 0$ и, следовательно, существенно зависящих от пространственной переменной x . Такие решения описывают неоднородный рельеф, который принято называть волновым нанорельефом (ВНР).

3.2. Устойчивость плоского профиля

Как уже ранее отмечалось, плоский профиль описывается равенством $u(t, x) = C$ ($C = const$), и при этом постоянная C может быть выбрана нулевой ($C = 0$). Тем самым вопрос об устойчивости плоского профиля сводится к вопросу об устойчивости нулевого решения нелинейной краевой задачи (98), (99). Подчеркнем, что в этом разделе и далее устойчивость понимается в норме фазового пространства решаемой краевой задачи

$$\|f\|_{H_2^4} = \|f\|_{L_2} + \|f'\|_{L_2} + \|f''\|_{L_2} + \|f'''\|_{L_2} + \|f^{IV}\|_{L_2},$$

$$\|f\|_{L_2} = \left(\int_0^{2\pi} f^2(x) dx \right)^{1/2}.$$

Рассмотрим линеаризованную в нуле краевую задачу (98), (99), которая может быть записана в следующем виде

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial u}{\partial x} - b \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - d \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}, \quad (101)$$

$$u(t, x + 2\pi) = u(t, x). \quad (102)$$

Для исследования вопроса об устойчивости нулевого решения краевой задачи (101), (102) найдем все ее решения вида (форме Эйлера)

$$u(t, x) = \exp(\lambda t) v(x).$$

Здесь функция $v(x)$ удовлетворяет периодическим краевым условиям

$$v(t, x + 2\pi) = v(t, x).$$

Для определения соответствующего $\lambda \in \mathbb{C}$ (или $\mathbb{R}$), а также функции $v(x)$, получим следующую краевую задачу

$$A(b)v = \lambda v, \quad v(x + 2\pi) = v(x). \quad (103)$$

где линейный дифференциальный оператор $A(b)$ был определен в предыдущем разделе данной главы диссертационной работы. Собственные значения линейного дифференциального оператора $A(b)$ были найдены ранее

$$\lambda_n(b) = \tau_n + i\sigma_n, \quad \tau_n = -dn^4 + bn^2, \quad \sigma_n = an.$$

Простая проверка позволяет заключить, что при $b=0$ или малых b заведомо выполнено неравенство

$$\operatorname{Re} \lambda_n = \tau_n < 0, \quad (104)$$

если $n = \pm 1, \pm 2, \dots$. При $n=0$ получим $\lambda_0 = 0$. Более детальный анализ равенства (104) показывает, что оно выполнено, если

$$b - d < 0, \quad (b < d).$$

При $b > d$ плоский профиль теряет устойчивость. Наконец равенство

$$b = d$$

выделяет критический случай в задаче об устойчивости однородных состояний равновесия нелинейной краевой задачи (98), (99).

Пусть $d = b$. Тогда краевая задача (103) имеет три собственных числа, лежащих на мнимой оси:

$$\lambda_0 = 0, \quad \lambda_{\pm 1} = \pm ia.$$

Как уже отмечалось, этим собственным числам соответствуют собственные функции

$$e_0(x) = 1, \quad e_{\pm 1}(x) = \exp(\pm ix).$$

При остальных целых k выполнены неравенства

$$\operatorname{Re} \lambda_k \leq -\gamma_0 < 0 \quad (k = \pm 2, \pm 3, \dots).$$

Простые вычисления показывают, что $\gamma_0 = 12d$, так как при $k = \pm 2, \pm 3, \dots$ нетрудно проверить справедливость неравенства

$$k^2 + k^4 \leq -12, \quad k = \pm 2, \pm 3, \dots$$

В свою очередь, последнее неравенство следует из убывания вспомогательной функции $\varphi(\xi) = \xi^2 - \xi^4$ на луче $[2, \infty)$ (при $\xi \geq 2$ $\varphi'(\xi) < 0$).

Возвратимся к линейной краевой задаче (101), (102), в случае, если $b = d$. При таком выборе коэффициентов уравнения (101) краевая задача (101), (102) имеет два линейно независимых периодических решения

$$u(t, x) = C_1 \exp(iat + ix), \quad u(t, x) = C_2 \exp(-iat - ix)$$

относительно и переменной t с периодом $2\pi/a$. Период по переменной x равен 2π .

В результате приведенных построений доказано утверждение.

Теорема 3.1. Нулевое решение линейной краевой задачи (101), (102) устойчиво, если $b \leq d$ и теряет устойчивость при $b > d$.

Нулевое решение нелинейной краевой задачи (98), (99) устойчиво, если $b < d$ и неустойчиво, если $b > d$.

Отметим, что случай асимптотической устойчивости для обоих вариантов краевой задачи исключен.

3.3. Анализ нелинейной краевой задачи. Бифуркации пространственно неоднородного рельефа

В этом разделе возвратимся к изучению нелинейной краевой задачи (98), (99), в которой положим

$$b = d(1 + \gamma\varepsilon),$$

где $\gamma = \pm 1$, а $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$, $0 < \varepsilon_0 \ll 1$, т.е. будем считать ε малым неотрицательным параметром. При таком выборе коэффициентов уравнения (98) изучим вопрос о возможности локальных бифуркаций неоднородных диссипативных структур (ВНР), принадлежащих малой окрестности нулевого решения краевой задачи (98), (99), т.е. шару $Q(R)$ с центром в нуле гильбертова пространства H_2^4 , радиус которого R достаточно мал. В частности, будем считать, что заведомо выполнено

$$u(0, x) = f(x) \in Q(R).$$

Введем в рассмотрение линейные дифференциальные операторы

$$A(\varepsilon)v = -dv^{IV} - (1 + \gamma\varepsilon)v'',$$

а также $A_0 = A(0)$. Их область определения была описана в предыдущем разделе.

Подчеркнем, что

$$A_0v = -dv^{IV} - dv''.$$

Напомним хорошо известный из теории дифференциальных операторов факт.

Замечание. Рассмотрим неоднородную краевую задачу

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} - A_0 w &= g(t, x), \\ w(t, x + 2\pi) &= w(t, x) \end{aligned},$$

где $g(t, x)$ достаточно гладкая по совокупности переменных функция, для которой справедливы тождества

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi/a} \int_0^{2\pi} g(t, x) dx dt &= 0 \\ \int_0^{2\pi/a} \int_0^{2\pi} g(t, x) \exp(\pm iat \pm ix) dx dt &= 0 \end{aligned}.$$

Как это принято последние три условия будем называть условиями разрешимости. Добавим, что равенства

$$\int_0^{2\pi/a} \int_0^{2\pi} w(t, x) dx dt = 0$$

$$\int_0^{2\pi/a} \int_0^{2\pi} w(t, x) \exp(\pm iat \pm ix) dx dt = 0$$

выделяют одно такое решение.

Перепишем нелинейную краевую задачу при выбранных параметрах в более подходящей для исследования форме

$$\frac{\partial u}{\partial t} - A(\varepsilon)u = F_2(u) + F_3(u), \quad (105)$$

$$u(t, x + 2\pi) = u(t, x). \quad (106)$$

Здесь

$$F_2(u) = a_1 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + b_1 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right),$$

$$F_3(u) = a_2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^3 + b_2 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right),$$

т.е. F_2, F_3 квадратичная и кубическая нелинейности.

В силу предположений относительно расположения собственных значений линейного дифференциального оператора $A(\varepsilon)$ эволюционная нелинейная краевая задача (105), (106) имеет в окрестности решения $u=0$ трехмерное локально инвариантное многообразие $M_3(\varepsilon)$, которое теперь уже традиционно называют центральным (см. [35,37]). При этом оно является локальным аттрактором, т.е. все

решения нелинейной краевой задачи (105), (106) с начальным условием из шара $Q(R_0)$, где R_0 достаточно малая положительная постоянная, приближаются к $M_3(\varepsilon)$ со скоростью экспоненты или же покидают с течением времени этот шар. Поэтому динамику малых по норме начальных условий определяет система из трех обыкновенных дифференциальных уравнений – нормальная форма. Для построения такой системы также будет использован специальный алгоритм, который сочетает метод интегральных многообразий, асимптотические методы (см., например [38]).

Согласно этой методике решения на $M_3(\varepsilon)$ можно и целесообразно искать в следующей форме

$$u(t, x, \varepsilon) = \psi(s) + \varepsilon^{1/2} u_1(t, x, z, \bar{z}) + \varepsilon u_2(t, x, z, \bar{z}) + \varepsilon^{3/2} u_3(t, x, z, \bar{z}) + \dots, \quad (107)$$

где $\psi(s)$, $z = z(s)$ – компоненты будущей вспомогательной системы дифференциальных уравнений, называемой нормальной формой. При этом $\psi(s)$ – действительная, а $z(s)$ – комплекснозначная функция «медленного» времени $s = \varepsilon t$. Наконец, $u_1(t, x, z, \bar{z})$ ищем в виде

$$u_1(t, x, z, \bar{z}) = z(s) \exp(iat + ix) + \bar{z}(s) \exp(-iat - ix).$$

Функции $u_2(t, x, z, \bar{z})$, $u_3(t, x, z, \bar{z})$ обладают следующими свойствами:

- 1) достаточно гладко зависят от своих аргументов;
- 2) удовлетворяют краевым условиям (106);
- 3) по переменной t имеют период $2\pi/a$;
- 4) для них выполнены равенства

$$\int_0^{2\pi/a} \int_0^{2\pi} u_j dx dt = 0$$

$$\int_0^{2\pi/a} \int_0^{2\pi} u_j \exp(\pm iat \pm ix) dx dt = 0$$

В дальнейшем класс таких функций будем обозначать для краткости через W .

Подставим суммы (107) в краевую задачу (105), (106) и для функций $u_2(t, x, z, \bar{z})$, $u_3(t, x, z, \bar{z})$ получим две неоднородные краевые задачи, первая из которых имеет вид

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} - A_0 u_2 = \varphi_2(t, x, z, \bar{z}), \quad (108)$$

$$u_2(t, x + 2\pi) = u_2(t, x), \quad (109)$$

где

$$\varphi_2(t, x, z, \bar{z}) = F_2(u_1) - \psi'(s) = a_1 \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right)^2 + b_1 \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} \right) - \psi'(s).$$

После подстановки явного выражения для u_1 получим, что

$$\varphi_2(t, x, z, \bar{z}) = a_1 \{ -z^2 \exp(2iat + 2ix) + 2z\bar{z} + \bar{z}^2 \exp(-2iat - 2ix) \} -$$

$$-b_1 i \{ [z \exp(iat + ix) - \bar{z} \exp(-iat - ix)] \times [z \exp(iat + ix) + \bar{z} \exp(-iat - ix)] \} - \psi'(s).$$

После элементарных упрощений получаем, что

$$\varphi_2(t, x, z, \bar{z}) = \eta z^2 \exp(2iat + 2ix) + \bar{\eta} \bar{z}^2 \exp(-2iat - 2ix) + 2a_1 z\bar{z} - \psi'(s),$$

$$\eta = -(a_1 + ib_1), \quad \bar{\eta} = -(a_1 - ib_1).$$

Решение неоднородной краевой задачи из класса W существует, если выполнены условия разрешимости. Использование первого из них, т.е. равенства

$$\int_0^{2\pi/a} \int_0^{2\pi} \varphi_2 dx dt = 0$$

приводит к следующему равенству

$$\psi'(s) = 2a_1 z \bar{z}.$$

Остальные два равенства выполнены. После проверки условий разрешимости решения краевой задачи (108), (109) из класса W следует искать в виде

$$u_2(t, x, z, \bar{z}) = \xi z^2 \exp(2iat + 2ix) + \bar{\xi} \bar{z}^2 \exp(-2iat - 2ix).$$

Подстановка выражения для $u_2(t, x, z, \bar{z})$ в неоднородную краевую задачу (108), (109) позволяет определить постоянные $\xi, \bar{\xi}$:

$$\xi = -\frac{a_1 + ib_1}{12d}, \quad \bar{\xi} = -\frac{a_1 - ib_1}{12d}.$$

Для $u_3(t, x, z, \bar{z})$ получаем аналогичную неоднородную краевую задачу

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_3}{\partial t} - A_0 u_3 = & -\frac{\partial u_1}{\partial s} - d \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + 2a_1 \frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\partial u_2}{\partial x} + a_2 \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right)^3 + \\ & + b_1 \left[\frac{\partial u_1}{\partial x} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + \frac{\partial u_2}{\partial x} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} \right] + b_2 \left(\frac{\partial u_1}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} \end{aligned} \quad (110)$$

$$u_3(t, x + 2\pi) = u_3(t, x). \quad (111)$$

Отмети, что

$$\frac{\partial u_1}{\partial s} = z'(s) \exp(iat + ix) + \bar{z}'(s) \exp(-iat - ix),$$

а также, что первое из условий разрешимости

$$\int_0^{2\pi/a} \int_0^{2\pi} \varphi_3 dx dt = 0,$$

где через $\varphi_3 = \varphi_3(t, x, z, \bar{z})$ обозначена вся правая часть уравнения (110), выполнено тождественно. Использование двух оставшихся интегральных равенств из этих условий после простых, но относительно громоздких вычислений приводит ко второму уравнению нормальной формы

$$z' = (\gamma d)z - (l_1 + il_2)\bar{z}z^2,$$

а также к сопряженному с ним уравнению. При этом оказалось, что

$$l_1 = \frac{b_1^2 - a_1^2}{6d} - b_2, \quad l_2 = 3a_2 - \frac{a_1 b_1}{2d}.$$

Итак, получим систему уравнений на инвариантном многообразии $M_3(\varepsilon)$:

$$\begin{aligned} \psi'(s) &= 2a_1 z \bar{z} + \dots, \\ z' &= (\gamma d)z - (l_1 + il_2)\bar{z}z^2 + \dots, \end{aligned} \tag{112}$$

где точками обозначены слагаемые, имеющие более высокий порядок малости по сравнению с выписанными. Подчеркнем, что система (112) может быть дополнена комплексно сопряженным ко второму уравнению нормальной формы (112).

В ситуации общего положения ($l_1 \neq 0$) определяющую роль играет укороченный вариант нормальной формы

$$\begin{aligned}\psi'(s) &= 2a_1 z \bar{z}, \\ z' &= (\gamma d) z - (l_1 + il_2) \bar{z} z^2,\end{aligned}\tag{113}$$

анализ которой и определяет динамику решений краевой задачи (105), (106).

3.4. Анализ нормальной формы и основной результат

Положим в системе дифференциальных уравнений

$$z(s) = \rho(s) \exp(i\varphi(s)),$$

и разделим во втором уравнении действительную и мнимую части

$$\begin{aligned}\psi' &= 2a_1 \rho^2, \\ \varphi' &= -l_1 \rho^2, \\ \rho' &= (\gamma d) \rho - l_1 \rho^3,\end{aligned}\tag{114}$$

т.е. получим нормальную форму (113) в вещественном виде. При этом определяющую роль при анализе системы (114) играет уравнение для амплитуды $\rho(s)$ ($\rho(s) \geq 0$).

Лемма 3.1. Дифференциальное уравнение (114) имеет состояние равновесия

$$s_0: \quad \rho = 0,$$

а также ненулевое состояние равновесия

$$s_1: \rho = \rho_0,$$

где $\rho_0 = \sqrt{\frac{\gamma d}{l_1}}$, которое существует, если $\frac{\gamma d}{l_1} > 0$ или $\frac{\gamma}{l_1} > 0$, так как $d > 0$ по условию.

Состояние равновесия s_0 для уравнения (114) асимптотически устойчиво, если $\gamma = -1$ ($\gamma < 0$), и неустойчиво, если $\gamma = 1$ ($\gamma > 0$).

Напротив, состояние равновесия s_1 асимптотически устойчиво, если $l_1 > 0$ ($\gamma > 0$), и неустойчиво, если $l_1 < 0$ ($\gamma < 0$) (см. например [38]).

Доказательство леммы достаточно стандартно. Анализ устойчивости использует теорему об устойчивости по первому приближению, которую следует использовать после линеаризации на соответствующем состоянии равновесия.

Состоянию равновесия s_0 соответствует семейство решений

$$\psi(s) = \psi_0, \quad z(s) \equiv 0, \quad \psi_0 = \text{const},$$

которые устойчивы, если $\gamma = -1$ (но не могут быть асимптотически устойчивыми), и неустойчивы при $\gamma = 1$.

Состоянию равновесия s_1 соответствует решение вида

$$\begin{aligned} \psi(s) &= 2a_1\rho_0^2 s + \psi_0, \quad \psi_0 = \text{const}, \\ z(s) &= \rho_0 \exp(i\sigma s), \end{aligned} \tag{115}$$

где $\sigma = -l_2\rho_0^2$. Каждое из этих решений устойчиво, если состояние равновесия асимптотически (экспоненциально) устойчиво и неустойчиво при неустойчивости s_1 .

Из результатов работ [39,40] вытекает, что справедливо следующее утверждение.

Теорема 3.2. Существует такое $\varepsilon_0 > 0$, что при всех $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$ каждому решению (115) нормальной формы

$$z = z(s), \quad \psi = \psi(s)$$

соответствует семейство автомодельных решений, для которых справедлива асимптотическая формула

$$\begin{aligned} u_*(t, x, \varepsilon) &= \left(2a_1\rho_0^2\varepsilon + o(\varepsilon)\right)t + v(t, x, \varepsilon), \\ v(t, x, \varepsilon) &= \varepsilon^{1/2}\rho_0 \left(\exp(i\omega(\varepsilon)t + ix) + \exp(-i\omega(\varepsilon)t - ix)\right) + \\ &+ \varepsilon\rho_0^2 \left(\xi \exp(2i\omega(\varepsilon)t + 2ix) + \bar{\xi} \exp(-2i\omega(\varepsilon)t - 2ix)\right) + o(\varepsilon), \end{aligned}$$

где $\omega(\varepsilon) = a - l_2\rho_0^2\varepsilon$, а постоянные ρ_0, ξ были определены при построении и анализе нормальной формы.

Подчеркнем, что наряду с указанным в рамках теоремы решением $u_*(t, x, \varepsilon)$ существуют решения $u_*(t + \Delta, x, \varepsilon) + C$, где Δ, C - произвольные действительные постоянные. Последнее замечание означает, что наряду $u_*(t, x, \varepsilon)$ существует двупараметрическое семейство пространственно неоднородных решений. С физической точки зрения между представителями этого семейства нет разницы, так как выбор этих постоянных зависит от выбора системы координат: C от расположения декартовой системы Oxz , а Δ от выбора системы отчета временных промежутков.

Возвратимся теперь к исходной задаче и положить

$$b = d(1 + \varepsilon),$$

считая при этом, что Ляпуновская величина $l_1 > 0$ ($\gamma = 1$). В таком случае получим семейство решений

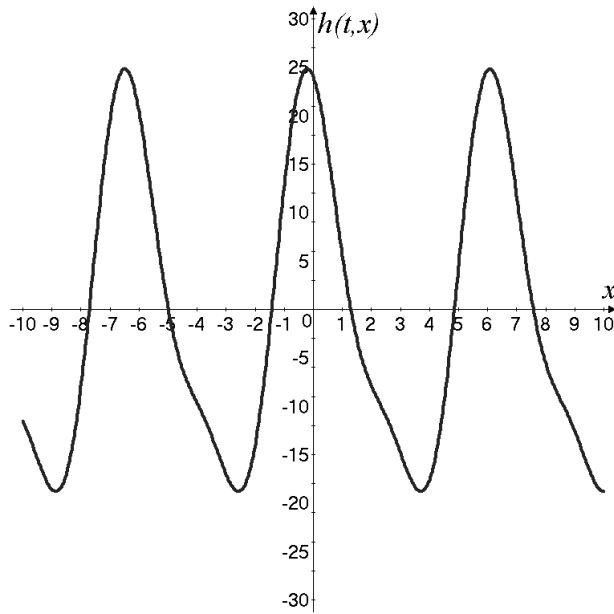
$$\begin{aligned} h(t, x) &= h_0 - \alpha t + u_*(t, x, \varepsilon) = \\ &= h_0 - \alpha t + \left(2a_1\rho_0^2\varepsilon + o(\varepsilon)\right)t + 2\varepsilon^{1/2}\rho_0 \cos(\omega(\varepsilon)t + x) + \\ &+ 2\varepsilon\rho_0^2 \left\{ \xi_1 \cos(2\omega(\varepsilon)t + 2x) - \xi_2 \sin(2\omega(\varepsilon)t + 2x) \right\} + o(\varepsilon). \end{aligned} \quad (116)$$

В последней формуле осуществлен переход к действительной форме записи, $\xi_1 = \operatorname{Re} \xi$, $\xi_2 = \operatorname{Im} \xi$ или

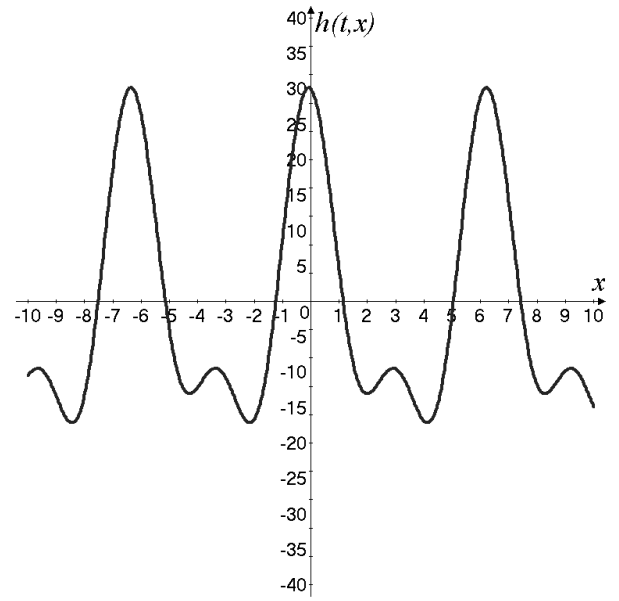
$$\xi_1 = -\frac{a_1}{12d}, \quad \xi_2 = -\frac{b_1}{12d}.$$

Напомним, что h_0 - произвольная действительная постоянная, выбор которой зависит от системы координат, т.е. с физической точки зрения величина h_0 не играет принципиальной роли. Все решения семейства (116) устойчивы и поэтому описывают физически реализуемый неоднородный рельеф.

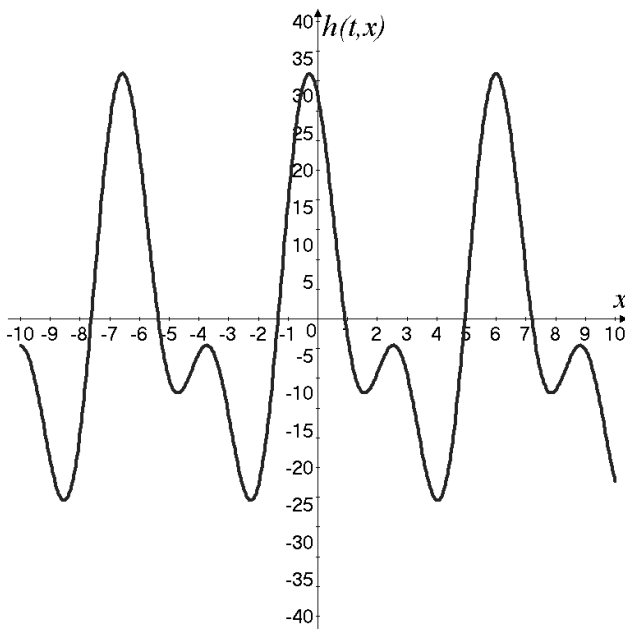
Ниже приведены графики функции (116) при выбранном значении t ($t = t_0$) при нормировке ($h_0 = 0$) $h(t, x, \varepsilon) \rightarrow \frac{1}{\varepsilon} h(t, x, \varepsilon)$.



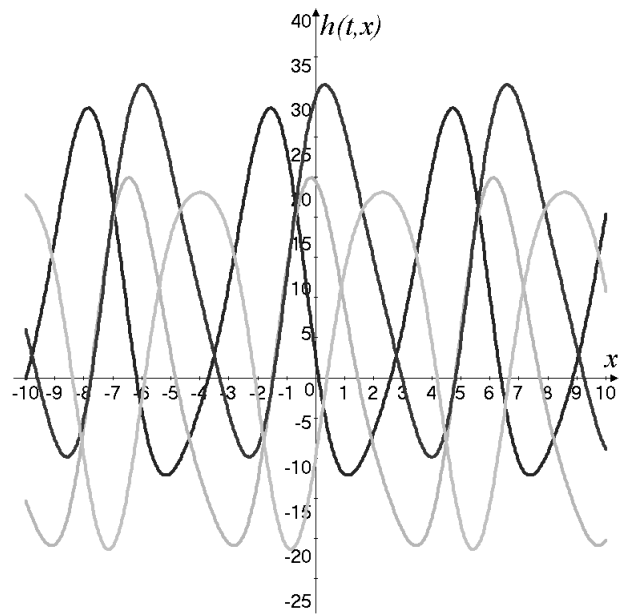
a) $a_1 = 2$, $b_1 = 2$, $t_0 = 0$.



b) $a_1 = 5$, $b_1 = 1.2$, $t_0 = 0$.



c) $a_1 = 5$, $b_1 = 5$, $t_0 = 0$.



d) $a_1 = 1$, $b_1 = 1.2$,
 $t_0 = 0, t_1 = t_0 + 4, t_2 = t_0 + 8, t_3 = t_0 + 12$

Рисунок 18 - Волнообразный рельеф на распыляемой поверхности при различном выборе параметров системы

На рисунке 18 представлены графики, воспроизводящие форму волнового рельефа при следующих значениях параметров $t = 0$, $h_0 = 0$, $\rho = 1$, $\varepsilon = 10^{-2}$ (Рис. 18 а), б), в)) и $t = 0, 4, 8, 12$, $\varepsilon = 10^{-2}$, $h_0 = 0$, $\rho = 1$, $\omega = 1$, $\alpha = 3$ (Рис. 18 д)).

3.5. Выводы и комментарии к полученным результатам

В математических моделях (см. уравнение Бредли-Харпера) коэффициенты a_1, a_2, b_1, b_2 могут быть выбраны из широкого диапазона. Так, например, часто $a_2 = b_1 = b_2 = 0$. Этот вариант можно считать классическим и сначала, как правило, рассматриваем его. Он появлялся как непосредственное обобщение одного из вариантов уравнения Вандерворста-Элст. Если дополнительно $a = 0$, т.е. угол между пучком ионов и нормалью к поверхности равен 0. Иными словами рассматривается случай перпендикулярного пучка. Тогда у нелинейной краевой задачи (105), (106) имеем семейство состояний равновесия, но не t периодических решения. При этом каждый представитель такого семейства функция, которая зависит от x (см. формулу из теоремы 3.2 при $\omega(\varepsilon) \equiv 0$), т.е. по-прежнему речь идет о неоднородном рельефе.

Если кратко сформулировать физический вывод, то можно сказать, что неоднородный рельеф возникает при потере устойчивости однородным рельефом. В свою очередь, в рамках постановки задачи за это отвечает коэффициент b , который пропорционален интенсивности пучка ионов (энергии пучка). Самый непосредственный вывод очевиден. При увеличении интенсивности до порогового значения $b = b_{np}$ ($b_{np} = d$) происходит сглаживание рельефа. При $b \approx b_k$ ($b > b_{np}$, как правило) возможно возникновение ВНР. При дальнейшем увеличении b ($b > b_{np}$) решения, описывающие ВНР, теряют устойчивость, т.е. они становятся физически нереализуемы. При этом возможно появление новых, но менее «упорядоченных» вариантов ВНР, которые, по-видимому, трудно будет назвать «волновыми».

Аналогичная проблема была рассмотрена в работе [14], где для ее анализа были использованы численные методы и получены результаты, которые согласуются с результатами этой главы. В некоторых случаях соответствующие решения были найдены в виде бегущих волн. Эти решения были получены как решения обыкновенного дифференциального уравнения

$$h' = -\alpha + a_1 (h')^2 + a_2 (h')^3 - bh'' + b_1 h' h'' + b_2 (h')^2 h'' - dh^{IV},$$

где $h(z)$, $z = x + at$.

В диссертационной работе использованы методы качественной теории дифференциальных уравнений для эволюционных задач с бесконечномерным фазовым пространством. Они позволяют находить не только соответствующие решения, но и исследовать их устойчивость. Тем самым выделить те из них, которые физически реализуемы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В соответствии с поставленной целью в работе исследованы две математические модели эрозии поверхности твердых тел ионной бомбардировкой, основанные на теории распыления П. Зигмунда. В основу рассматриваемых моделей положены два разных подхода, один из которых (модель Бредли-Харпера) учитывает зависимость коэффициента распыления от радиуса кривизны распыляемой поверхности, но рассматривает процесс распыления как локальный. Второй подход (нелокальная модель эрозии) не требует учета кривизны поверхности, так как изначально процесс распыления считается нелокальным, а коэффициент распыления полагается зависящим от координат точек падения первичного иона и выхода вторичного иона. В рамках этих подходов рассмотрены две однотипные краевые задачи, изучены их состояния равновесия и исследована их устойчивость.

По результатам анализа состояний равновесия краевых задач можно утверждать, что на настоящий момент нелокальное уравнение эрозии описывает более широкий класс структур, чем уравнение Бредли-Харпера. В частности состояниями равновесия нелокального уравнения эрозии могут быть террасы и плоскости, параметры которых определяются из принципа минимального производства энтропии (минимальной скорости распыления).

В результате анализа волновых решений краевых задач установлено, что уравнения эрозии предсказывают два абсолютно разных сценария формирования наноструктур. Так, нелокальное уравнение эрозии имеет решения в виде высокомодовых (коротких) бегущих волн. Если исходная поверхность представляет собой плоскость, то при периодических граничных условиях с периодом L нелокальное уравнение эрозии дает волновые решения с длиной волны $\lambda_n = L/n$. Здесь n – номер первой бифурцирующей моды, который изменяется с изменением L таким образом, что при заданных угле бомбардировки и глубине залегания центров энерговыделения длина волны остается неизменной.

Приведенные в настоящей работе численные результаты получены для распыления кремния ионами N_2^+ с энергией 5 кэВ. В этом случае средняя глубина залегания центров энерговыведения, т.е. расстояние от поверхности до центра энерговыведения, отсчитанное вдоль траектории первичного иона, составляет 13 нм. Максимальная длина волны первой моды, для данной глубины залегания центра энерговыведения не превышает 21,3 нм. В то же время длины волн, наблюдаемых в эксперименте, находятся в диапазоне от 20 до 150 нм. Таким образом, формирование волнообразного нанорельефа (ВНР) трудно объяснить потерей устойчивости «плоского профиля».

Волновые решения уравнения Бредли-Харпера, напротив, бифурцируют от состояния равновесия в порядке возрастания номера моды, т.е. первой возникает волна длиной L . Выше физический смысл параметра L не раскрывался. Обычно, в физике твердого тела под L понимают размеры кристалла, либо какой-то его области и граничные условия записываются в виде $z(x,t) = z(x+L,t)$. В этом случае L – латеральный размер раstra, и длина волны должна быть равна L , $L/2$, и т.д. На практике длина волны от размеров раstra не зависит, и этот факт очень осложняет интерпретацию результатов анализа уравнения Бредли-Харпера. Кроме того, в эксперименте размеры раstra обычно составляют несколько десятков микрон, а длины волн – от 20 до 150 нанометров. Таким образом, если нелокальная модель эрозии испытывает трудности с объяснением появления длинных волн, то модель Бредли-Харпера не в состоянии объяснить появление волн коротких. Разумеется, все сказанное относится к образованию волн при распылении идеально ровной плоской поверхности.

Картина существенно меняется, если на поверхности уже имеется ВНР или какие-либо топографические неоднородности. Если продолжать считать, что возникновение ВНР обусловлено исключительно процессами распыления, то начальные условия в виде ВНР из рассмотрения следует исключить. Все остальные виды поверхностной топографии могут возникать в процессе

распыления вследствие поверхностного загрязнения, либо появления неоднородностей в образующемся при распылении слое аморфного кремния.

Если на поверхности имеется топографическая неоднородность, которая может быть разложена на отрезке L в ряд Фурье, то один и тот же механизм распыления в рамках модели Бредли-Харпера и нелокальной модели эрозии будет действовать совершенно по-разному. Так модель Бредли-Харпера будет «подхватывать» и растить длинноволновые моды и сглаживать коротковолновые. По мере ухода коэффициента диффузии в закритическую область, будут развиваться волны длиной L , $L/2$, $L/3$, ... Результатом суперпозиции таких мод будут так называемые биения, примеры которых приведены на рисунке 18. В экспериментальных исследованиях подобные биения до сих пор не наблюдались и, как уже отмечалось, длина волны при заданных параметрах распыления всегда постоянна и не зависит от размера неоднородностей L .

В рамках нелокальной модели эрозии имеет место другой сценарий. Сначала растет амплитуда волны с длиной L/n , потом $L/(n\pm 1)$ и т.д. При этом независимо от размеров раstra длина волны первой моды (а соответственно и всех остальных) будет всегда одна и та же. Результатом суперпозиции таких волн будут структуры сходные с волновыми пакетами и ямками травления. Похожие структуры наблюдаются практически во всех экспериментах по распылению кремния и других материалов.

Резюмируя сказанное выше, можно утверждать, что:

- Согласно результатам анализа модели Бредли-Харпера одной из причин формирования неоднородного рельефа является смена устойчивости однородных состояний равновесия, т.е. процесс самоорганизации.
- Аналогичный механизм формирования неоднородного рельефа имеет место и для нелокального уравнения эрозии. Отличие состоит в том, что данная модель дает возможность объяснения возникновения коротковолнового рельефа, т.е. нелокальная модель позволяет описать более широкий класс экспериментально наблюдаемых структур.

- Подход, основанный на применении качественной теории дифференциальных уравнений (теории бифуркаций), позволяет предложить единый механизм формирования неоднородного нанорельефа.
- С использованием предложенного подхода показано, что нелокальное уравнение эрозии учитывает более тонкие эффекты при описании процесса распыления. В частности, данная модель описывает коротковолновый рельеф поверхности.
- Нелокальная модель эрозии объясняет возникновение и иного типа неоднородного рельефа, известного под названием «террасы».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Материалы сайта International Technology Roadmap for Semiconductors [электронный ресурс]. – 2009 Edition. – Режим доступа: <http://www.itrs.net/Links/2009ITRS/Home2009.htm>.
2. Donis G. Flagello The Future of Optical Lithography – Extinction or Evolution? // Proc. of 2007 Lithography Workshop. - Rio Grande. - Puerto Rico. - 2007. - Dec. 9 – 13.
3. Официальный сайт компании ASML [электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.asml.com/asml/show.do?ctx=5869&rid=25489>.
4. Ed. by Sheath, J.R., Smith, B.W. Microlithography: Science and Technology // Published by Marcell Dekker Inc. - N.-Y. - 1998.
5. Viheriälä, J., Rytönen, T., Niemi, T., Pessa, M. Narrow linewidth templates for nanoimprint lithography utilizing conformal deposition // Nanotechnology. - 2008. - V. 19. - P. 015302.
6. Hu, W., Bernstein, G.H., Sarveswaran, K., Lieberman, M. Sub-10 nm e-beam lithography using cold development of PMMA // J. Vac. Sci. Technol. B. - 2004. – V. 22. - № 4. - P. 1711–1716.
7. Vieu, C., Carcenac, F., Pépin, A., Chen, Y., Mejias, M., Lebib, A., Manin-Ferlazzo, L., Couraud, L., Launois, H. Electron beam lithography: resolution limits and applications // Applied Surface Science. -2000. - V. 164. - № 1-4. - P. 111-117.
8. Henini, M. EBL opening up the nano-world // Iii-Vs Review. – 1999. - V.12. - № 6. - P. 18-23.
9. Фатьянова, Г.И., Васильев, Б.Н. Перспективы разработки многолучевых систем для низковольтной электронной литографии // Известия РАН, Серия физическая. – 2007. - Т. 71. - № 10. - С. 1502–1506.
10. Sematech Litho Forum: Sematech mulling multi-beam mask writer effort [электронный ресурс]. - 2010. – Режим доступа: http://www.fabtech.org/news/_a/sematech_litho_forum_sematech_mulling_multi-beam_mask_writer_effort/#.

11. Tseng, A.A., Kuan Chen, Chen, C.D., Ma, K.J. Electron beam lithography in nanoscale fabrication: recent development IEEE Transactions on Electronics Packaging Manufacturing. -2003. - V.26. - № 2. - P. 141- 149.
12. Smirnov, V.K., Kibalov, D.S., Orlov, O.M., Graboshnikov, V.V. Technology for nanoperiodic doping of a metal–oxide–semiconductor field-effect transistor channel using a self-forming wave-ordered structure // Nanotechnology. – 2003. - V. 14. - P. 709 - 715.
13. Кибалов, Д.С. Волнообразные наноструктуры на поверхности кремния, инициируемые ионной бомбардировкой: автореф. дис. д. ф.-м. наук: 05.27.01 / Кибалов Дмитрий Станиславович. – Москва. – 2005. - 42 с.
14. Bradley, R.M., Harper, J.M.F. Theory of ripple topography induced by ion bombardment // J. Vac. Sci. Technol. A. - 1988. - V. 6. № 4. - P. 2390 - 2395.
15. Смирнов, В.К., Кибалов, Д.С., Лепшин, П.А., Бачурин, В.И. Влияние топографических неоднородностей на процесс образования волнообразного микрорельефа на поверхности кремния // Известия РАН, Серия физическая. – 2000. - Т. 64. - С. 626-631.
16. Tapas Kumar Chini¹, Debi Prasad Datta and Satya Ranjan Bhattacharyya Ripple formation on silicon by medium energy ion bombardment // J. Phys.: Condens. Matter 21. – 2009. - P. 224004.
17. Sigmund, P. A mechanism of surface micro-roughening by ion bombardment // J. Mater. Sci. -1973. - V. 8. - P.1545 - 1553.
18. Бериш, Р. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой: Изд. Мир, 1984. - 336 с.
19. Bachurin, V.I., Rudy, A.S., Smirnov, V.K. Nanoscale Model of Surface Erosion by Ion Bombardment // Radiation Effects and Defects in Solids. - 2006. - V. 161.- № 6. - P. 319-329.
20. Carter, G. The physics and applications of ion beam erosion // J. Phys. D.: Appl. Phys. - 2001. - V. 34. - R 1 – R 22.

21. Рудый, А.С., Бачурин, В.И. Пространственно нелокальная модель эрозии поверхности ионной бомбардировкой // Известия РАН, Серия физическая. – 2008. - Т. 72. - № 5. - С. 624 - 629.
22. Материалы сайта [электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://vs03013.virtualserver.priorweb.be/index.php?p=69&m=122>.
23. Yamamura, Y., Shigeru Shindo An empirical formula for angular dependence of sputtering yields // Radiation effects. - 1984. – V. 80. - № 1-2. - P. 57-72.
24. Рудый, А.С., Куликов, А.Н., Метлицкая, А.В. Моделирование процессов формирования наноструктур при распылении поверхности ионной бомбардировкой // Микроэлектроника. – 2011. – Т. 40. - № 2. – С. 109 – 118.
25. Метлицкая, А.В., Куликов, А.Н., Рудый, А.С. Механизм формирования волнового нанорельефа при эрозии поверхности ионной бомбардировкой в рамках модели Бредли-Харпера // Микроэлектроника. – 2013. – Т. 42. – № 4. – С. 298 – 305.
26. Соболев, С.Л. Некоторые применения функционального анализа в математической физике: Изд. ЛГУ, 1950. - 256 с.
27. Sigmund, P. Sputtering by ion bombardment. Theoretical concepts. Sputtering by particle bombardment. 1. / Behrisch R. (Ed). Berlin: Springer-Verlag, 1981. - P. 9–71.
28. Elst, K. and Vandervorst, W. Influence of the composition of the altered layer on the ripple formation // J. Vac. Sci. Technol. A. -1994. - V. 12. – P. 3205.
29. Зайцев, В.Ф, Полянин, А.Д. Справочник по дифференциальным уравнениям с частными производными первого порядка: Изд. «Физико-математическая литература». Москва, 2003. – 416 с.
30. Hopf, E. Generalized solutions of nonlinear equations of first order. // J. Math. Mech. - 1965. - V. 14. - P. 951-973.
31. Кружков, С Н. Обобщенные решения уравнений Гамильтона-Якоби of the eikonal type. // Мат. сборник, 1975. - Т. 27. - С. 406-466.
32. Lions, P.L. Generalized Solutions of Hamilton-Jacobi Equations. — Boston: Pitman, 1982.

33. Birkgan, S.E., Bachurin, V.I., Rudy, A.S., Smirnov, V.K. Modeling of Surface Topography Development During Ion Sputtering of Solids // Radiation Effects and Defects in Solids. -2004. - V. 159. - № 3. - P. 163-172.
34. Кудряшов, Н.А., Рябов, П.Н., Стриханов, М.Н. Численное моделирование формирования наноструктур на поверхности плоских подложек при ионной бомбардировке // Ядерная физика и инжиниринг. - 2010. - Т. 1. - № 2. - С. 151–158.
35. Куликов, А.Н. О гладких инвариантных многообразиях полугруппы нелинейных операторов в банаховом пространстве / А.Н. Куликов // Исследования по устойчивости и теории колебаний: Межвуз. сб. Ярославль, 1976. - С. 67-85.
36. Соболевский, П.Е. Об уравнениях параболического типа в банаховом пространстве // Тр. Московского математического общества, 1961. Т. 10. - С. 297-350.
37. Марсден, Дж. Бифуркация рождения цикла и ее приложения / Дж. Марсден, М. Мак-Кракен. – М.: Мир, 1980. - 368 с.
38. Куликов, А.Н. О бифуркациях рождения инвариантных торов // Исследования по устойчивости теории колебаний, 1983. – С. 112-117.
39. Колесов, А.Ю., Куликов, А.Н. Инвариантные торы нелинейных эволюционных уравнений // Ярославль, издательство ЯрГУ, 2003. - С. 103.
40. Куликов, А.Н., Куликов, Д.А. Локальные бифуркации бегущих волн обобщенного кубического уравнения Шредингера // Дифференциальные уравнения, 2010. - Т. 40. - №9. - С. 1290-1299.
41. Kuramoto, Y. Chemical Oscillations, Waves, and Turbulence. Berlin: Springer, 1984. – 156 p.
42. Sivashinsky, G. Nonlinear analysis of hydrodynamic instability in laminar flames I. Derivation of basic equations // Acta Astron. -1977. - V. 4. - P. 1177–1206.