



UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID  
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS

**TESIS DOCTORAL**

**Invariancia de Escala y Formación de Patrones en la Erosión de  
Superficies**

**Autor:** Javier Muñoz García

**Director:** Rodolfo Cuerno Rejado

**Leganés, Marzo de 2007**



*A todos aquellos que con su apoyo  
han hecho posible este trabajo.*

*En especial, a mi familia.*



---

# Índice general

---

|  |           |
|--|-----------|
| <b>Prefacio</b>  | <b>IX</b> |
| <b>1. Caracterización de superficies</b>                                   | <b>1</b>  |
| 1.1. Introducción . . . . .  | 1         |
| 1.2. Observables . . . . .   | 4         |
| 1.3. Superficies con invariancia de escala y rugosidad cinética . . . . .  | 6         |
| 1.4. Superficies con escalas características . . . . .                     | 9         |
| 1.5. Aproximaciones continuas . . . . .                                    | 12        |
| 1.5.1. Ecuación de Edwards-Wilkinson . . . . .                             | 13        |
| 1.5.2. Ecuación lineal de MBE . . . . .                                    | 16        |
| 1.5.3. Ecuación Kardar-Parisi-Zhang . . . . .                              | 17        |
| 1.5.4. Ecuación de Kuramoto-Sivashinsky . . . . .                          | 18        |
| 1.5.5. Ecuación de Korteweg-de Vries modificada por disipación             | 20        |
| 1.5.6. Otras ecuaciones relevantes . . . . .                               | 22        |
| 1.6. Conclusiones . . . . .  | 24        |
| <b>2. Fundamentos de la erosión iónica y resultados experimentales</b>     | <b>25</b> |
| 2.1. Origen y aplicaciones de la erosión iónica . . . . .                  | 25        |
| 2.2. El proceso de erosión . . . . .                                       | 28        |
| 2.3. Evolución de la morfología superficial durante el bombardeo . . . . . | 31        |
| 2.4. Resultados experimentales . . . . .                                   | 33        |
| 2.4.1. Materiales amorfos o amorfizables . . . . .                         | 34        |
| 2.4.1.1. Estrías o surcos (incidencia oblicua) . . . . .                   | 34        |
| 2.4.1.2. Puntos u hoyos (incidencia normal) . . . . .                      | 39        |
| 2.4.1.3. Puntos o fosos (sustrato rotante) . . . . .                       | 42        |
| 2.4.1.4. Superficies rugosas . . . . .                                     | 44        |
| 2.4.2. Metales . . . . .   | 46        |
| 2.5. Conclusiones . . . . .  | 49        |

|  |           |
|--|-----------|
| <b>3. Modelos de erosión iónica</b>  | <b>53</b> |
| 3.1. Modelos discretos . . . . .   | 53        |
| 3.2. Teoría de Sigmund . . . . .   | 57        |
| 3.3. Teoría de Bradley y Harper . . . . .  | 61        |
| 3.3.1. Dependencia de la velocidad de erosión con las curvaturas<br>principales . . . . .                  | 62        |
| 3.3.2. Dinámica de la morfología superficial . . . . .   | 67        |
| 3.4. Ampliación de la teoría lineal a metales; nuevas distribuciones de<br>energía . . . . .               | 70        |
| 3.4.1. Superficies unidimensionales: rendimiento de erosión . . .  | 72        |
| 3.4.2. Superficies bidimensionales . . . . .   | 73        |
| 3.4.2.1. Rendimiento de erosión . . . . .  | 74        |
| 3.4.2.2. Efecto de la velocidad de erosión en la morfo-<br>logía superficial . . . . .                     | 75        |
| 3.5. Teoría no lineal . . . . .  | 77        |
| 3.5.1. Ecuación continua para la altura de la superficie . . . . .   | 77        |
| 3.5.2. Análisis y predicciones morfológicas de la ecuación no lineal                                       | 79        |
| 3.5.2.1. Régimen lineal. Altas temperaturas . . . . .  | 79        |
| 3.5.2.2. Régimen lineal. Bajas temperaturas . . . . .  | 80        |
| 3.5.2.3. Régimen no lineal . . . . .   | 80        |
| 3.5.3. Incidencia normal . . . . .   | 82        |
| 3.5.4. Sustrato rotante . . . . .  | 83        |
| 3.5.5. Extensión de la teoría no lineal . . . . .  | 85        |
| 3.6. Otros modelos lineales . . . . .  | 85        |
| 3.7. Comparación de la teoría actual con los experimentos, y limitaciones                                  | 87        |
| 3.8. Conclusiones . . . . .  | 89        |
| <br>   |           |
| <b>4. Modelos “hidrodinámicos” de erosión</b>  | <b>91</b> |
| 4.1. Modelos de formación de ondulaciones en arena . . . . .   | 91        |
| 4.1.1. Ideas generales del transporte eólico de arena . . . . .  | 93        |
| 4.1.2. Descripción analítica del modelo y ecuaciones efectivas<br>para la evolución de la altura . . . . . | 94        |
| 4.2. Erosión iónica: modelos hidrodinámicos . . . . .  | 97        |
| 4.2.1. Estudio lineal . . . . .  | 98        |
| 4.2.2. Estudio no lineal . . . . .   | 99        |
| 4.2.2.1. Conceptos generales del modelo y descripción<br>analítica . . . . .                               | 100       |
| 4.2.2.2. Solución plana y análisis de estabilidad lineal . .   | 102       |
| 4.2.2.3. Análisis no lineal y derivación de una ecuación<br>efectiva para la altura . . . . .              | 108       |
| 4.2.2.4. Incidencia normal . . . . .   | 113       |
| 4.2.2.5. Incidencia rotante . . . . .  | 113       |
| 4.3. Conclusiones . . . . .  | 115       |

|   |            |
|---|------------|
| <b>5. Estudio analítico y numérico del modelo unidimensional</b>                                    | <b>117</b> |
| 5.1. Reducción del modelo “hidrodinámico” de erosión al caso $1d$ . . .                             | 117        |
| 5.1.1. Análisis preliminar y comparación de ambos sistemas . . .                                    | 119        |
| 5.2. Estado actual de la teoría de evolución de patrones para ecuaciones<br>interfaciales . . . . . | 123        |
| 5.3. Estudio de la ecuación efectiva de erosión unidimensional . . . . .                            | 124        |
| 5.4. Relación con los parámetros experimentales . . . . .   | 131        |
| 5.5. Conclusiones . . . . .   | 132        |
| <b>6. Estudio de las ecuaciones de erosión bidimensionales</b>                                      | <b>135</b> |
| 6.1. Incidencia normal . . . . .  | 135        |
| 6.2. Sustrato rotante . . . . .   | 141        |
| 6.3. Incidencia oblicua . . . . .   | 144        |
| 6.3.1. Régimen lineal . . . . .   | 146        |
| 6.3.2. Régimen no lineal . . . . .  | 148        |
| 6.3.3. Modos de cancelación . . . . .   | 150        |
| 6.4. Comparación cualitativa con los experimentos . . . . .   | 151        |
| 6.5. Conclusiones . . . . .   | 154        |
| <b>Conclusiones generales y trabajo futuro</b>  | <b>157</b> |
| 6.6. Conclusiones generales . . . . .   | 157        |
| 6.7. Trabajo futuro . . . . .   | 159        |
| <b>Publicaciones</b>  | <b>161</b> |
| <b>A. Comportamiento de escala para cortes unidimensionales en superficies</b>                      | <b>163</b> |
| <b>B. Expresiones analíticas para los coeficientes de la velocidad de erosión</b>                   | <b>167</b> |
| B.1. Distribución Gaussiana modificada $1d$ . . . . .   | 168        |
| B.2. Distribución exponencial $1d$ . . . . .  | 169        |
| B.3. Distribución Gaussiana modificada $2d$ . . . . .   | 170        |
| <b>C. Orientación y longitud de onda lineal de las ondulaciones</b>                                 | <b>171</b> |
| <b>Referencias</b>  | <b>175</b> |



---

# Prefacio

---

En este trabajo nos centraremos en fenómenos que ocurren fuera del equilibrio, es decir, en sistemas que experimentan de forma espontánea algún tipo de cambio en su estado debido a las condiciones que les impone su entorno y, más concretamente, en el estudio de superficies. El interés en la dinámica de éstas se ha visto incrementado en los últimos años debido a sus múltiples aplicaciones, que se extienden desde la nanotecnología hasta los sistemas biológicos. Además, desde el punto de vista de la Física Estadística, representan ejemplos de fenómenos universales en un amplio rango de escalas que pueden ser estudiados desde una perspectiva general. Para ello, consideraremos el caso particular de una superficie sometida a bombardeo iónico, donde la evolución dinámica de la morfología ocurre a escala submicrométrica, pero que, como veremos en los siguientes capítulos, comparte muchas características con otros fenómenos macroscópicos y fuera del equilibrio como la invariancia de escala, el crecimiento de dominios, las inestabilidades morfológicas o la formación y evolución de patrones, entre otras.

Los principales objetivos de esta memoria son: poner de manifiesto los mecanismos físicos necesarios para caracterizar correctamente el proceso de erosión iónica y la formación de estructuras superficiales mediante esta técnica; proponer nuevos modelos teóricos que predigan de forma satisfactoria algunas características generales observadas en estos sistemas; extender estos modelos a otros fenómenos fuera del equilibrio y analizarlos desde el punto de vista de la Mecánica Estadística y las teorías actuales de formación de patrones.

Para ello, el contenido de la memoria se dividirá como sigue:

En el capítulo uno se introducen las propiedades y magnitudes físicas necesarias para caracterizar el tipo de superficies que se estudiarán en el resto de la memoria. Se muestran brevemente algunas ecuaciones diferenciales que describen la evolución de estos sistemas y que, por razones históricas y/o su relación directa con las ecuaciones que aparecerán en los capítulos siguientes, hemos considerado más relevantes.

En el capítulo dos nos centraremos en los procesos de erosión iónica, indicaremos en qué consisten, a qué tipos de superficies dan lugar, y cuáles son sus orígenes y aplicaciones. Tras esto, haremos una breve recopilación de la variedad

de resultados experimentales que se puede encontrar en la bibliografía, indicando las tendencias generales de comportamiento en función de las condiciones experimentales.

En el capítulo tres se estudiarán las teorías existentes que abordan este fenómeno, e indicaremos las características experimentales que describen correctamente y qué limitaciones tienen. Estas teorías se centran, principalmente, en materiales amorfos o amorfizables, aunque se presentarán nuevos resultados que, basándose en estos modelos, permiten explicar algunas de las observaciones experimentales obtenidas en metales.

En el capítulo cuatro se formula una nueva descripción del proceso de erosión iónica basada en modelos de formación de ondulaciones en la arena debido a la acción del viento, que nos permiten introducir algunos mecanismos adicionales no considerados en las teorías continuas anteriores. Mediante un análisis de escalas múltiples y otras técnicas analíticas se obtiene una ecuación general que permite describir de forma efectiva la evolución de la superficie sometida a bombardeo.

En el capítulo cinco se analiza analítica y numéricamente el caso unidimensional del modelo anterior y se compara la formulación original con la ecuación efectiva obtenida. Esta ecuación generaliza los resultados de las teorías anteriores y permite describir algunas características adicionales observadas en los experimentos. Por otro lado, dentro del marco de la Física Estadística de no-equilibrio y la formación de patrones, representa un ejemplo de modelo continuo que muestra ciertas propiedades novedosas.

En el capítulo seis se analiza la ecuación efectiva de erosión bidimensional, de mayor interés experimental, en el caso de que el haz de iones se dirija normalmente a la superficie de la muestra, lo haga de forma oblicua y en el caso particular de que se gire simultáneamente el blanco mientras se bombardea. Veremos que la evolución de la morfología descrita por esta ecuación presenta características novedosas que coinciden con las observaciones experimentales.

Por último, mostraremos las conclusiones generales del trabajo realizado, sus limitaciones, cuestiones abiertas y las posibles direcciones a seguir para completar la descripción del fenómeno de la erosión en superficies sometidas a bombardeo iónico.

La aportación original de este trabajo se encuentra recogida, fundamentalmente, en la sección 3.4 del capítulo 3, en el modelo y tratamiento analítico descrito en el capítulo 4 para el caso de la erosión iónica, en los capítulos 5 y 6 en su totalidad, y en los apéndices A, B y C.

Para concluir esta introducción, quisiera agradecer a todos aquellos que han trabajado conmigo, aquí, en el Departamento de Matemáticas de la Universidad Carlos III de Madrid, y, en especial, a todos los miembros del GISC. Debo destacar en esta colaboración profesional a Mario Castro y, sobre todo, a Rodolfo Cuerno, mi director, por su paciencia y dedicación. No quiero dejar de agradecer, también, a Luis Vázquez y Raúl Gago por el trabajo y el tiempo compartidos.

Este trabajo ha sido posible gracias a los proyectos del Ministerio de Educación y Ciencia BFM2003-07749-C05-01 y FIS2006-12253-C06-01, y de la Comunidad Autónoma de Madrid GR/MAT/0431/2004, y especialmente gracias a una beca de Formación de Personal Universitario (FPU) del Ministerio de Educación y Ciencia.

J. M. G. Leganés, Marzo de 2007



# 1

---

## Caracterización de superficies

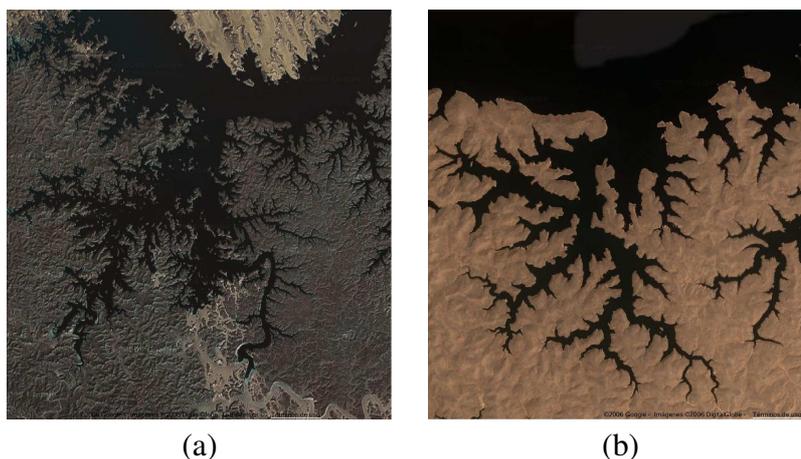
---

En este capítulo describiremos algunas propiedades y magnitudes relevantes del tipo de sistemas dinámicos en los que se centrará esta memoria. Definiremos las variables más comúnmente utilizadas en el estudio de las superficies y discutiremos algunos conceptos básicos sobre su caracterización. Presentaremos las ecuaciones continuas de mayor relevancia histórica y/o más cercanas a la formulación que se utilizará en los siguientes capítulos.

### 1.1. Introducción

El concepto de superficie es simple: según la Real Academia de la Lengua, en su primera acepción, es el “límite o término de un cuerpo, que lo separa y distingue de lo que no es él”, otra posible definición sería: “intercara que separa dos fases homogéneas”. En cualquier caso, ambas definiciones coinciden con la idea general de la mayoría de la gente. Otra cuestión más complicada es cómo describir su morfología matemáticamente, cómo caracterizar su movimiento espacial, y cómo se desarrolla dicha superficie en el transcurso del tiempo. En la naturaleza se encuentran superficies que presentan una gran variedad de morfologías y que, en general, no tienen por qué verificar determinadas propiedades matemáticas que nos permitan caracterizarlas con facilidad, aunque, con bastante frecuencia, dentro de un cierto rango de escalas, suelen mostrar algunas particularidades que nos serán de utilidad para clasificarlas en distintos grupos. En general, para la mayoría de

ellas, la forma depende de la distancia a la que se observen. Existen otras, sin embargo, cuya forma no depende de la escala considerada y que se muestran idénticas independientemente de la distancia a la que sean descritas. Estas superficies se encuentran con frecuencia en la naturaleza, como por ejemplo en la formación de nubes, orillas de ríos y mares, montañas, hojas y frutos de diversas plantas, y muchas otras. En la figura 1.1 se muestra uno de estos ejemplos; son fotografías tomadas por satélite de la orilla del lago Nasser<sup>1</sup> donde la escala de la figura 1.1(b) aparece ampliada 5 veces respecto a la figura 1.1(a). Puede observarse que la forma de ambas orillas es estadísticamente idéntica. Esta propiedad está asociada con un tipo de objeto geométrico llamado *fractal*, cuya estructura básica se repite en diferentes escalas y, como consecuencia de ello, no está caracterizado por ninguna longitud. A diferencia del ejemplo matemático, en la vida real, como ocurre en la figura 1.1, lo que suele encontrarse es que al ampliar o reducir el tamaño del objeto se obtiene otro estadísticamente idéntico; se dice entonces que se tiene un *fractal estocástico*.

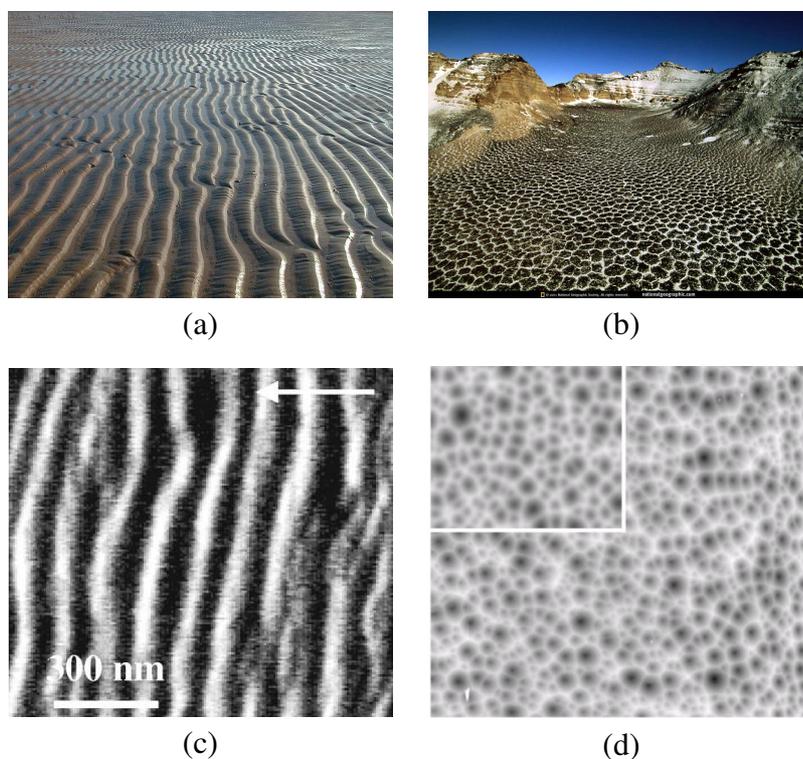


**Figura 1.1** — Imágenes por satélite de la orilla del lago Nasser de tamaño: (a)  $20 \times 20$  km<sup>2</sup>; (b)  $4 \times 4$  km<sup>2</sup>. Tomada de <http://maps.google.com>.

A veces, en los experimentos y en la naturaleza se observa una propiedad similar a la descrita anteriormente conocida como *autoafinidad*. Las superficies que presentan esta propiedad son morfológicamente idénticas cuando cambiamos las escalas pero, a diferencia de los objetos fractales ya descritos, debemos ampliar

<sup>1</sup>Llamado así en honor de Gamal Abdel Nasser (1918-1970), presidente de Egipto. El lago Nasser es un lago artificial creado en la cuenca media del río Nilo. Situado al sur de Egipto, se extiende hasta pasar la frontera con Sudán. En sentido estricto, se llama Lago Nasser sólo a la parte que se encuentra en territorio egipcio y que ocupa el 83 % de la superficie total, mientras que los sudaneses prefieren llamar a su parte Lago de Nubia. Es resultado de la construcción de la Presa de Asuán entre 1958 y 1970. Mide aproximadamente 550 km de largo y 35 km de ancho en su punto de mayor amplitud, cerca del Trópico de Cáncer. Ocupa una superficie total de 5250 km<sup>2</sup> y su capacidad es de 157 km<sup>3</sup> de agua.

o reducir las escalas de diferente forma según la dirección considerada. Este tipo de superficies que, a veces, reciben el nombre de fractales anisótropos, aparecen también con mucha frecuencia en nuestra vida diaria: al derramar un vaso de agua sobre una mesa, al quemar una hoja de papel, etc. y, al igual que los objetos fractales isotrópicos, han motivado un gran interés entre físicos experimentales y teóricos en las últimas décadas. Un manual de referencia donde se abordan estos fenómenos es Barabási y Stanley (1995), en el que se estudia el crecimiento de superficies desde una perspectiva general y se citan multitud de ejemplos y aplicaciones experimentales en los que además de la autoafinidad aparece otro concepto relacionado con la evolución morfológica de la superficie denominado *rugosidad cinética* (en inglés “kinetic roughening”), que será descrito en detalle en la sección 1.3.



**Figura 1.2** — Patrones de diferentes formas y escalas características. Mientras que los patrones de las figuras (a) y (b) se producen sobre el suelo debido a efectos naturales (el arrastre de la arena por el agua del mar o el depósito de escarcha, respectivamente) y sus escalas espaciales son del orden de los centímetros o metros, en el caso de (c) y (d) la escala característica de las estructuras es del orden de 100 nm. Las figuras (c) y (d) son muestras de silicio erosionadas con iones bajo diferentes condiciones experimentales. El recuadro superior de la figura (d) ha sido obtenida mediante simulaciones numéricas. Figura (c) tomada de Habenicht *et al.* (2002). Figura (d) tomada de Castro *et al.* (2007).

Además de las anteriores, existen otro tipo de superficies que sí presentan una o varias longitudes representativas y cuya estructura básica se repite solamente a

estas escalas; se dice entonces que tenemos un patrón espacial (en la figura 1.2 se muestran ejemplos diversos tipos de patrones con formas y tamaños diferentes). En el caso, por ejemplo, de los surcos en la arena debidos a la fuerza del viento o el agua [figura 1.2(a)], la distancia entre las ondulaciones es aproximadamente la misma, y el hecho de que el patrón no pueda observarse si miramos con una lupa a una distancia menor que su separación o desde una altura mucho mayor que la amplitud de las estrías, nos indica que esta superficie no presenta invariancia de escala. Además, estos patrones pueden evolucionar en el tiempo modificando su forma o tamaño de una forma más o menos compleja, con lo que la comprensión de estos sistemas supone todo un reto desde el punto de vista científico. Por otro lado, la posibilidad de controlar determinadas características morfológicas de estas estructuras está adquiriendo una creciente importancia tecnológica, sobre todo a escalas submicrométricas, debido al tremendo auge que ha experimentado en los últimos años la nanotecnología. Por estos motivos, durante las últimas décadas este tipo de sistemas han sido objeto de un profuso estudio en multitud de procesos físicos [Cross y Hohenberg 1993].

Resultaría de gran interés ser capaces de describir todos los tipos de superficies presentados anteriormente mediante herramientas matemáticas. En esta tarea nos centraremos en el resto del capítulo, donde, además de su mera descripción, se mostrarán las diversas técnicas que se han desarrollado en los últimos años para tratar de modelar y predecir su evolución temporal. Dependiendo del enfoque con que se aborde el estudio de su formación y crecimiento de éstas, se pueden diferenciar entre modelos continuos, que estudian las superficies utilizando ecuaciones diferenciales (estocásticas), y modelos discretos, donde se proponen una serie de reglas microscópicas que gobiernan su evolución y que se implementan computacionalmente con el fin de estudiar su influencia en el comportamiento mesoscópico de la superficie. La utilización de estos modelos, junto con las observaciones experimentales, obtenidas mediante diversas técnicas, han permitido a la comunidad científica hacer grandes avances en el conocimiento de estos sistemas.

## 1.2. Observables

En esta sección mostraremos cómo caracterizar matemáticamente las superficies y definiremos los observables más utilizados en el análisis de éstas. Estas magnitudes nos serán de utilidad en el resto de la memoria. Con este objetivo consideraremos una función univaluada que, en el caso aquí mostrado, será continua (aunque su generalización al caso discreto es inmediata) y que denominaremos  $h(\mathbf{x})$ . Esta función representa la altura de la intercara sobre un punto  $\mathbf{x}$  del substrato  $d$ -dimensional, que consideraremos de un cierto tamaño  $L$  en cada una de sus dimensiones. Definimos la *rugosidad global* o *anchura total de la superficie*,  $W$ , como

$$W^2(t) = \left\langle \frac{1}{L^d} \int d\mathbf{x} [h(\mathbf{x}, t) - \bar{h}(t)]^2 \right\rangle, \quad (1.1)$$

donde

$$\bar{h}(t) = \frac{1}{L^d} \int h(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}, \quad (1.2)$$

representa la *altura media* de la superficie en cada instante y los corchetes denotan la media sobre el número de realizaciones si se trata de un proceso de crecimiento de carácter estocástico. Esta medida coincide con la varianza o dispersión para un proceso aleatorio y nos da una estimación de la diferencia de altura de todos los puntos respecto a su valor medio. No suelen considerarse momentos de mayor orden, pues el momento de primer orden,  $\bar{h}$ , y el de segundo orden,  $W$ , suelen ser suficientes para caracterizar la superficie para la mayoría de los propósitos, si bien, a veces, puede ocurrir que se necesite describir la superficie en mayor detalle y haya que acudir a momentos de mayor orden para poder diferenciar entre distintas morfologías. Si en vez de extender el promedio a todo el sistema lo hacemos a una ventana de un cierto tamaño lineal  $r$ , se obtiene lo que se denomina anchura local de la superficie de tamaño  $r$ , que representaremos por  $w_r(t)$ , de forma que  $w_L(t) = W(t)$ .

Además de esta magnitud, suelen emplearse otras medidas para caracterizar la evolución de las superficies. En numerosos experimentos se obtiene, bien directa, o bien indirectamente, una medida de la amplitud espectral de la intercara. La magnitud que caracteriza esta amplitud se denomina *factor de estructura* o *espectro de potencia*, PSD (de sus siglas en inglés “power spectral density”), y se define como

$$PSD(\mathbf{q}, t) = \langle \hat{h}(\mathbf{q}, t) \hat{h}(-\mathbf{q}, t) \rangle, \quad (1.3)$$

donde  $\hat{h}(\mathbf{q}, t)$  es la *transformada espacial de Fourier* de  $h(\mathbf{x}, t)$ , la cual se define para una función  $h(\mathbf{x})$  periódica y  $d$ -dimensional, con periodo lineal  $L$  en cada una de sus dimensiones, como

$$\hat{h}(\mathbf{q}) = \frac{1}{L^{d/2}} \int_{[0, L^d]} d\mathbf{x} h(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}, \quad (1.4)$$

donde los vectores de onda verifican  $\mathbf{q} = 2\pi(m_1, \dots, m_d)/L$  con  $m_i \in \mathbb{Z}$ . Se puede obtener nuevamente  $h(\mathbf{x}, t)$  a partir de  $\hat{h}(\mathbf{q}, t)$  mediante la *transformada de Fourier inversa*, que en nuestro caso se define como

$$h(\mathbf{x}) = \frac{1}{L^{d/2}} \sum_{\mathbf{q}=-\infty}^{\infty} \hat{h}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}. \quad (1.5)$$

Este observable está relacionado con la rugosidad global del sistema según

$$W^2(t) = \frac{1}{L^d} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} PSD(\mathbf{q}, t), \quad (1.6)$$

y nos suministra información sobre qué longitudes de onda son más relevantes en la morfología del sistema, de forma que el espectro de potencia para aquellos

modos asociados con las longitudes representativas es mayor que para aquellas escalas menos importantes. De esta forma, tal como se verá en la sección 1.4, si representamos la función  $PSD(\mathbf{q})$  frente a  $\mathbf{q}$  para una superficie que presente una longitud característica como las descritas en la sección 1.1, se observará un máximo en torno al vector de onda asociado con esta escala. Podemos definir otra magnitud que nos da una medida de la distancia a la cual el patrón se encuentra ordenado a partir de la anchura a media altura (FWHM, de sus siglas en inglés) de este máximo. De esta forma se define la longitud de correlación, que representaremos por el símbolo  $\zeta$ , como el inverso de esta anchura [Zhao, Wang y Lu 2001]. Cuanto menor es  $\zeta$ , más desordenada es la distribución del patrón.

Otra magnitud relevante para la caracterización de superficies es la *función de correlación de diferencias de alturas*; ésta nos da una medida de lo diferentes que son las alturas que se encuentran a una determinada distancia, y se define como

$$C(\mathbf{r}, t) = \left\langle \frac{1}{L^d} \int [h(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) - h(\mathbf{x}, t)]^2 d\mathbf{x} \right\rangle, \quad (1.7)$$

la cual, a su vez, está también relacionada con el factor de estructura.<sup>2</sup>

A veces, se suele utilizar otra magnitud para caracterizar las superficies conocida como *función de autocorrelación de diferencias de alturas*, cuya definición es

$$R(\mathbf{r}, t) = \left\langle \frac{1}{L^d} \int [h(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t)h(\mathbf{x}, t) - \bar{h}^2(t)] d\mathbf{x} \right\rangle. \quad (1.8)$$

Esta magnitud se relaciona con la función de correlación,  $C(\mathbf{r}, t)$ , y la rugosidad global,  $W(t)$ , según

$$R(\mathbf{r}, t) = W^2(t) - \frac{C(\mathbf{r}, t)}{2}. \quad (1.9)$$

Una vez definidos estos observables, veremos en la siguiente sección que son suficientes para describir algunas de las características de la evolución de ciertas superficies en determinadas condiciones.

### 1.3. Superficies con invariancia de escala y rugosidad cinética

Tal y como se vio en la sección 1.1, a veces se encuentran superficies que no presentan ninguna escala dominante. Tanto para objetos fractales isótropos (autosimilares bajo transformaciones isótropas) como autoafines (autosimilares bajo transformaciones anisótropas) suele utilizarse el término *invariancia de escala*. Estas superficies verifican que si cambiamos las escalas asociadas con  $\mathbf{x}$  y  $h$  una cierta cantidad arbitraria  $b$  y otra  $b^\alpha$  según  $\mathbf{x} \rightarrow b\mathbf{x}$  y  $h \rightarrow b^\alpha h$ , se obtiene un objeto estadísticamente idéntico, es decir, se cumple que

$$b^\alpha h(\mathbf{x}) \sim h(b\mathbf{x}). \quad (1.10)$$

<sup>2</sup>Puede comprobarse que se verifica  $C(\mathbf{r}, t) = (2/L^d) \sum_{\mathbf{q}} PSD(\mathbf{q}, t)[1 - \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})]$ .

El exponente  $\alpha$  es característico de cada superficie y se conoce como *exponente de rugosidad*. En el caso de que  $\alpha = 1$ , es decir, que tanto  $x$  como  $h$  escalen de la misma forma, se tiene un fractal isótropo. Esto ocurre en el ejemplo mostrado en la figura 1.1, donde la escala horizontal puede representarse mediante la variable  $x$  y la orilla del lago vendría dada por una función  $h(x)$ , en este caso multivaluada. En estas dos imágenes, en particular, se ha utilizado un factor de escala  $b = 5$  para obtener una representación análoga estadísticamente. En general, trabajaremos con objetos reales en los que estas relaciones sólo se verifican en promedio, aunque estas definiciones son válidas también para el caso determinista. En el caso de que para obtener una superficie idéntica tengamos que aumentar o disminuir más la altura que la escala espacial (según estemos expandiendo,  $b > 1$ , o contrayendo,  $b < 1$ , la intercara, respectivamente), se tiene que  $\alpha > 1$ , y la superficie se denomina *super-rugosa*. La propiedad de invariancia de escala puede trasladarse a la rugosidad de forma que para cualquier longitud  $r$  considerada se verifica  $w_r \sim r^\alpha$  y, en particular, para un sistema finito de tamaño  $L$ , se tiene que

$$W \sim L^\alpha. \quad (1.11)$$

Esta relación indica que la rugosidad depende del tamaño del sistema según una ley de potencias gobernada por el exponente de rugosidad  $\alpha$ .

Además de esta característica estática, con cierta frecuencia, la evolución temporal de este tipo de superficies verifica determinadas propiedades para las que se emplea el término de *rugosidad cinética* (“kinetic roughening” en inglés) con el fin de indicar el carácter *espacio-temporal* propio de estos sistemas. Este tipo de comportamiento es análogo al que se observa en los fenómenos críticos en equilibrio donde se definen las *clases de universalidad* asociadas con los valores de los exponentes críticos. Ya hemos definido  $\alpha$  como aquél que caracteriza la invarianza de escala espacial; a continuación definiremos otros exponentes asociados con la evolución temporal de la superficie.

Una forma de cuantificar si un determinado sistema presenta rugosidad cinética es, por ejemplo, a partir de la medida de la evolución temporal de la rugosidad global  $W(t)$ . Si consideramos un sistema de tamaño finito, el comportamiento de la anchura total puede separarse en dos regiones bien diferenciadas; en una primera etapa, la rugosidad crece independiente del tamaño del sistema como una potencia del tiempo según

$$W(t) \sim t^\beta, \quad (1.12)$$

hasta alcanzar un valor de saturación constante que representaremos por  $W_{sat}$  que verifica la relación (1.11). El exponente  $\beta$  nos da una medida de cuánto se desordena la superficie en el transcurso del tiempo y se conoce como *exponente de crecimiento*. En 1985 Family y Viseck [Family y Vicseck 1985] resumieron este comportamiento para la rugosidad mediante su hipótesis de escala dinámica, la cual se expresa matemáticamente como

$$W(t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right), \quad (1.13)$$

donde  $f$  es una función que verifica  $f(u) \sim cte$  si  $u \gg 1$  y  $f(u) \sim u^\beta$  si  $u \ll 1$ . En esta relación se ha introducido un nuevo exponente,  $z$ , que depende de los anteriores según  $z = \alpha/\beta$  y que se conoce como *exponente dinámico*. Para entender qué representa este exponente podemos suponer que el paso entre el régimen de crecimiento donde se cumple (1.12) y el de saturación, en el cual se verifica (1.11), se produce cuando  $u \approx 1$ . Si sustituimos este valor en la expresión (1.13) podemos deducir en qué instante, que denominaremos  $t_{sat}$ , la rugosidad se hace constante; éste verifica

$$t_{sat} \sim L^z, \quad (1.14)$$

donde  $z$  es una medida de cómo cambia respecto al tamaño del sistema el tiempo para el que satura la anchura total del sistema.

La hipótesis de escalado (1.13) puede trasladarse al factor de estructura a partir de la relación (1.6), con el resultado de<sup>3</sup>

$$PSD(\mathbf{q}, t) \sim q^{-(d+2\alpha)} g(tq^z), \quad (1.15)$$

donde  $g(u)$  verifica  $g(u) \sim cte$  para  $u \gg 1$  y  $g(u) \sim u^{(d+2\alpha)/z}$  si  $u \ll 1$ . Es importante señalar que esta relación se altera si calculamos el espectro de potencias a partir de un corte longitudinal de la superficie, como se muestra en el apéndice A.

De forma análoga se puede trasladar la hipótesis de rugosidad cinética a la función de correlación de alturas, para la que se tiene

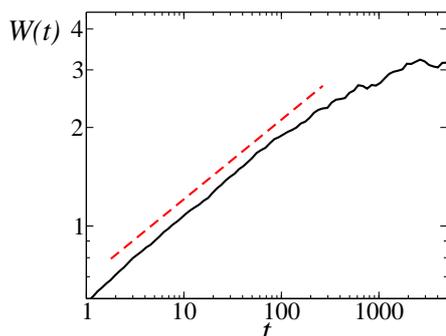
$$C(\mathbf{r}, t) = r^\alpha f_c \left( \frac{t}{r^z} \right), \quad (1.16)$$

con  $f_c(u) \sim cte$  para  $u \gg 1$  y  $f_c(u) \sim u^\beta$  si  $u \ll 1$ .

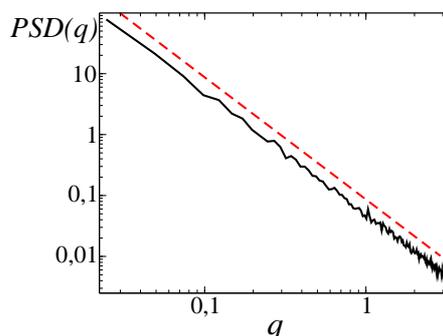
En la figura 1.3 se muestra el comportamiento de la rugosidad para la altura de una intercara obtenida mediante un método espectral de integración [Canuto *et al.* 1988] de la ecuación de Edwards-Wilkinson (véase sección 1.5.1). Podemos observar cómo  $W(t)$  crece según la ley de potencias dada por (1.12) hasta alcanzar un valor constante  $W_{sat}$ . En ese instante, el factor de estructura (figura 1.4) escala según la relación (1.15). La línea continua representa el resultado numérico tras promediar sobre el número de realizaciones, mientras que la línea es el mejor ajuste a una ley de potencias. A partir de este ajuste se deducen los valores efectivos del exponente de crecimiento,  $\beta = 0.24$ , y de rugosidad,  $\alpha = 0.5$ .

Los procesos que dan lugar a superficies que presentan rugosidad cinética son de muy diversa índole y a que el comportamiento dado por la relación de escala (1.13) ha sido verificado en multitud de experimentos, cálculos analíticos y simulaciones numéricas [Barabási y Stanley 1995]. A menudo se encuentra que muchos de estos sistemas presentan el mismo valor de los exponentes, lo que permite clasificarlos en las denominadas *clases de universalidad*.

<sup>3</sup>Hemos escrito  $q = |\mathbf{q}|$  y  $r = |\mathbf{r}|$ .



**Figura 1.3** — Rugosidad global en función del tiempo para la ecuación de Edwards-Wilkinson (ver Sec. 1.5.1) con  $\nu = 1$ ,  $D = 1$  y condición inicial plana promediada sobre 250 realizaciones para un sistema unidimensional de tamaño  $L = 256$  (línea continua) y su ajuste a una ley de potencias de la forma (1.12) con  $\beta = 0.24$  (línea a trazos) desplazada verticalmente para una mejor visualización.



**Figura 1.4** — Factor de estructura en función de  $q$  obtenido en las mismas condiciones que la figura 1.3, una vez el sistema ha saturado en  $t = 5000$  (línea continua). La línea a trazos representa su ajuste a una ley de potencias de la forma  $PSD(q) \propto q^{-(1+2\alpha)}$  de donde resulta  $\alpha = 0.50$ . El ajuste está desplazado verticalmente para una mejor visualización.

A pesar de que, por ahora, sólo hemos definido el comportamiento de superficies que presentan rugosidad cinética de una forma más sencilla, a veces se tienen sistemas que, aún verificando la ley de escala de Family-Viseck para el comportamiento global, presentan exponentes diferentes cuando estudiamos el comportamiento local [López y Rodríguez 1996; López, Rodríguez y Cuerno 1997; Ramasco, López y Rodríguez 2000]. Por ejemplo, tal y como se ha puesto de manifiesto, en un sistema que presente invariancia de escala ideal se encuentra que el exponente local de rugosidad,  $\alpha_{loc}$ , es idéntico al exponente global ( $\alpha_{loc} = \alpha$ ), mientras que si lo estudiamos en una superficie que presente escalado anómalo, lo que se observa es que  $\alpha_{loc} \neq \alpha$ . Se dice entonces que estos sistemas presentan *escalado anómalo* [Morel *et al.* 1998; Zhao *et al.* 2000; Huo y Schwarzacher 2001]. En algunos de estos casos, las propiedades de escalado anómalo vienen acompañadas de una característica que generaliza el concepto de fractal denominada multifractalidad.<sup>4</sup>

## 1.4. Superficies con escalas características

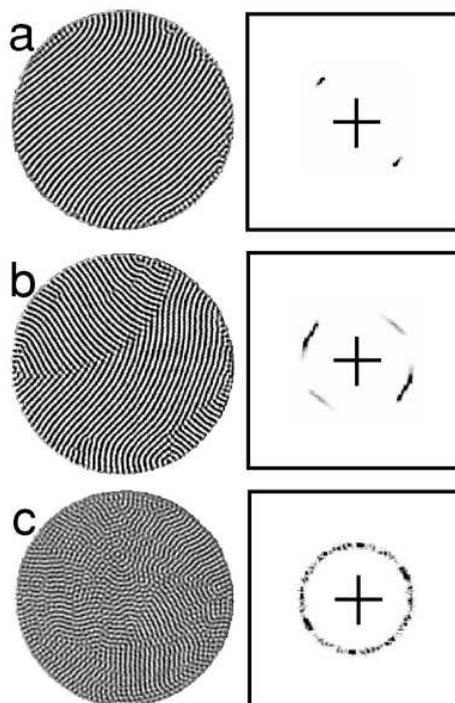
Mientras que la rugosidad cinética está asociada con la inexistencia de un tiempo y una longitud típicas en la evolución de la superficie, a lo largo de esta memoria estudiaremos también otro tipo de morfologías que muestran patrones de un

<sup>4</sup>Un multifractal es un conjunto formado por una jerarquía de subconjuntos (variedades), cada uno de ellos de carácter fractal.

tamaño determinado. Los sistemas fuera del equilibrio en los que se encuentran estos patrones son muy variados, como por ejemplo: sistemas hidrodinámicos con convección térmica para fluidos puros o mezclas binarias, óptica no lineal, crecimiento y solidificación de frentes, procesos de erosión eólica o subacuática y erosión iónica, entre otros.

Para caracterizar estas superficies, de nuevo resulta de utilidad estudiar el factor de estructura,  $PSD(\mathbf{q})$ , definido en (1.3). Para un patrón con una determinada longitud característica,  $l_0$ , el valor de su espectro de potencia para el vector de onda asociado a dicha longitud, que denominaremos  $q_0 = 2\pi/l_0$ , es particularmente relevante. Además del tamaño del patrón, el factor de estructura nos da información sobre su orientación, simetría y grado de orden. Esto puede observarse en la figura 1.5 donde se muestra la formación de patrones debida a la convección térmica y rotación simultánea de un fluido y sus correspondientes espectros de potencia bidimensionales. El máximo en el factor de estructura indica la longitud de onda del patrón (en todos los casos la longitud característica es la misma y por tanto los máximos se encuentran a la misma distancia del origen) y su orientación. En el caso 1.5(a), el patrón se orienta en una única dirección, como se pone de manifiesto en la representación en el espacio de Fourier; en el caso de la figura 1.5(b), las estructuras se orientan, aproximadamente, en dos direcciones perpendiculares; para el caso 1.5(c), su espectro de potencia isótropo refleja la orientación de los rollos convectivos en todas direcciones.

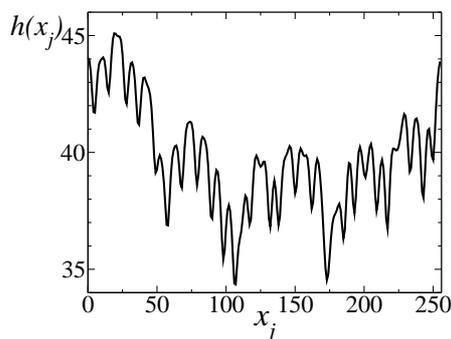
**Figura 1.5** — Formación de patrones debida a la convección térmica (Rayleigh-Bénard) y rotación simultánea de un fluido para diferentes velocidades de giro e incrementos de temperatura entre las placas superior e inferior del recipiente. La columna de la izquierda representa las imágenes en el espacio real de la convección, donde las regiones oscuras muestran el fluido caliente (el cual fluye hacia arriba) y las claras el de menor temperatura (cuyo movimiento es descendente). La columna de la izquierda muestra sus correspondientes espectros de potencia en el espacio de Fourier. Tomada de Hu *et al.* (1998).



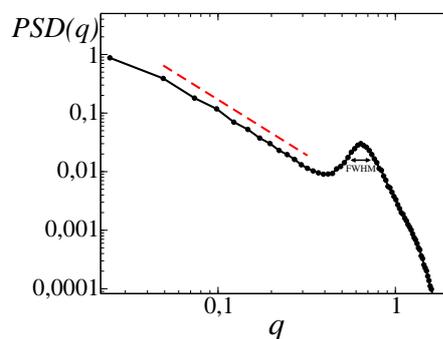
La evolución temporal de la morfología de este tipo de superficies presenta una gran variedad de comportamientos, aunque a continuación nos centraremos en una de estas propiedades que ha sido sometida a mayor objeto de estudio en los últimos años. Nos referimos al crecimiento o estiramiento (en inglés, “coarsening”) de las estructuras que aparecen en determinados procesos fuera del equilibrio. En estos procesos, al igual que ocurre en otros fenómenos cercanos al equilibrio, la escala característica del sistema evoluciona con el tiempo, de forma que a cada instante se tiene un patrón de diferente tamaño. Bajo determinadas condiciones experimentales, es frecuente observar que este tamaño crece con el tiempo siguiendo una ley de potencias de la forma  $l_0 \sim t^n$ . Puede ocurrir que el crecimiento continúe indefinidamente hasta que el tamaño del patrón sea del mismo orden que el del sistema o que se interrumpa con anterioridad. Además, este crecimiento puede interrumpirse en una de las dimensiones y continuar en la otra, de forma que, en general, la fenomenología en la cual un determinado patrón puede evolucionar en el tiempo es muy variada. En los siguientes capítulos veremos algunos ejemplos de estos comportamientos; la mayoría de ellos, para estructuras formadas mediante el bombardeo de materiales sólidos con iones.

Para completar la descripción de estos sistemas, debemos señalar que no sólo es posible encontrar morfologías con una o varias escalas características que pueden, o no, evolucionar en el tiempo. A veces, como ocurre, por ejemplo, en sistemas cuya evolución viene descrita por la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky (ver sección 1.5.4), durante un determinado intervalo de tiempo la superficie muestra una longitud característica mientras que para tiempos mayores presenta rugosidad cinética. También pueden encontrarse sistemas en los que se mantiene un patrón ordenado en un rango de escalas determinado, mientras que la superficie presenta invariancia de escala para distancias mucho mayores que esta longitud característica.

En la figura 1.6 mostramos el perfil de altura de una superficie obtenido mediante un método pseudoespectral de integración con añadido de ceros para evitar los efectos de “aliasing” (ver la ref. Canuto *et al.* (1988) para más detalles sobre esta técnica) de la ecuación de Kuramoto Sivashinsky. Como se muestra en las figuras 1.6 y 1.7, para tiempos intermedios aún se mantiene un determinado patrón y, por tanto, se observa claramente cómo esta escala domina la morfología. Esto se refleja en el factor de estructura con un máximo local en el modo de Fourier asociado a la longitud de onda dominante del patrón. Para la figura 1.7 se obtiene  $l_0 = 2\pi/q_0 \approx 10$ , lo cual está de acuerdo con lo observado en el perfil (figura 1.6). Para escalas mayores que esta distancia, la superficie se desordena y, como se pone de manifiesto en la ley de potencias que sigue el factor de estructura para modos mucho menores que el correspondiente al máximo relativo  $q_0$  (aunque tan sólo durante una década debido a que aún no nos encontramos a tiempos suficientemente largos), la superficie muestra invariancia de escala. Una magnitud relacionada con el desorden de la superficie es, como se definió en la sección 1.2, la longitud de correlación  $\zeta$ , la cual se obtiene a partir de la medida anchura del pico a media altura; para la figura 1.7 se obtiene  $\zeta \approx 34$ , que confirma la interpretación de la morfología en la figura 1.6 como una yuxtaposición desordenada de dominios que



**Figura 1.6** — Perfil de altura para la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky (ver sección 1.5.4) unidimensional con  $\nu = 1$ ,  $K = 1$ ,  $\lambda_1 = 2$ , en  $t = 100$  para un sistema de tamaño  $L = 256$  y una superficie inicial aleatoria.



**Figura 1.7** — Factor de estructura para el mismo sistema que la figura 1.6 promediado tras 1000 realizaciones con condiciones iniciales diferentes. La línea a trazos representa su ajuste a una ley de potencias de la forma  $PSD(q) \propto q^{-(1+2\alpha)}$ , de donde resulta  $\alpha = 0.45$ . El ajuste está desplazado verticalmente para una mejor visualización.

contienen unas tres celdas.

## 1.5. Aproximaciones continuas

Como ya avanzamos en la introducción, existe un poderoso método teórico de estudio para las superficies, además de los modelos discretos, que son las ecuaciones continuas. Se pretende obtener una aproximación útil que describa una gran variedad de mecanismos desde una formulación compacta, además de representar de forma eficiente, analítica o numéricamente, los aspectos globales de la evolución de la morfología. Para ello, se describe la superficie desde escalas de longitud intermedias, sin tener en cuenta los detalles del crecimiento a escalas más pequeñas. Por ejemplo, en algunos de los sistemas anteriormente mencionados, como los procesos de crecimiento de películas delgadas o erosión iónica, los mecanismos atómicos involucrados en la evolución de la superficie tienen lugar a escalas del orden del nanómetro y tiempos del orden del picosegundo ( $10^{-12}$  s) mientras que las escalas espaciales en las que se describe la morfología son mayores de 10 nanómetros y los tiempos del orden del segundo. Debido a esta diferencia de escalas, podemos esperar que estas descripciones continuas puedan suministrarnos un marco general apropiado para describir muchos de los fenómenos de no equilibrio responsables de la evolución de superficies. Se pretende obtener así una ecuación en derivadas parciales que describa de forma efectiva el sistema físico desde una escala apropiada mediante la variable continua  $h(\mathbf{x}, t)$ , que representa la altura de la superficie en cada instante, de la forma

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \Xi[h, x, t], \quad (1.17)$$

donde  $\Xi[h, x, t]$  es una función genérica de  $x$ ,  $t$ ,  $h(x, t)$  y sus derivadas espaciales. La forma de  $\Xi$  depende del problema concreto, aunque sería deseable, con la idea de capturar determinadas características universales que aparecen en los sistemas en consideración, poder obtener esta función a partir de las simetrías que debe obedecer el proceso de crecimiento, e incorporar sólo los mecanismos más relevantes en la evolución del sistema, tales como la deposición, la difusión, la desorción, etc., pero sin entrar en detalles microscópicos. Para completar la descripción del proceso, es frecuente incorporar a (1.17) un término de ruido debido a las posibles fluctuaciones que se producen en el proceso de crecimiento y que ocurren a escalas más pequeñas que la descripción mesoscópica considerada. Esta técnica de descripción basada en argumentos generales resulta válida en muchos casos, aunque en algunos contextos específicos, tal y como veremos en los siguientes capítulos, es insensible a fenómenos físicos relevantes para la evolución temporal del sistema, y será necesario acudir a un análisis microscópico del proceso de crecimiento que además, desde un punto de vista práctico, permita relacionar los mecanismos físicos con los parámetros del modelo.

Una vez obtenidas las ecuaciones de evolución, no todas ellas son resolubles analíticamente, y tendremos que acudir a diversas técnicas (aproximaciones analíticas, métodos numéricos, etc.) para obtener las propiedades del sistema en estudio como, por ejemplo, la clase de universalidad a la que pertenece. A continuación mostraremos brevemente algunas de las ecuaciones que, o bien por su relevancia histórica y debido a que representan a las clases de universalidad más amplias, o bien por su relación con las ecuaciones propuestas en el resto de la memoria, consideramos de especial importancia.

### 1.5.1. Ecuación de Edwards-Wilkinson

Si suponemos un sistema formado por partículas que se van añadiendo a la superficie de forma aleatoria sin difundir, la ecuación que describe la altura de la intercara puede escribirse como

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = v_0 + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (1.18)$$

Debido a que el flujo no es uniforme, sino que las partículas se depositan en posiciones aleatorias, lo hemos descompuesto en un término promedio, independiente de  $\mathbf{x}$ , que hemos llamado  $v_0$ , y representa la velocidad media de desplazamiento de la superficie, y otro, que da cuenta del carácter aleatorio y descorrelacionado del proceso de pegado, que representaremos por el símbolo  $\eta(\mathbf{x}, t)$ . Este término verifica que su valor medio, tanto espacial como en las diferentes realizaciones, es nulo, de forma que el número medio de partículas que se deposita sobre cualquier punto es el mismo en todo instante y realización. Lo anterior, y el hecho de que la probabilidad de que una partícula llegue a un punto cualquiera de la superficie,  $\mathbf{x}$ , es independiente de que otras partículas lo hagan a cualquier otro lugar,  $\mathbf{x}'$ , puede

expresarse matemáticamente de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\langle \eta(\mathbf{x}, t) \rangle &= 0, \\ \langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle &= 2D \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'),\end{aligned}\tag{1.19}$$

donde  $D$  representa la intensidad del ruido. Una de las posibles elecciones para que se verifiquen las condiciones anteriores es considerar  $\eta(\mathbf{x}, t)$  como un proceso gaussiano de media cero y dispersión  $2D$ . Se puede obtener la altura media y la rugosidad para este sistema sin más que integrar temporalmente (1.18), con el resultado de

$$\bar{h}(t) = v_0 t,\tag{1.20}$$

$$W(t) = \sqrt{2Dt}.\tag{1.21}$$

Podemos observar que, mientras que la altura media crece de forma lineal e indefinidamente en el tiempo, la rugosidad total de la superficie crece también sin límite como la raíz cuadrada de  $t$ . Este sistema no verifica, por tanto, la hipótesis de escala de Family-Viseck (1.13). Para que la superficie presente rugosidad cinética, debemos añadirle un término adicional que permita a las partículas desplazarse antes de fijarse al sustrato y que provoque que la rugosidad sature. Dicho término debe ser compatible con las simetrías que le exigiremos al sistema, a saber:

- Invariancia bajo traslación en el tiempo,  $t \rightarrow t + \delta t$ : Si, ni el flujo, ni la evolución del sistema dependen del instante considerado,  $\Xi$  no puede depender explícitamente de  $t$ .
- Invariancia bajo traslación en el sustrato,  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \delta \mathbf{x}$ : La evolución de la morfología no debe depender del punto  $\mathbf{x}$  considerado, luego la ecuación de evolución tampoco puede ser función explícita de  $\mathbf{x}$ .
- Invariancia bajo traslación en la dirección de crecimiento,  $h \rightarrow h + \delta h$ : Como ocurría anteriormente,  $\Xi$  no depende explícitamente de  $h$  pues la evolución del sistema no puede depender del punto en que escojamos el origen de altura.
- Invariancia bajo rotación o inversión en el sustrato,  $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$ : Si el sistema no presenta ninguna característica que altere la simetría derecha-izquierda para un sustrato unidimensional, no pueden aparecer derivadas impares en la ecuación de evolución como  $\nabla h$  ó  $(\nabla h)^3$ .
- Invariancia bajo inversión en la dirección de crecimiento,  $h \rightarrow -h$ : Si el sistema presenta simetría arriba/abajo, es decir, la evolución de los puntos por debajo de la altura media es idéntica a los que se encuentran por encima de ella,  $\Xi$  no puede contener términos pares en  $h$  o sus derivadas. Esto elimina, por ejemplo, términos de la forma  $(\nabla h)^2$  ó  $\nabla^2 h^2$ .

El término más sencillo que está de acuerdo con estas simetrías es  $\nabla^2 h$ , el cual resulta ser una aproximación lineal a la tensión superficial. Si el coeficiente de este término es positivo, el laplaciano tiende a aplanar la intercara, de forma que la rugosidad ya no crece indefinidamente, como ocurría en el caso anterior, sino que se alcanza un valor de saturación, de forma que sí que se obtiene una superficie que muestra rugosidad cinética de acuerdo con la hipótesis de Family-Viseck (1.13). La ecuación para la evolución de la altura de la intercara para un proceso de crecimiento que presente las simetrías anteriores fue propuesta por primera vez por Edwards y Wilkinson (EW) [Edwards y Wilkinson 1982], y toma la forma<sup>5</sup>

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (1.22)$$

Salvo por el término de ruido, esta ecuación es equivalente a la propuesta por Mullins para describir la evolución de una superficie curvada cuando el sólo se produce evaporación-condensación [Mullins 1957]. Según él, la ecuación diferencial que describe la variación de la altura de la superficie debido este mecanismo es

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \mathcal{A} \nabla^2 h, \quad (1.23)$$

donde  $\mathcal{A} = p_0 \gamma'_s n_v^{-2} (2\pi M)^{-1/2} (k_B T)^{-3/2}$  siendo  $p_0$  la presión de vapor en equilibrio para una superficie plana,  $\gamma'_s$  la energía libre superficial por unidad de área,  $n_v$  el número de moléculas por unidad de volumen,  $M$  la masa molecular,  $k_B$  la constante de Boltzman y  $T$  la temperatura.

Por ser lineal, la ecuación (1.22) puede resolverse analíticamente y define la evolución de una superficie que presenta rugosidad cinética con  $\alpha = (2 - d)/2$ ,  $\beta = (2 - d)/4$  y  $z = 2$ , donde  $d$  representa la dimensión del sustrato (la clase de universalidad de ésta y otras ecuaciones aquí mencionadas se recogen en la tabla 1.1). En las figuras 1.3 y 1.4 se mostró la rugosidad y el factor de estructura para una simulación numérica de la evolución de  $h$  dada por (1.22), y se comprueba que se verifica la hipótesis de escala de Family-Viseck con exponentes cercanos a los obtenidos analíticamente.

La ecuación de Edwards-Wilkinson puede interpretarse como la descripción de una superficie en las cercanías del equilibrio que sigue una dinámica relajacional; de esta forma su evolución temporal puede escribirse como la siguiente ecuación de Langevin:

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{\delta \mathcal{F}[h]}{\delta h} + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (1.24)$$

donde la *energía libre efectiva del sistema* toma la forma

$$\mathcal{F}[h] = \frac{\nu}{2} \int d\mathbf{x} (\nabla h)^2. \quad (1.25)$$

<sup>5</sup>Como hemos visto, esta ecuación es invariante bajo traslación en  $h$ ; podemos hacer por tanto una traslación en la altura:  $h \rightarrow h - v_0 t$  de forma que desaparezca el término de la velocidad media de crecimiento. En este caso se describen las fluctuaciones de la superficie alrededor de la altura media.

La existencia de esta energía libre nos permite encontrar una solución estacionaria para la ecuación de Fokker-Planck, la cual describe la evolución de la distribución de probabilidad  $\Pi[h, t]$  de tener una determinada altura  $h$  en el instante  $t$  asociada a la ecuación de Langevin anterior. Esta distribución de probabilidad es de la forma

$$\Pi[h] \propto e^{-\frac{\nu}{2D} \int d\mathbf{x} (\nabla h)^2}, \quad (1.26)$$

que es de tipo Boltzmann con una temperatura  $T \propto D$ .

### 1.5.2. Ecuación lineal de MBE

La técnica de MBE (Molecular Beam Epitaxy) consiste en depositar sobre un sustrato cristalino una sustancia mediante haces moleculares o atómicos en un sistema de alto vacío. Los haces son guiados hacia el sustrato de forma que la cantidad de material depositado sea la misma que la inyectada. Existen distintas teorías continuas que dan cuenta de los diferentes procesos que aparecen en la superficie tales como deposición, desorción, difusión, etc. Nosotros trataremos el caso más simple posible, usaremos una teoría lineal donde sólo tendremos en cuenta una aproximación al fenómeno de difusión en la superficie.

Si suponemos la existencia de una corriente de partículas a lo largo de la superficie,  $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ , y como el número de ellas debe permanecer constante, se puede expresar la variación en la altura local mediante la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{x}, t). \quad (1.27)$$

Podemos suponer que la corriente de material a lo largo de la superficie se debe a las diferencias en un potencial químico local que tiende a aplanar la intercara según

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = -\nabla \mu(\mathbf{x}, t). \quad (1.28)$$

Para determinar la forma de este potencial químico podemos hacer uso de algunos argumentos de simetría. Como la probabilidad de difusión de una partícula no puede depender explícitamente del valor de la altura ni del sistema de coordenadas elegido, tal y como se dedujo en el apartado anterior, el potencial químico no puede contener explícitamente los términos  $h(\mathbf{x}, t)$  ni  $\nabla h(\mathbf{x}, t)$ . Así, si nos quedamos a orden más bajo para la forma del potencial, obtendremos:  $\mu(\mathbf{x}, t) \propto -\nabla^2 h(\mathbf{x}, t)$ . La minimización del potencial químico local puede entenderse como la difusión de las partículas hacia zonas donde el número de enlaces con sus vecinos sea máximo. Esto ocurre en zonas donde la curvatura sea máxima y positiva. Como la curvatura local puede expresarse en aproximación lineal como  $-\nabla^2 h(\mathbf{x}, t)$ , se obtiene un término equivalente al propuesto por Mullins [Mullins 1957] para la difusión superficial de origen térmico de la forma  $-K\nabla^4 h$ , donde  $K$  es una constante positiva. Según su teoría, a partir de (1.27) se puede derivar una ecuación diferencial que describe la variación de la altura de la superficie cuando el único mecanismo de transporte se debe a la difusión superficial. Esta es

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -K\nabla^4 h, \quad (1.29)$$

donde  $K = D_s \gamma'_s n_v^{-2} \nu'_s / (k_B T)$  siendo  $D_s$  es el coeficiente de difusión superficial y  $\nu'_s$  el número de átomos por unidad de área.

En el caso de MBE, debido a que se trata de un sistema de crecimiento en el que existe una aleatoriedad inherente debida a las fluctuaciones de la intensidad del haz atómico, la ecuación que describe la evolución de la altura se lee

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -K \nabla^4 h(\mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (1.30)$$

Esta ecuación, que como (1.22) es resoluble analíticamente, fue introducida de forma independiente por Wolf y Villain [Wolf y Villain 1990] y Das Sarma y Tamborenea [Das-Sarma y Tamborenea 1991] y ha jugado un importante papel en el entendimiento de la técnica de MBE.

Al igual que ocurría en el caso de la ecuación de EW, también es posible formular la evolución de  $h$  como un ecuación de Langevin de la forma (1.24), con

$$\mathcal{F}[h] = \frac{K}{2} \int d\mathbf{x} (\nabla^2 h)^2. \quad (1.31)$$

Bajo ciertas condiciones experimentales, en las que el principal mecanismo de relajación es la difusión superficial, se ha podido comprobar que los exponentes críticos obtenidos a partir de (1.30) coinciden con los obtenidos experimentalmente [Jeffries, Zuo y Craig 1996; Yang *et al.* 1996].

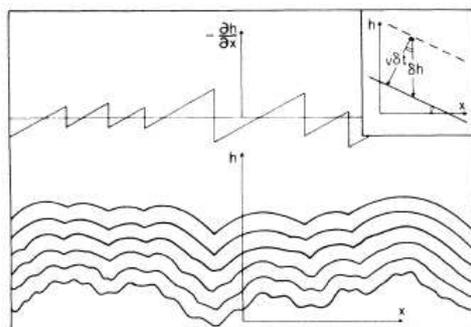
### 1.5.3. Ecuación Kardar-Parisi-Zhang

Otra ecuación que presenta rugosidad cinética es la ecuación KPZ (Kardar-Parisi-Zhang) [Kardar, Parisi y Zhang 1986], propuesta en 1986 como una extensión de la ecuación de Edwards-Wilkinson, con el fin de describir de forma algo más general el crecimiento de superficies rugosas. En este trabajo se permite que el material se añada en la dirección normal a la superficie en cada punto, y mediante un sencillo argumento geométrico se obtiene la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda_1}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (1.32)$$

donde, a diferencia de la ecuación de EW, se ha roto la simetría de inversión en la altura de crecimiento, con lo que aparecen términos de la forma  $(\nabla h)^{2n}$ . Se tiene, por tanto, que con estas simetrías la ecuación (1.32) es la generalización a orden no lineal más bajo de la ecuación de EW. La inclusión del nuevo término implica que se deposita menos material en aquellos puntos donde la pendiente es pequeña, lo que provoca que las protuberancias crezcan lateralmente. En la figura 1.8 se muestra el efecto de este término en la evolución de una superficie concreta y un esquema del crecimiento normal, del que se deduce, si suponemos que las pendientes son pequeñas, la relación:  $\delta h \simeq v[1 + (\nabla h)^2/2]\delta t$ .

A esta ecuación, a diferencia de lo que ocurría con la de EW, no se le puede asociar una energía libre efectiva, aunque puede comprobarse que para  $d = 1$  la



**Figura 1.8** — Perfiles de altura sucesivos para el crecimiento de una superficie cuya evolución viene dada por la versión determinista de la ecuación (1.32). En la misma gráfica se representan las pendientes del último perfil, así como un esquema que muestra cómo el crecimiento local normal a la superficie conduce a la no linealidad de (1.32). Tomada del trabajo original de Kardar, Parisi y Zhang (1986).

| Nombre            | Ecuación  | $\alpha$        | $\beta$         | $z$           |
|-------------------|---|-----------------|-----------------|---------------|
| Edwards-Wilkinson | $\frac{\partial h(\mathbf{x},t)}{\partial t} = v_0 + \nu \nabla^2 h + \eta(\mathbf{x}, t)$                                    | $\frac{2-d}{2}$ | $\frac{2-d}{4}$ | 2             |
| LMBE              | $\frac{\partial h(\mathbf{x},t)}{\partial t} = v_0 - K \nabla^4 h(\mathbf{x}, t) + \eta(\mathbf{x}, t)$                       | $\frac{4-d}{2}$ | $\frac{4-d}{8}$ | 4             |
| KPZ , KS          | $\frac{\partial h(\mathbf{x},t)}{\partial t} = v_0 + \nu \nabla^2 h + \frac{\lambda_1}{2} (\nabla h)^2 + \eta(\mathbf{x}, t)$ | $\frac{1}{2}$   | $\frac{1}{3}$   | $\frac{3}{2}$ |

**Cuadro 1.1** — Clases de universalidad para algunas de las ecuaciones descritas en este capítulo. En el caso de la ecuación KPZ se muestran los exponentes para  $d = 1$ .

distribución de probabilidad estacionaria coincide con (1.26), de donde se deducen de forma exacta los exponentes dados en la tabla 1.1. En general, esta ecuación no se puede resolver analíticamente debido a su carácter no lineal, aunque muchas de sus propiedades han sido obtenidas mediante el uso de diferentes métodos. Para dimensiones mayores que  $d = 1$  se han hecho grandes esfuerzos para intentar obtener los exponentes a los que pertenece su clase de universalidad. Se ha integrado numéricamente la ecuación [Chakrabarti y Toral 1989; Amar y Family 1990; Beccaria y Curci 1994; Moser y Wolf 1994; Giacometti y Rossi 2001; Giada, Giacometti y Rossi 2002], pero el método más preciso ha resultado ser el uso de modelos discretos [Ala-Nissila *et al.* 1993; Marinari, Pagnani y Parisi 2000] que se suponen pertenecientes a la misma clase de universalidad.

#### 1.5.4. Ecuación de Kuramoto-Sivashinsky

A diferencia de las ecuaciones mostradas anteriormente, las ecuaciones que mostraremos en las siguientes secciones no incluyen un término de ruido aditivo como ocurría en el caso de la ecuación EW, LMBE o KPZ. Además, en contraste con lo que les ocurría a estas ecuaciones que presentaban invariancia de escala como único comportamiento, en el caso de la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky

(KS) se combina la formación de un patrón a tiempos cortos (véanse figuras 1.6 y 1.7) con rugosidad cinética a escalas y tiempos largos.

Esta ecuación fue derivada por Kuramoto en el contexto de turbulencia química [Kuramoto y Tsuzuki 1976] y por Sivashinsky para la propagación de un frente de llamas [Sivashinsky 1977], de cuyos autores ha tomado su nombre, y anteriormente por Nepomnyashchy en el estudio del movimiento de una capa líquida por un plano inclinado [Nepomnyashchy 1974] y por LaQuey y sus colaboradores en su modelo no lineal de colisiones de iones confinados [LaQuey *et al.* 1975], aunque más tarde ha aparecido en muchos otros contextos.

Es una ecuación no lineal caótica, considerada un paradigma en el estudio del caos espacio-temporal. Su forma es la siguiente

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nu \nabla^2 h - K \nabla^4 h + \frac{\lambda_1}{2} (\nabla h)^2. \quad (1.33)$$

A diferencia de las ecuaciones anteriores, el término de tensión superficial es negativo, lo que provoca que las diferencias de alturas entre los puntos de la superficie aumenten; se dice entonces que este término es *inestable*. Este efecto, sin embargo, se ve corregido por el término difusivo y el no lineal, que tienden a suavizar la superficie, y permiten que el frente evolucione de forma estable aunque caótica.

La versión estocástica de la ecuación (1.33), con un término de ruido adicional  $\eta(\mathbf{x}, t)$  de la forma (1.19), ha sido propuesta en el contexto de crecimiento de capas delgadas mediante MBE [Karma y Misbah 1993] y en el de erosión iónica [Cuerno y Barabási 1995] para explicar la formación de patrones y la aparición de superficies rugosas. Debido a su comportamiento caótico, en la versión determinista ya aparece un ruido intrínseco en el sistema que hace que en ambos casos la evolución de la intercara sea similar. Para  $d = 1$  se ha mostrado que la ecuación KS presenta invariancia de escala para tiempos suficientemente largos con la misma clase de universalidad que la ecuación KPZ. Para ello, se han utilizado métodos numéricos de integración [Sneppen *et al.* 1992] para el caso del caso determinista y modelos discretos de crecimiento [Cuerno *et al.* 1995] junto con aproximaciones analíticas mediante las técnicas del grupo de renormalización [Cuerno y Lauritsen 1995] para el caso estocástico. Para  $d = 2$ , ni las simulaciones numéricas [Drotar *et al.* 1999], ni las aproximaciones analíticas [Cuerno y Lauritsen 1995], son concluyentes, pero parecen indicar que el comportamiento asintótico es también análogo al de la ecuación KPZ.

En las figuras 1.6 y 1.7 se mostró el perfil de altura para tiempos intermedios y el factor de estructura promediado en ese instante para diferentes condiciones iniciales de la ecuación (1.33) unidimensional. Podemos apreciar que la intercara muestra un patrón espacial de una escala cuyo tamaño no aumenta en el transcurso del tiempo y que se desordena para tamaños mayores, tal y como se discutió en la sección 1.4. En la sección 3.5 se volverá sobre esta ecuación cuando aparezca en el contexto de erosión iónica y se describirá la evolución de la morfología para el caso de que se considere la versión anisótropa de (1.33), donde puede ocurrir que

las no linealidades orientadas en cada uno de los ejes se cancelen lo que da lugar a los denominados *modos de cancelación*.

### 1.5.5. Ecuación de Korteweg-de Vries modificada por disipación

La ecuación de Korteweg-de Vries modificada por disipación ha sido propuesta para describir la convección térmica de fluidos mixtos [Garazo y Velarde 1991; Bar y Nepomnyashchy 1995] y, en el contexto de superficies, para describir la evolución de la morfología de un sustrato sometido a bombardeo iónico bajo incidencia oblicua [Cuerno y Barabási 1995; Makeev, Cuerno y Barabási 2002]. Para el caso unidimensional, esta ecuación toma la forma

$$\partial_t h = -\nu \partial_x^2 h + \Omega \partial_x^3 h - K \partial_x^4 h + \lambda_1 (\partial_x h)^2 + \xi \partial_x^2 h \partial_x h. \quad (1.34)$$

Debido a las derivadas impares en  $x$  (los términos correspondientes a los coeficientes  $\Omega$  y  $\xi$ ), se rompe la simetría  $x \rightarrow -x$  y esta ecuación presenta un patrón asimétrico que se desplaza longitudinalmente con velocidad no uniforme. Al igual que ocurría con la ecuación de KS, para valores grandes de  $\lambda_1$  esta ecuación se desordena en altura y presenta rugosidad cinética a largas distancias.

En el caso de que  $\xi = 0$ , la ecuación (1.34) se reduce a la conocida ecuación de Benney, la cual fue propuesta originalmente para describir la propagación de ondas en capas de líquidos [Benney 1966], y que ha sido más tarde estudiada en otros contextos como, el de la formación de solitones en sistemas no lineales, inestables y disipativos [Kawahara 1983], el estudio de la dinámica de terrazas en superficies vecinales [Misbah y Pierre-Louis 1996] o en la formación y propagación de estrías en medios arenosos debido a la acción del viento [Misbah y Valance 2003]. La morfología descrita por la ecuación de Benney, al igual que ocurría con la ecuación (1.34), interpola entre un patrón regular cuyo tamaño no crece en el transcurso del tiempo que se desplaza lateralmente debido a la tercera derivada y un comportamiento caótico debido al término KPZ (ver figura 1.9). Ha sido estudiada tanto numéricamente [Kawahara 1983; Kawahara y Takaoka 1989] como mediante simulación de Monte Carlo para modelos de crecimiento que se suponen descritos por ella [Sato, Uwaha y Saito 1998]. A su vez, la ecuación de Benney es una generalización de la KS, pues para  $\Omega = 0$  se recupera la ecuación (1.33). Por otro lado, si  $\nu = 0$  y  $K = 0$ , y considerando la ecuación para la pendiente  $u = \partial_x h$ , se tiene la ecuación de Korteweg-de Vries (KdV) [Remoissenet 1994], que ha sido propuesta para describir, por ejemplo, la dinámica de las ondas acuáticas y que toma la forma

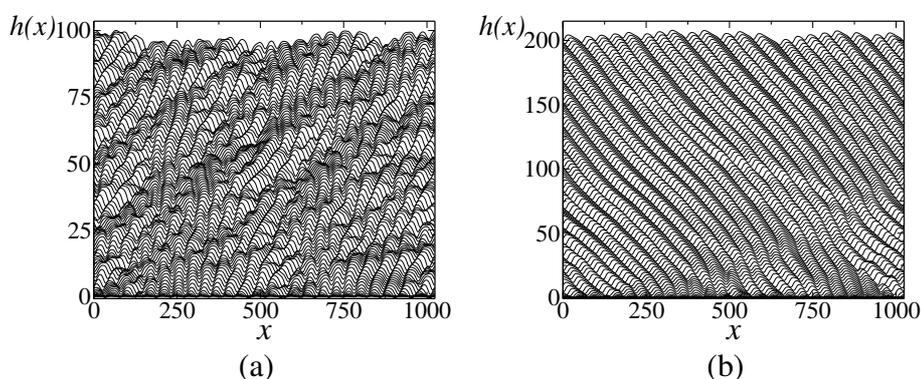
$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \lambda u \partial_x u + \Omega \partial_x^3 u. \quad (1.35)$$

En la ecuación (1.35), el término no lineal ya no es una función al cuadrado como ocurría en la KPZ y la KS, sino que el campo aparece multiplicado por su derivada. Se puede obtener una solución analítica de esta ecuación, que resulta ser un solitón

de la forma [Remoissenet 1994]:

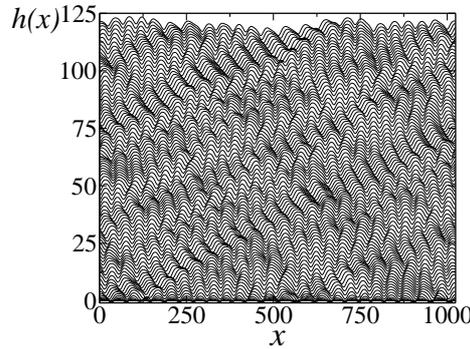
$$u(x, t) = \frac{3v_0}{\lambda} \left[ \cosh \left( \frac{\sqrt{v_0}}{2\sqrt{|\Omega|}} (x - v_0 t) \right) \right]^{-2}, \quad (1.36)$$

donde  $v_0$  es la velocidad de desplazamiento de dicho solitón y donde se consideró que  $\Omega$  es negativo. Si  $\Omega$  fuese positivo habría que aplicar la transformación  $u \rightarrow -u$  y  $x \rightarrow -x$  a (1.36) para obtener la solución.



**Figura 1.9** — Perfiles temporalmente equiespaciados con  $\Delta t = 50$  entre  $t = 50$  y  $t = 5000$  para la ecuación de Korteweg-de Vries modificada por disipación [Ec. (1.34)] unidimensional de un sistema de tamaño  $L = 1024$  con condición inicial aleatoria y  $\nu = 1$ ,  $\Omega = 1$ ,  $K = 20$ ,  $\lambda_1 = 1$ ,  $\xi = 2$ ; (b) igual que (a) con  $\xi = -2$ .

En en las figuras 1.9 (a) y (b), se muestra el resultado de integrar numéricamente la ecuación de Korteweg-de Vries modificada por disipación [Ec (1.34)]. En ambos casos se forma un patrón con una longitud de onda fija que no aumenta en el tiempo. Tal y como se observa en nuestras simulaciones, el cambio en el signo de  $\xi$  provoca que el patrón sea más asimétrico y que cambie el sentido de desplazamiento. Si comparamos el patrón de la figura 1.9 (a) con el de la figura 1.9 (b), podemos observar que en el primer caso que el signo positivo de  $\xi$  contrarresta la asimetría provocada por el término correspondiente al coeficiente  $\Omega$  y el patrón resulta más simétrico. La asimetría inducida por el término  $\Omega$  se observa en la figura 1.10, donde se muestra la evolución del perfil descrito por la ecuación de Benney en las mismas condiciones iniciales que la figura 1.9. Para el valor de  $\Omega$  considerado, tal y como ocurre en Misbah y Pierre-Louis (1996), aparece un patrón desordenado y asimétrico que no se propaga con velocidad uniforme. Hemos observado en nuestras simulaciones que, al igual que allí, al aumentar  $\Omega$  el patrón se muestra más ordenado y se desliza con velocidad constante en el sentido negativo del eje  $x$ .



**Figura 1.10** — Perfiles temporalmente equiespaciados en las mismas condiciones que 1.9 excepto  $\xi = 0$  (Ecuación de Benney).

### 1.5.6. Otras ecuaciones relevantes

Con el fin de presentar otros ejemplos que muestren la existencia de un patrón característico en procesos de crecimiento, vamos a indicar otras ecuaciones importantes. Uno de estos ejemplos es la conocida como ecuación de Cahn-Hilliard convectiva, propuesta para describir diversos procesos físicos como la dinámica de separación de fases en un sistema sometido a un campo externo [Leung 1990] o la evolución espaciotemporal de la morfología de terrazas sobre un sustrato cristalino [Saito y Uwaha 1996]. En el caso unidimensional esta ecuación toma la forma<sup>6</sup>

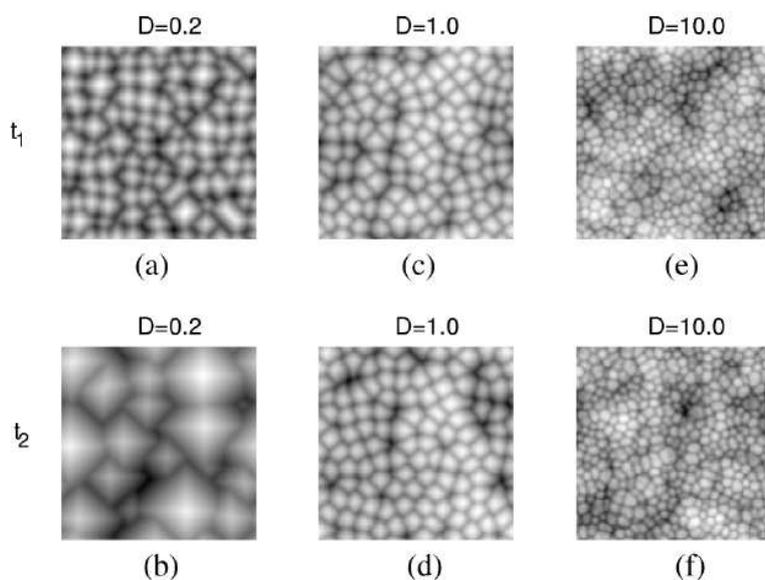
$$\frac{\partial h(x, t)}{\partial t} = -\partial_x^2 h - \partial_x^4 h + (\partial_x h)^2 (D/2 + 3\partial_x^2 h), \quad (1.37)$$

donde hemos escrito (1.37) en términos de un único parámetro  $D$ , de forma que si  $D = 0$ , la ecuación (1.37) se reduce a la ecuación de Cahn-Hilliard, la cual presenta una dinámica de ensanchamiento de sus estructuras, mientras que si  $D \rightarrow \infty$ , la transformación  $h \rightarrow h/D$  reduce (1.37) a la ecuación KS. En el trabajo de Golovin *et al.* (2001) se estudia esta ecuación para los casos de  $d = 1$  y  $d = 2$  y se muestra cómo, para  $D < \sqrt{2}/3$ , la superficie muestra una estructura celular cuyo tamaño característico crece como  $l_0 \sim t^{1/2}$  para tiempos cortos, y sigue aumentando indefinidamente como  $l_0 \sim \log t$  para tiempos largos. Para valores intermedios de  $D$ , se encuentra una solución estacionaria con una periodicidad y longitud de onda fijas, mientras que para valores de  $D$  grandes, este estiramiento de las estructuras tampoco ocurre y su comportamiento es similar al de la ecuación KS, donde aparece un patrón de tamaño fijo que se desordena en el transcurso del tiempo. Este comportamiento se representa en la figura 1.11, donde se muestra la evolución de la morfología descrita por una versión anisótropa bidimensional de la ecuación (1.37) para diferentes valores de  $D$ . Ésta es

$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nabla^2 h - \nabla^4 h + D/2(\nabla h)^2 + 3 [(\partial_x h)^2 \partial_x^2 h + (\partial_y h)^2 \partial_y^2 h]. \quad (1.38)$$

<sup>6</sup>Es frecuente encontrar esta ecuación escrita en función de la variable  $u$  definida como la pendiente de  $h$  como ocurría en (1.35). En este caso la ecuación (1.37) toma la forma:  $\partial_t u = Du(\partial_x u) - \partial_x^2(u - u^3 + \partial_x^2 u)$ . En esta formulación  $D = 0$  conduce más claramente a la conocida ecuación de Cahn-Hilliard.

Para  $D = 0.2$  las estructuras crecen en el transcurso del tiempo hasta que una sola pirámide ocupa todo el sistema; en el caso de  $D = 1$  el tamaño medio del patrón no crece y permanece constante; para  $D = 10$  las estructuras dejan de tener forma piramidal y se observa una estructura celular caótica análoga a la mostrada por (1.33). En el recuadro superior izquierdo de la figura 1.2 (d) se mostró otro ejemplo de la morfología obtenida mediante integración numérica de la ecuación Cahn-Hilliard convectiva para el caso isótropo.



**Figura 1.11** — Simulaciones numéricas de la ecuación (1.38) en dos instantes de tiempo,  $t_1$  y  $t_2$ , para distintos valores de  $D$ . Tomada de Golovin *et al.* (2001).

Otra ecuación relacionada con el contenido de esta memoria que muestra un patrón característico cuyo tamaño cambia en el transcurso del tiempo es la versión *conservada*<sup>7</sup> de la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky. Ésta es de la forma

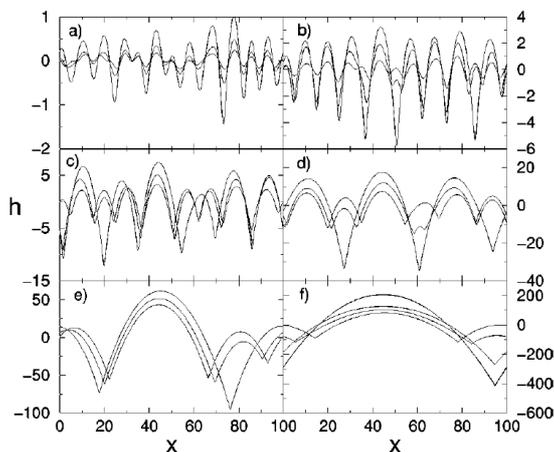
$$\frac{\partial h(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\nu \nabla^2 h - K \nabla^4 h + \lambda_2 \nabla^2 (\nabla h)^2, \quad (1.39)$$

derivada en el contexto de formación de estrías debido a la acción del viento [Csahók *et al.* 2000], crecimiento de películas amorfas [Raible *et al.* 2000; Raible, Linz y Hänggi 2000] y dinámica de terraza en superficies vecinales [Frisch y Verga 2006]. Esta ecuación muestra un patrón de parábolas ordenadas cuyos tamaños crecen en el tiempo como  $l_0 \sim t^{1/2}$ , como ha sido demostrado analíticamente en Frisch y Verga (2006) y Politi y Misbah (2007). En la figura 1.12 se muestra la

<sup>7</sup>Se utiliza el término conservado, como se hace habitualmente, para indicar que la cantidad de materia se mantiene, es decir, puede transportarse de una región a otra, pero la altura media debe permanecer constante en el transcurso del tiempo. Matemáticamente si se cumple esta propiedad la ecuación de evolución de  $h$  puede escribirse como una ecuación de continuidad de la forma (1.27).

evolución de la intercara en el transcurso del tiempo. Se observa el proceso de estiramiento progresivo del patrón, que continúa indefinidamente hasta que se alcanza una única parábola del mismo tamaño que el sistema.

**Figura 1.12** — Perfil de altura para la ecuación (1.39) con  $\nu = 1$ ,  $K = 1$  y  $\lambda_2 = -1$  en un sistema de tamaño  $L = 100$  y condición inicial aleatoria para diferentes tiempos: (a)  $t = 2, 6, 11$ ; (b)  $t = 11, 22, 33$ ; (c)  $t = 33, 66, 100$ ; (d)  $t = 100, 150, 200$ ; (e)  $t = 800, 900, 1000$ ; (f)  $t = 1200, 1400, 1600, 3000, 5000, 10000$ . Los perfiles se ordenan de forma que los máximos aumentan conforme lo hace el tiempo. Tomada de Raible, Linz y Hänggi (2000).



## 1.6. Conclusiones

Hemos visto en este capítulo muy diversos tipos de superficies que pueden aparecer en la Naturaleza. Es frecuente que éstas presenten determinadas características, como son la rugosidad cinética o la formación de patrones, que pueden describirse matemáticamente. Se han presentado algunas de las magnitudes utilizadas para caracterizarlas y algunos modelos continuos que presentan este tipo de comportamiento basados en argumentos geométricos. Sin embargo, debido a que la formación de morfologías similares puede deberse a una gran variedad de mecanismos físicos distintos, debemos ser cuidadosos a la hora de plantear estas ecuaciones de una forma general. Esto es particularmente relevante en el caso de sistemas que muestran determinados patrones a una determinada escala junto con otro comportamiento a escalas temporales o espaciales mayores. Ciertos argumentos generales, que capturan muchas de las características asintóticas de la evolución del sistema, no describen la superficie a las escalas que pueden ser de utilidad desde el punto de vista experimental. Por este motivo, sólo a través de un detallado análisis cuantitativo de la física microscópica involucrada en la evolución del sistema podemos obtener un modelo capaz de describir correctamente el sistema en las escalas de interés a la vez que nos permita relacionar los parámetros de nuestra teoría con las condiciones experimentales. Este será el procedimiento que sigamos en los capítulos siguientes cuando describamos mediante ecuaciones continuas superficies formadas mediante erosión iónica.

# 2

---

## Fundamentos de la erosión iónica y resultados experimentales

---

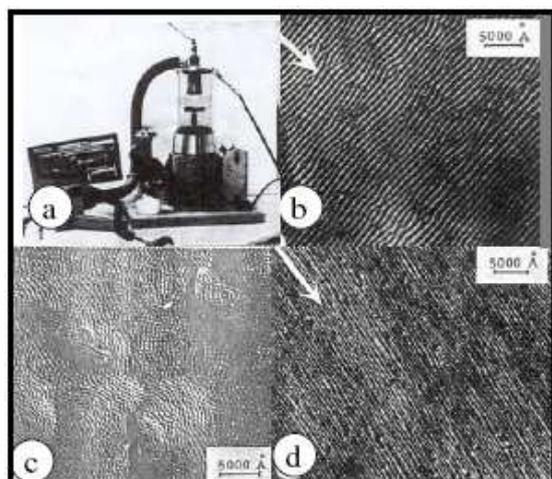
En este capítulo se pondrá de manifiesto la importancia de la erosión iónica debido a la gran variedad de aplicaciones técnicas e industriales que presenta y, lo que no es menos importante desde un punto de vista científico, a los retos que plantea el entendimiento de los mecanismos microscópicos que dan lugar al modelado de la superficie.

A lo largo de las diferentes secciones se mostrará cuál es el origen histórico y se darán algunos ejemplos de aplicaciones de esta técnica. Por último, se mostrará el estado experimental actual diferenciando entre materiales amorfos o amorfizables y metales.

### 2.1. Origen y aplicaciones de la erosión iónica

La primera observación de erosión iónica de la que se tiene constancia fue efectuada en tubos de descarga eléctrica a mediados del siglo XIX. Grove observó cómo los iones acelerados por el campo eléctrico colisionaban con el cátodo eliminando material al eyectarlo de su superficie [Grove 1852]. No fue sino un siglo más tarde cuando se analizó la capacidad de este procedimiento para alterar la morfología superficial de un material dando lugar a estructuras periódicas. Navez bombardeó un vidrio y produjo estructuras de estrías con varias decenas de nanómetros de anchura [Navez, Sella y Chaperot 1962]. En este experimento

se observó cómo cambiaba la orientación de las estrías cuando el ángulo de incidencia del haz variaba respecto a la dirección normal a la superficie, situándose perpendiculares o paralelas al haz de iones, tal y como se observa en la figura 2.1. Por entonces no se ofreció una explicación apropiada a tal efecto, la cual habrá de



**Figura 2.1** — Experimento de Navez, Sella y Chaperot (1962) en vidrio. (a) Montaje experimental. Se irradia la muestra con aire ionizado a 4 keV durante seis horas; (b) Superficie tras el bombardeo con el haz desplazado  $\theta = 30^\circ$  respecto a la normal. La flecha indica la proyección del haz sobre la superficie, disponiéndose las estrías perpendiculares a esta dirección; (c)  $\theta = 0^\circ$ ; (d)  $\theta = 80^\circ$ . Las estrías se orientan paralelas a la proyección del haz. Tomada de Valbusa, Boragno y de Mongeot (2002).

esperar aún 30 años más, concretamente hasta la aparición del trabajo de Bradley y Harper en 1988 [Bradley y Harper 1988], limitándose a señalar las semejanzas con algunos fenómenos macroscópicos como las ondulaciones formadas en la arena por la acción del viento. Desde entonces, eliminar material de una superficie sólida a partir del impacto de partículas con determinada energía cinética y generalmente cargadas se ha convertido en un método profusamente utilizado en múltiples aplicaciones, entre las que citaremos la limpieza, aplanado y análisis de sustratos, la alteración de las propiedades ópticas del material bombardeado, el depósito de películas delgadas, la litografía iónica y la creación y modelado de nanoestructuras en superficies extensas. Con el paso del tiempo se han ampliado el nivel de sofisticación y las utilidades de estas técnicas hasta convertirse en herramientas básicas en diversos campos industriales y experimentales. Describiremos a continuación algunas de las aplicaciones mencionadas anteriormente.

El bombardeo iónico permite eliminar material a escala submicrométrica. Este procedimiento de *limpieza* es importante en el proceso de fabricación de dispositivos semiconductores, en los cuales la contaminación de elementos como el oxígeno o el carbón puede alterar sus propiedades eléctricas u ópticas. El bombardeo iónico se convierte en este caso en una herramienta barata para suprimir las capas superficiales que contaminan la muestra, sin alterar su composición química [Schubert *et al.* 2005].

Otra de las aplicaciones de la irradiación iónica es la de *alterar las propiedades ópticas* del material bombardeado. Así, por ejemplo, los materiales haluros alcalinos, prácticamente transparentes en la naturaleza, pueden adquirir una coloración distintiva tras un tratamiento apropiado. Esto se debe a que no existe ninguna

transición electrónica natural cuya energía corresponda al intervalo de energía de fotones visibles y, por tanto, la luz visible atraviesa el cristal sin ser absorbida. Sin embargo, tras ser sometidos a determinados procesos químicos o físicos como el calentamiento en vapor alcalino o la irradiación con rayos X o iones, pueden aparecer en estos cristales alteraciones debidas a la formación de defectos electrónicos semi-estables que sí absorben la luz visible. Estos defectos pueden tardar varios años en desaparecer mientras colorean el material por lo que reciben el nombre de centros de color. A pesar de que, como hemos mencionado, existen diferentes formas de producir estas alteraciones, el bombardeo iónico permite preparar películas con una gran número de centros de color a la vez que modelar la superficie [Mussi *et al.* 2006], lo que convierte esta técnica en una candidata ideal para la fabricación de guías de onda, microcavidades y fuentes de láser.

A veces puede ser útil aplanar la superficie de una muestra para *modificar* así su *rugosidad y aumentar su reflectividad*. Esto puede hacerse bajo ciertas condiciones experimentales con lo que se logra mejorar las propiedades ópticas de determinados componentes como lentes y espejos [Frost *et al.* 2004]. En 1988 la Eastman Kodak Company desarrolló esta técnica introduciendo un cristal en una cámara de alto vacío con el fin de bombardear la superficie, puliéndola y obteniendo lentes de baja dispersión y alto contraste [Allen *et al.* 1991].

Los procedimientos para *crecer capas delgadas* son varios. Mientras que mediante MBE se depositan capas cristalinas sobre un determinado material, con la técnica de depósito por erosión (en inglés sputter deposition) se crecen capas amorfas. Así ocurre también en el caso de CVD (del inglés Chemical Vapor Deposition) o MOCVD (del inglés Metal-Organic Chemical Vapor Deposition). Aquí sólo abordaremos el depósito por erosión, el cual consiste en depositar parte del material erosionado sobre otro sustrato diferente. Esta técnica experimental es una de las más utilizadas en el crecimiento de películas delgadas debido a que la energía de los átomos eyectados es grande en comparación con otras técnicas en las que se necesitan altas temperaturas para que las partículas puedan difundir fácilmente sobre la superficie. Estas técnicas de crecimiento han permitido desarrollar las teorías de escalado y autosimilaridad en superficies, a la vez que han puesto de manifiesto el papel de la difusión atómica en la formación de las diversas morfologías [Barabási y Stanley 1995].

Es posible obtener experimentalmente un haz de iones focalizado con una anchura de unos pocos nanómetros. Esto permite erosionar localmente un sustrato y ser capaces de dejar una marca del tamaño del haz y por tanto *litografiar muestras* con trazas de escala nanométrica. Una de las posibles aplicaciones de esta técnica es construir nanoporos que son utilizados en la detección de moléculas individuales y cuyo tamaño puede modificarse con posteriores bombardeos no focalizados [Li *et al.* 2001; Chen *et al.* 2005].

A diferencia de la utilidad anterior donde el haz de iones se focaliza a una escala muy pequeña, una de las principales aplicaciones de la erosión consiste en *estructurar morfologías* sobre dominios mucho más extensos, llegando incluso a irradiarse al mismo tiempo regiones del orden de varios centímetros. Dependien-

do del tipo de material, temperatura, energía de los iones, ángulo de incidencia y otros parámetros experimentales, se observa tanto la creación de superficies rugosas como la de una gran variedad de nanoestructuras periódicas más o menos ordenadas [Carter 2001; Valbusa, Boragno y de Mongeot 2002]. Será ésta la aplicación en la que nos centraremos más adelante por ser una técnica fundamental en el emergente campo de la fabricación de nanodispositivos debido a su bajo coste y a la capacidad para modelar todo tipo de materiales. En los últimos años se ha invertido gran cantidad de trabajo en obtener diferentes tipos de patrones organizados mediante este procedimiento. La aparición y evolución de nanopuntos o fosos y nanoestrías o surcos con mayor o menor orden espacial han sido estudiadas por diferentes grupos experimentales y teóricos con el fin de comprender un fenómeno que promete ser de gran utilidad en la fabricación de nanocomponentes electrónicos, mecánicos, ópticos, catalíticos y/o biofuncionales como puntos cuánticos<sup>1</sup>, canales microfluídicos, guías de láser, etc.

## 2.2. El proceso de erosión

Una vez presentado el origen y las aplicaciones de la erosión iónica, el siguiente paso será describir en qué consiste el proceso de erosión. En esta sección abordaremos qué mecanismos físicos participan y qué observables pueden examinarse para intentar comprender este fenómeno.

Desde las primeras observaciones experimentales se observó que, al lanzar iones con energías del orden del keV sobre un sustrato sólido, parte del material era eyectado, pero ¿cuántos átomos de la muestra son erosionados por cada ion incidente? Esta magnitud es uno de los primeros observables descritos en la bibliografía científica, donde suele denominarse *rendimiento o tasa de erosión* (sputtering yield en inglés) y se representa por la letra  $S$ . Hay desde luego otros observables, como los que cuantifican los efectos del bombardeo sobre la morfología superficial o en la red atómica del sólido, pero una investigación detallada de estas magnitudes tuvo que esperar un tiempo mayor, concretamente hasta el desarrollo de técnicas experimentales precisas de medida de la estructura superficial, como la difracción con electrones de baja energía (LEED), y sobre todo hasta la utilización de los microscopios de barrido (SEM) y transmisión electrónica (TEM), los microscopios de fuerza atómica (AFM) y los de efecto túnel (STM).

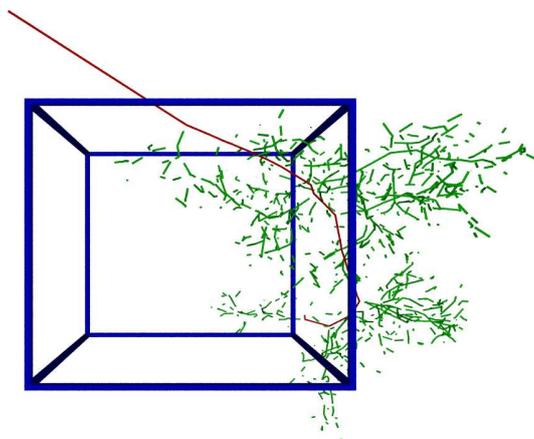
Debido a que el proceso de erosión es un problema de interacción entre mu-

---

<sup>1</sup>Un punto cuántico es una estructura semiconductor tan pequeña (de dimensiones nanométricas) que confina un número discreto de cargas eléctricas con un espectro de energía también discreto. Son de particular utilidad en diversas aplicaciones electrónicas, en computación cuántica y, sobre todo, debido a que las propiedades ópticas del material se modifican al variar el tamaño de estos puntos, pueden utilizarse para emitir luz de una determinada longitud de onda. Estas aplicaciones se introducirán rápidamente en nuestros hogares. Por ejemplo, la videoconsola PlayStation 3 utiliza un lector de DVD de alta definición denominado Blue-ray que utiliza un láser azul para la lectura de datos, cuya fabricación no ha sido posible hasta que la tecnología ha permitido controlar el tamaño de estos puntos cuánticos

chos cuerpos, desde el principio su comprensión ha sido todo un reto para los físicos teóricos. La primera explicación del fenómeno, la cual se demostraría poco satisfactoria, sugería que el bombardeo iónico calentaba una región del sustrato bombardeado evaporando cierta cantidad de átomos [Sigmund 1981]. Mayor éxito han tenido las teorías que apuntan a que los átomos eyectados son aquellos átomos superficiales que reciben una cantidad de momento y energía suficiente como para romper sus enlaces [Sigmund 1969; Sigmund 1973]. Según estas teorías, los iones incidentes perderían su energía cinética debido a las colisiones con los átomos del sustrato y estos, a su vez, provocarían el desplazamiento de átomos vecinos a través de nuevas colisiones generando así lo que se denomina una *cascada de colisiones* (ver figura 2.2). La construcción de los aceleradores de partículas y el desarrollo de las tecnologías de implantación iónica en los años 50 y 60 fueron la base para el entendimiento del movimiento de iones en sólidos. Este desarrollo ha tenido un gran efecto en la comprensión de los fenómenos de erosión. Un ion con determinada velocidad pierde su energía mediante colisiones tanto con los núcleos como con los electrones del sustrato. El rango de penetración del ion dentro del sólido puede determinarse, con muy buena aproximación, considerando las potencias o poderes de frenado del núcleo y de los electrones del sólido por separado [Nastasi, Mayer y Hirvonen 1996]. Salvo para iones ligeros como el  $H^+$  o el  $He^+$ , las interacciones con los núcleos son las dominantes a energías cinéticas del orden del keV.

La teoría de erosión desarrollada por Sigmund [Sigmund 1969] considera una serie de cascadas de colisiones aleatorias y deduce una expresión para el rendimiento  $S$  suponiendo que el depósito de energía del ion se distribuye en el sólido siguiendo una distribución gaussiana (que será descrita en secciones posteriores). Se desprecian, por tanto, los efectos de “channeling”, es decir la posibilidad de que el ion penetre una gran longitud dentro del sólido sin colisionar con ningún núcleo debido al orden en la red atómica, con lo cual, es una teoría más apropiada para materiales amorfos y policristalinos que para sustratos formados por una red cristalina.

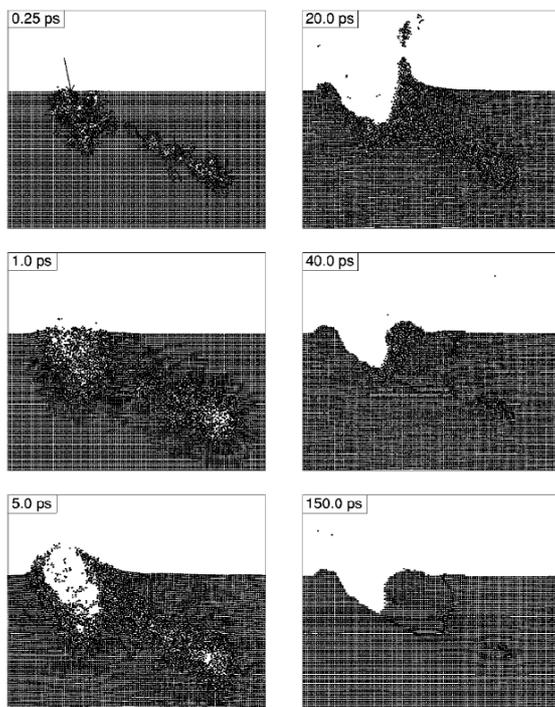


**Figura 2.2** — Cascada de colisiones generada tras el impacto de un ion a 5 keV que incide desviado  $60^\circ$  respecto a la normal a una superficie de cobre. La línea roja continua indica la trayectoria del ion y las marcas verdes el movimiento de los átomos del sustrato. El tamaño del cubo mostrado en la imagen es de  $2.65 \text{ nm}^3$ . Obtenida mediante simulaciones bajo la aproximación de colisiones binarias (BCA). Tomada de Feix *et al.* (2005).

Mientras que la teoría de Sigmund describe correctamente algunas características del proceso de erosión, no tiene sin embargo en cuenta algunas propiedades fundamentales necesarias para una descripción completa de este fenómeno, como la morfología de la superficie o la estructura periódica de los materiales cristalinos. Estas deficiencias han sido superadas por teorías continuas más sofisticadas y por el uso extensivo de simulaciones por ordenador. Tales modelos computacionales son de vital importancia en el estudio de la erosión ya que suministran un enlace esencial entre las teorías continuas y los experimentos. En estos estudios se consideran sistemas discretos donde los iones y átomos interactúan siguiendo dinámicas que pretenden ser exactas (como en el caso de la dinámica molecular) o aproximadas como ocurre en la aproximación de colisiones binarias (BCA en sus siglas en inglés). En estos modelos sólo se consideran interacciones repulsivas a dos cuerpos, y la trayectoria del ion se construye a partir de las colisiones con los núcleos que forman el sólido. Estas interacciones se tratan consecutiva e independientemente hasta que las energías de las partículas consideradas (iones y núcleos) se termalizan, es decir, son del mismo orden que la energía térmica de los átomos del sustrato (se darán más detalles de esta aproximación en la sección 3.4 donde se estudiará el caso particular representado en la figura 2.2). Éste es el método implementado en el popular código TRIM [Ziegler, Biersack y Littmark 1985], donde el potencial coulombiano de interacción a dos cuerpos se modifica para aumentar la velocidad de computación. Las simulaciones basadas en la aproximación de colisiones binarias resultan exitosas cuando las interacciones se producen separadas espacialmente, y fallan si las cascadas de colisiones se solapan, como ocurre a bajas energías. En este caso se debe considerar el movimiento simultáneo de los iones y los átomos de la muestra para describir correctamente el proceso, con lo que es más apropiado considerar métodos basados en dinámica molecular (MD). En estos métodos se emplea un potencial de interacción global dependiente de la posición de todas las partículas, integrando a continuación las ecuaciones de movimiento newtonianas con el fin de obtener la evolución dinámica de todo el sistema. Así se reproducen algunas observaciones experimentales para materiales con estructura cristalina, como la energía y distribución angular de los átomos erosionados [Harrison 1988]. Este método presenta, sin embargo, algunos inconvenientes. Entre ellos cabe señalar que el potencial comúnmente usado está basado en el potencial de interacción del sólido en equilibrio, lo cual está lejos de ser cierto cuando la cascada de colisiones desplaza a los átomos de su posición original. Además, debido a que los cálculos en las simulaciones de dinámica molecular son extremadamente costosos en tiempo de computación, éstas se suelen limitar al estudio del efecto producido al colisionar un único ion en el sustrato durante una escala temporal del orden del picosegundo ( $10^{-12}$  s) [Bringa, Nordlund y Keinonen 2001]. Estos tiempos son suficientes para describir la formación local de cráteres y el número de átomos que son eyectados o difunden superficialmente por cada ion incidente (ver figura 2.3), pero no permiten describir de forma detallada la evolución general de la superficie bombardeada. Para ello hay que acudir a métodos capaces de alcanzar tiempos más largos de simulación (del orden del segundo), pero que sí tienen en

## 2.3 Evolución de la morfología superficial durante el bombardeo 31

cuenta la evolución de la morfología a costa de perder los detalles de la interacción ion-sólido. Dichos métodos pueden utilizar técnicas de Monte Carlo y se estudiarán en el siguiente capítulo.



**Figura 2.3** — Vista transversal de los resultados de simulación por dinámica molecular del impacto de un ion de  $\text{Xe}^+$  a 100 keV contra una superficie de Au para diferentes tiempos. La flecha en la primera figura indica la dirección inicial del ion incidente. En las imágenes iniciales puede observarse que la colisión provoca dos subcascadas separadas. La más superficial provoca un cráter de unos 0.4 nm de profundidad y la eyección de átomos superficiales, algunos de los cuales se redepositan en la superficie. Tomada de Bringa, Nordlund y Keinonen (2001).

### 2.3. Evolución de la morfología superficial durante el bombardeo

El conocimiento de los procesos involucrados en la evolución de la morfología permite superar algunas de las limitaciones expuestas en la sección anterior y mejorar la descripción de algunas magnitudes importantes. En esta sección nos limitaremos a mostrar de forma resumida cuáles son los mecanismos físicos que influyen en la aparición y desarrollo de un determinado patrón, con más o menos orden, durante el proceso de erosión, dejando para el siguiente capítulo el estudio de las teorías continuas y los modelos discretos que tratan este fenómeno.

En adelante nos centraremos en la evolución de superficies extensas, con áreas que pueden llegar a ser del orden del  $\text{cm}^2$ , donde pueden formarse morfologías muy variadas (como se verá en la siguiente sección) cuando se irradian con iones a energías del orden del keV durante varios minutos. Los flujos típicos utilizados en los experimentos varían entre  $10^{12}$  y  $10^{17}$  iones  $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ ; esto significa, suponiendo una densidad atómica superficial de  $1 \text{ átomo nm}^{-2}$ , que cada átomo de la

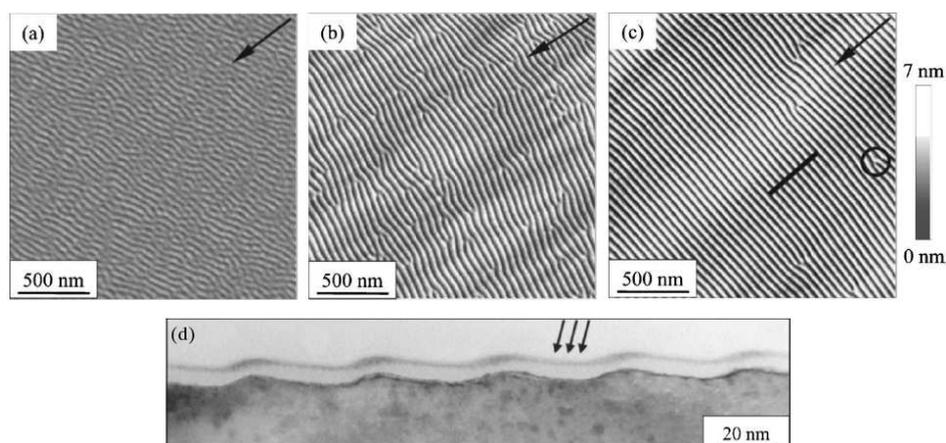
superficie sufre un impacto cada  $10^{-2} - 10^3 \text{ s}^{-1}$ . Esta frecuencia de colisión es mucho más lenta que los tiempos en los que se producen sus efectos que, como vimos anteriormente (ver figura 2.3), son del orden del picosegundo. Otro de los mecanismos que se demostrará fundamental en la evolución de la morfología es la difusión superficial. A fin de disponer de una estimación de esta magnitud, podemos considerar los trabajos de Ditchfield y Seebauer en los que se mide la difusividad de germanio sobre silicio sometido a bombardeo iónico con energías cercanas al keV y a diferentes temperaturas [Ditchfield y Seebauer 1999; Ditchfield y Seebauer 2001]. Estos autores encuentran dos regímenes principales de comportamiento dependiendo de la temperatura; en cualquier caso, la difusividad se encuentra siempre en torno a  $10^{-9} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} = 10^5 \text{ nm}^2 \text{ s}^{-1}$ . En estos mismos estudios se presenta una estimación de los tiempos típicos de difusión, con el resultado de  $10^{-9} \text{ s}$  para el intervalo medio entre saltos de un átomo que difunde sobre la superficie.

A pesar de que se invirtió un gran esfuerzo en intentar explicar la formación de patrones basándose en efectos químicos, como por ejemplo, en la incorporación de oxígeno y la alteración de las capas superficiales por este elemento al bombardear con iones  $\text{O}_2^+$  [Vajo, Doty y Cirlin 1996; Elst *et al.* 1993; Elst y Vandervorst 1994], la mayoría de estos estudios han sido rebatidos por investigaciones posteriores donde tales componentes no se encontraban presentes (ver la siguiente sección para una gran variedad de ejemplos). Además, se ha probado que el proceso de formación de estas estructuras no es consecuencia de posibles irregularidades o defectos en la superficie original [Karen *et al.* 1991; Karen *et al.* 1995]. Estos resultados indican que los mecanismos responsables son independientes de la química o de los detalles microscópicos de la superficie. Estas conclusiones y la gran cantidad de materiales y condiciones experimentales para los que se encuentran estas estructuras nos animan a intentar establecer mecanismos universales para explicar el modelado de superficies durante el proceso de erosión.

En 1969, Sigmund propone en su teoría sobre la erosión iónica que cuando un ion penetra en la superficie de un sólido transfiere su energía cinética a los átomos del sustrato a través de una serie de colisiones [Sigmund 1969]. Estos átomos a su vez pueden generar otras colisiones con los átomos vecinos y así sucesivamente. La mayoría de ellos no ganará suficiente energía como para desplazarse de su posición de equilibrio, pero algunos sí lo harán. Si a estos últimos se les transmite suficiente energía como para romper sus enlaces con el sólido y la cantidad de momento recibida es adecuada (es decir, en una dirección que los aleje del sustrato), entonces serán erosionados. Normalmente para que esto ocurra los átomos no se pueden encontrar muy lejos de la superficie. La profundidad en la que suelen producirse estos eventos es del orden de la profundidad media de penetración del ion en el sólido, la cual denotaremos por la letra  $a$ . Muchos de los átomos eyectados inicialmente pueden ser redepositados y sólo una pequeña cantidad, varios órdenes de magnitud menor que los átomos participantes en la cascada de colisiones, serán erosionados.

En general, la energía depositada por el ion produce un daño en la estructura del sólido que en algunos casos no es suficiente para eliminar el átomo, aunque

sí para desplazarlo creando vacantes o átomos superficiales que pueden difundir. Se ha observado que estos daños amorfizan las capas superficiales de materiales semiconductores como el Si, Ge, SiO<sub>2</sub> o GaAs, con pérdida de la estructura cristalina [Chini *et al.* 2003] a tal punto que incluso se llega a inducir la formación de una capa viscosa de fluido con un espesor próximo al rango de penetración iónica (del orden de 1 nm para SiO<sub>2</sub> bajo irradiación de iones de Ar<sup>+</sup> de 1 keV [Umbach, Headrick y Chan 2001]). La evolución de la topografía y la aparición de patrones ordenados en la superficie del sustrato son consecuencias del balance entre el proceso erosivo y los mecanismos de relajación. Mientras que la erosión tiende a inestabilizar la superficie, erosionando más las partes más hundidas, los mecanismos de relajación como la difusión superficial, que puede ser de origen térmico o inducida por la erosión, o el flujo viscoso mencionado anteriormente, tienden a aplanarla minimizando los gradientes de altura. En la figura 2.4 se muestra la evolución temporal de un patrón de silicio donde puede apreciarse (Fig. 2.4 d) la capa amorfa mencionada anteriormente.



**Figura 2.4** — Imágenes obtenidas mediante AFM ( $2 \times 2 \mu\text{m}^2$ ) de silicio bombardeado con iones de Kr<sup>+</sup> con un flujo de  $1.87 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$  a 1.2 keV y un ángulo de incidencia respecto a la normal de 15°, para diferentes tiempos: (a) 3 minutos; (b) 20 minutos; (c) 120 minutos; (d) vista transversal de las estrías. La capa de material amorfo presenta un grosor de 6 nm. El círculo en (c) muestra un defecto en la formación de las estrías y la barra es la sección transversal mostrada en (d). Las flechas indican la dirección del haz incidente. Tomada de Ziberi *et al.* (2005).

## 2.4. Resultados experimentales

En los últimos años, y más concretamente en la última década, se han ido acumulando una gran cantidad de datos experimentales que tratan los efectos del bombardeo iónico sobre la producción de morfologías con nanopatrones periódicos. En

esta sección intentaremos resumir los principales resultados, separando por un lado los materiales amorfos o amorfizables de los materiales que no pierden su estructura cristalina cuando son bombardeados, como es el caso de los metales. Esta separación se justificará, como se ha esbozado al presentar la teoría de Sigmund (sección 3.2) y como se volverá a retomar más adelante, en que las *teorías continuas* actuales están basadas en la aleatoriedad de las posiciones de los átomos sustrato. Aunque como se verá en esta sección, tanto materiales cristalinos como amorfizables comparten muchas características cuando son irradiados, teóricamente sólo son plenamente justificables las actuales *teorías continuas* en los segundos. Por otro lado, separaremos los casos de incidencia normal y oblicua. El primero se produce cuando se bombardea el sustrato con el haz de iones orientado perpendicular a la superficie. En el segundo caso, el haz se orienta desviado un cierto ángulo  $\theta$  respecto a la normal. Los primeros patrones obtenidos experimentalmente fueron precisamente estrías o surcos bajo incidencia oblicua [Navez, Sella y Chaperot 1962]. Se tardó algo más en obtener por primera vez evidencia experimental de la formación de un patrón periódico de puntos bombardeando bajo incidencia normal. Este resultado fue obtenido originalmente en el trabajo de Facsko *et al.* (1999). Aunque desde el punto de vista tecnológico la formación de estas estructuras puede ser el aspecto más interesante de la erosión, sólo se obtienen bajo determinadas condiciones experimentales. En el resto de casos pueden aparecer otros patrones o, como ocurre generalmente, superficies rugosas, aparentemente aleatorias, pero cuyas propiedades han sido importantes en el contexto de las teorías de escalado dinámico [Barabási y Stanley 1995] y que también poseen aplicaciones tecnológicas relevantes.

En esta sección, lejos de pretender llevar a cabo una recopilación exhaustiva de la totalidad de resultados, intentaremos resumir las principales observaciones experimentales. Estudiaremos cómo se ve modificada la evolución de la morfología cuando se alteran los parámetros experimentales, con el fin de obtener algunas conclusiones que nos sirvan de base a la hora de comparar con los resultados teóricos de los siguientes capítulos. Veremos que, debido a la diversidad de parámetros y a la complejidad del proceso, los resultados serán muy variados. Nos centraremos en las características más relevantes para nuestro estudio intentando establecer las tendencias más generales sin dejar de exponer, al menos de forma breve, otros resultados con el fin de mostrar una visión lo más completa posible del estado experimental actual.

### 2.4.1. Materiales amorfos o amorfizables

#### 2.4.1.1. Estrías o surcos (incidencia oblicua)

Generalmente se supone que la aparición de nanoestrías o nanosurcos se produce cuando se bombardea de forma oblicua una superficie. La orientación de la modulación periódica está determinada por la anisotropía generada por la proyección del haz sobre la superficie. Las evidencias son numerosas, encontrándose en

una amplia variedad de materiales y condiciones experimentales (vidrio [Navez, Sella y Chaperot 1962; Toma *et al.* 2005], Si [Wittmaack 1990; Carter y Vishnyakov 1996; Vajo, Doty y Cirlin 1996; Erlebacher *et al.* 1999; Chason *et al.* 2001; Habenicht *et al.* 2002; Ziberi *et al.* 2005; Brown *et al.* 2005; Brown y Erlebacher 2005; Ziberi, Frost y Rauschenbach 2006], GaAs [Cirlin *et al.* 1991; Karen *et al.* 1995], Ge [Chason *et al.* 1994], SiO<sub>2</sub> [Flamm, Frost y Hirsch 2001; Mayer, Chason y Howard 1994], grafito [Habenicht *et al.* 1999; Habenicht 2001], diversos metales policristalinos [Karmakar y Ghose 2004; Mishra y Ghose 2006]). Un ejemplo del tipo de estructuras que se estudiarán en este apartado se muestra en la figura 2.4.

#### ■ Orientación

Una de las características más notables y primeramente observadas en este tipo de experimentos es el giro en la orientación de las estrías cuando el ángulo de incidencia,  $\theta$ , se aleja de la normal [Navez, Sella y Chaperot 1962]. Cuando  $\theta$  es pequeño las estrías se orientan perpendicularmente a la proyección del haz sobre la superficie. Si lo aumentamos, existe un ángulo crítico (ligeramente mayor de 60 grados para silicio) a partir del cual se orientan paralelas a la proyección del haz (ver figura 2.1). Este efecto ha sido observado en diversos materiales como vidrio [Navez, Sella y Chaperot 1962], Si [Karen *et al.* 1995], grafito [Habenicht *et al.* 1999], SiO<sub>2</sub> [Flamm, Frost y Hirsch 2001] o aluminio policristalino [Mishra y Ghose 2006], entre otros. En los experimentos de Brown *et al.* (2005) esta rotación se produce en el transcurso del tiempo. Debemos señalar que estas morfologías no aparecen para todos los ángulos. Experimentalmente esta ventana suele situarse entre los 30° y 70°; por ejemplo, en el estudio de Wittmaack (1990) para el bombardeo de silicio, se encuentran que la formación de estrías aparece para ángulos entre 32° y 58°.

#### ■ Tamaño

El tamaño lateral de las estrías se define como la longitud de onda del patrón, que denominaremos  $l$ . A la distancia entre el punto más alto del patrón y el más bajo la llamaremos amplitud de la estría y será representada por la letra  $A$ . Estas dos magnitudes dependen de diferentes parámetros experimentales como el tipo de sustrato e ion utilizado, la temperatura, el flujo y/o la energía de iones, el ángulo de incidencia, tiempo de bombardeo, etc. Mientras que  $l$  puede variar desde algunas decenas a algunas centenas de nanómetros, la amplitud suele ser sólo del orden de varios nanómetros. Veremos a continuación cómo se altera el tamaño del patrón al modificar los diferentes parámetros experimentales:

##### - Temperatura

Se han encontrado dos tipos de comportamientos dependiendo de la temperatura,  $T$ . Mientras que para bajas temperaturas  $l$  tiende a ser independiente de  $T$ , como ocurre en el experimento de Carter y Vishnyakov (1996)

para Si bombardeado con iones de  $\text{Xe}^+$  a energías de 10-40 keV y temperaturas entre 100 y 300 K, en el caso de altas temperaturas ( $T \geq 673$  K para  $\text{SiO}_2$  bombardeado con  $\text{Ar}^+$  con energías del orden de 0.5 – 2.0 keV) la longitud de onda crece con la temperatura siguiendo la ley de Arrhenius  $l \sim (1/T^{1/2}) \exp(-\Delta E/2k_B T)$  [Makeev, Cuerno y Barabási 2002]. Esto indica el carácter de activación térmica de los procesos de relajación superficial a altas temperaturas.

- *Flujo*<sup>2</sup>

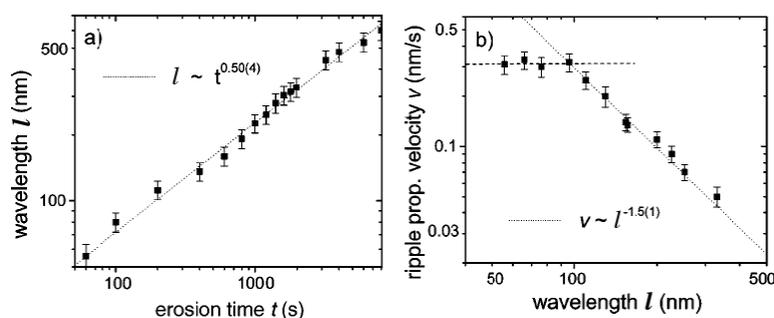
La longitud de onda de las ondulaciones puede depender también del número de iones por unidad de área y tiempo. En el trabajo de Erlebacher *et al.* (1999) se midió la dependencia con el flujo,  $\Phi$ , para Si bombardeado con iones de  $\text{Ar}^+$  a 0.75 keV a altas temperaturas ( $T \sim 1300$  K) y se encontró  $l \sim \Phi^{-1/2}$ . En el trabajo de Brown y Erlebacher (2005) sobre el mismo material e iones de  $\text{Ar}^+$  a 0.5 keV se observó que para  $T = 917$  K y determinados flujos (mayores de  $4.68 \times 10^{15}$  iones  $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ ) no se formaban ondulaciones perpendiculares a la proyección del haz. Para temperaturas más altas (concretamente  $T = 990$  K) y para una fluencia fija no se observó una variación relevante en el tamaño de las estrías con el flujo. Tampoco se observó dependencia de la longitud de onda con el flujo en el estudio de Vajo, Doty y Cirlin (1996) para Si bombardeado con  $\text{O}_2^+$ ,  $\theta = 40^\circ$  y  $E = 1.5$  keV a temperatura ambiente.

- *Tiempo*

La longitud de onda de las estrías puede variar en el transcurso del tiempo. Con mucha generalidad se encuentra que la amplitud crece exponencialmente en una etapa inicial, en el transcurso de la cual aparece una longitud de onda dominante que satura inmediatamente o sigue aumentando. Una longitud de onda independiente del tiempo se observó en Erlebacher *et al.* (1999), Ziberi *et al.* (2005) y Ziberi, Frost y Rauschenbach (2006) para Si con diferentes iones a energías menores de 2 keV y temperatura  $T = 855$  K en el primer caso y aproximadamente de  $T \simeq 285$  K en los restantes. Un comportamiento diferente puede encontrarse en otros trabajos también en Si para energías del mismo orden, pero temperaturas más elevadas ( $T \simeq 1000$  K) [Brown y Erlebacher 2005] y para energías de varias decenas de keV y temperatura ambiente [Carter y Vishnyakov 1996; Habenicht *et al.* 2002]. En Habenicht *et al.* (2002) se encuentra una ley de potencias para la evolución temporal de la longitud de onda, concretamente  $l$  aumenta según  $l \sim t^{0.5}$ , tal y como se observa en la figura 2.5. En el trabajo de Flamm, Frost y Hirsch (2001) en  $\text{SiO}_2$  bombardeado con iones de  $\text{Ar}^+$  a  $E = 0.8$  keV y  $T = 285$  K se mide un crecimiento más lento,

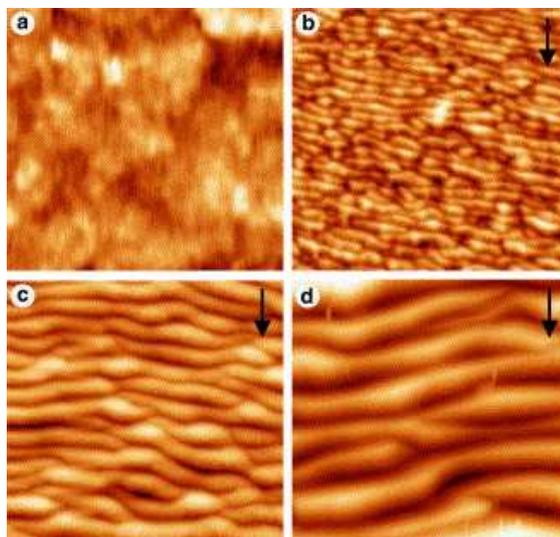
<sup>2</sup>Definimos flujo como el número de iones lanzados por unidad de superficie normal a la dirección de incidencia y por unidad de tiempo, es decir, será el equivalente de la palabra inglesa “flux”. Para el término “fluence”, definido como el número total de iones por unidad de área, y que juega el papel del tiempo, utilizaremos la denominación fluencia.

concretamente  $l \sim t^{0.15}$ . También se encontró una ley de potencias para la evolución del tamaño de las estrías en los trabajos de Toma *et al.* (2005) en vidrio a  $T = 300$  K con iones de  $\text{Ar}^+$  de 0.8 keV, en concreto  $l \sim t^{0.95}$ .



**Figura 2.5** — (a) Medida de la longitud del patrón  $l$  en función del tiempo; (b) medida de la velocidad de movimiento de las estrías en función del tamaño del patrón; ambas para Si bombardeado con iones  $\text{Ga}^+$  a 30 keV con  $\theta = 30^\circ$ ,  $\Phi = 7.5 \times 10^{14}$  iones  $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ . Se observa que la velocidad decrece a la vez que las ondulaciones aumentan su tamaño. La línea discontinua representa el ajuste a la ley de potencias mostrada en las gráficas. Tomada de Habenicht *et al.* (2002).

**Figura 2.6** — Imágenes obtenidas por AFM ( $400 \times 400 \text{ nm}^2$ ) de vidrio bombardeado con iones de  $\text{Ar}^+$  a  $E = 0.8$  keV,  $\theta = 35^\circ$ ,  $\Phi = 400 \mu\text{A cm}^{-2}$  y  $T = 300$  K para diferentes tiempos: (a)  $t = 0$  min; (b)  $t = 15$  min; (c)  $t = 67$  min; (d)  $t = 210$  min. La flecha indica la proyección del haz sobre el sustrato. Tomada de Toma *et al.* (2005).



#### - Tipo y energía de los iones

En el trabajo de Ziberi *et al.* (2005) se erosiona una muestra de Si a temperatura ambiente con iones de  $\text{Ar}^+$ ,  $\text{Kr}^+$ ,  $\text{Xe}^+$  y  $\text{Ne}^+$  de bajas energías, concretamente menores de 2 keV. Mientras que se observa la formación de

estrías para los tres primeros tipos de iones, no ocurre así para el  $\text{Ne}^+$ . Esto se justifica debido al mayor poder de frenado de los iones más pesados, el cual provoca que se deposite una mayor cantidad de energía en la superficie de la muestra. Este efecto y/o la reflexión de iones y átomos, más importante en el bombardeo con iones ligeros, hacen que no se excaven más rápido los valles que los picos y no se induzca la inestabilidad morfológica asociada con la formación de estrías. Otro estudio llevado a cabo en este trabajo es la dependencia de la longitud de onda del patrón con respecto a la energía cinética de los iones,  $E$ . En los casos de  $\text{Ar}^+$ ,  $\text{Kr}^+$  y  $\text{Xe}^+$ , el tamaño de la ondulación parece aumentar linealmente con  $E$ . Este hecho se ha observado también en trabajos previos para Si bombardeado con  $\text{O}_2^+$ ,  $\theta = 40^\circ$  a temperatura ambiente [Vajo, Doty y Cirlin 1996] y en otros materiales como  $\text{SiO}_2$  bombardeado con  $\text{Ar}^+$  a  $T = 285$  K [Flamm, Frost y Hirsch 2001] o GaAs [Karen *et al.* 1995]. En el estudio de Habenicht (2001) se encontró una relación aproximadamente lineal para el bombardeo de grafito con iones de  $\text{Ar}^+$ , mientras que  $l \sim E^{0.7}$  para iones de  $\text{Xe}^+$ . A diferencia de los trabajos anteriores, en el artículo de Brown y Erlebacher (2005) en Si se mide un decaimiento de  $l$  a altas temperaturas ( $T = 930$  K) cuando la energía de los iones de  $\text{Ar}^+$  aumenta entre 0.25 y 1.2 keV. Concretamente, el tamaño de las ondulaciones perpendiculares a la proyección del haz decrece según  $l \sim E^{-0.45}$ .

#### ■ Rugosidad

La rugosidad global de la superficie,  $W$ , definida en la sección 1.2, es proporcional a la amplitud del patrón para una estructura perfectamente periódica. Las superficies que se encuentran en los experimentos no son perfectamente periódicas y, por tanto,  $W$  representa una medida no sólo de la amplitud del patrón, sino también de su desorden en alturas. Será una magnitud fundamental en el estudio de las superficies rugosas como se verá más adelante. En general, para una superficie plana sometida a bombardeo, la rugosidad aumenta con el tiempo hasta alcanzar un valor de saturación (es decir, hasta que alcanza un valor constante asociado con un estado estacionario de la dinámica). Una buena forma de caracterizar este crecimiento es determinar si sigue una ley de potencias, es exponencial o de otro tipo. En el caso que sea una potencia del tiempo, es importante conocer el valor del exponente. Los comportamientos observados para  $W(t)$  son variados, pero es frecuente encontrar que tras un crecimiento exponencial la rugosidad sature inmediatamente [Ziberi *et al.* 2005] o, como ocurre en Flamm, Frost y Hirsch (2001) y Toma *et al.* (2005), que se observe una evolución temporal mucho más lenta. Concretamente, en estos experimentos la rugosidad aumenta siguiendo una ley de potencias con exponentes  $\beta = 0.46$  y  $\beta = 1.02$ , respectivamente. En ambos casos estos exponentes son similares a los obtenidos para la evolución temporal de la longitud de onda. Este hecho parece indicar que la principal contribución al desorden en altura del sustrato se debe al crecimiento de las

ondulaciones. En el estudio de Habenicht (2001) también se observa un crecimiento exponencial tras el cual  $W$  aumenta siguiendo una ley de potencias. En este trabajo se muestra asimismo cómo decrece la rugosidad cuando se aumenta la temperatura del sustrato.

#### ■ Longitud de correlación

Como se vio en la sección 1.2, una forma de cuantificar el orden lateral del patrón es a través de su longitud de correlación,  $\zeta$ , que da una estimación del tamaño medio de los dominios [Zhao, Wang y Lu 2001]. Por ejemplo, en las referencias Ziberi *et al.* (2005) y Ziberi, Frost y Rauschenbach (2006), se observa que mientras  $l$  permanece constante, la longitud de correlación aumenta con la fluencia y crece de la misma forma que la longitud de onda cuando aumenta la energía [Ziberi, Frost y Rauschenbach 2006], siendo siempre del orden de  $\zeta \simeq 10l$ .

#### ■ Movimiento

El movimiento de las estrías se ha estudiado experimentalmente en dos trabajos, Habenicht *et al.* (2002) y Alkemade (2006). En ambos casos se utiliza un microscopio electrónico de barrido (SEM) que permite medir la emisión de electrones secundarios inducidos por un haz focalizado de iones o electrones. De esta forma puede monitorizarse la superficie bombardeada en tiempo real. En el primero de los estudios, en el cual se erosiona silicio con iones de  $\text{Ga}^+$  a 30 keV y  $\theta = 30^\circ$ , se observa que las estrías se mueven en la dirección del haz a una velocidad  $v = 0.33 \text{ nm s}^{-1}$  en las primeras etapas de evolución. A la vez que las estrías se ensanchan, pierden velocidad según  $v \sim l^{-1.5}$ . Como se desprende de la figura 2.5, en este experimento se observa  $l \sim t^{0.5}$ , lo cual implica que la velocidad decae en el transcurso del tiempo como  $v \sim t^{-0.75}$ . En el experimento de Alkemade (2006) sobre una superficie de vidrio bombardeado con iones de  $\text{Ga}^+$  a 30 keV, también se observa la propagación del patrón en la dirección de la proyección haz. En este caso se muestra en tiempo real la aparición de las estrías, las cuales no comienzan a moverse hasta que la mayoría de ellas se han formado completamente para alcanzar, finalmente, una velocidad uniforme.

#### 2.4.1.2. Puntos u hoyos (incidencia normal)

En contraste con la aparición de estrías, la aparición de nanopuntos o nanofosos ocurre cuando se elimina la anisotropía creada al irradiar oblicuamente la muestra. Estas estructuras presentan un perfil cónico, sinusoidal o parabólico y se caracterizan por una distribución uniforme de tamaños y un orden espacial de medio a largo alcance. Habitualmente se bombardea la superficie con el haz situado en posición perpendicular, aunque otra forma de recuperar la isotropía es rotar la muestra a la vez que se erosiona. Este es el comportamiento general predicho por las teorías

continuas aunque bajo determinadas condiciones experimentales, también pronosticadas por algunas de estas teorías, es posible obtener nanopuntos bajo incidencia oblicua sin rotar la muestra, tal y como se ha demostrado experimentalmente por Ziberi, Frost y Rauschenbach (2006) y Tan *et al.* (2006). La formación de estos nanopuntos se ha observado, con mayor o menor orden, en diversos materiales, GaSb [Facsko *et al.* 1999; Bobek *et al.* 2003; Xu y Teichert 2004], InP [Frost, Schindler y Bigl 2000], InSb [Facsko, Kurz y Dekorsy 2001], Si [Gago *et al.* 2001; Gago *et al.* 2002; Ozaydın *et al.* 2005] o Ge [Ziberi, Frost y Rauschenbach 2006], entre otros, y bajo diversas condiciones experimentales. Este hecho sugiere que el proceso de formación de estos patrones es independiente de los detalles microscópicos de la interacción entre iones y sustrato, y nos animará a describir las características generales del proceso. En este apartado, al igual que hicimos en el caso anterior, repasaremos algunas de las propiedades más generales observadas en los experimentos.

#### ▪ **Tamaño**

Análogamente al caso de las estrías, podemos caracterizar el tamaño de los nanopuntos mediante una distancia lateral  $l$  y una altura  $A$  que dependen de las condiciones experimentales y cuyos órdenes de magnitud, como cabría esperar, también coinciden con los obtenidos en el apartado anterior.

##### - *Temperatura*

En el trabajo de Facsko, Kurz y Dekorsy (2001) se bombardean a diferentes energías muestras de GaSb y InSb con iones de  $\text{Ar}^+$  para  $T = 213$  K y 333 K. No se observa que la temperatura tenga influencia en la longitud de onda, lo cual difiere del resultado obtenido por Gago *et al.* (2006), donde se investiga la relevancia de la temperatura en la formación de nanopuntos de Si. Aquí se bombardea la muestra con iones de  $\text{Ar}^+$  a 1 keV en un rango de temperaturas  $T = 300$ -625 K, y se encuentra que la longitud de onda,  $l$ , decrece con la temperatura.

##### - *Flujo*

En la investigación de Facsko, Kurz y Dekorsy (2001) a bajas temperaturas ( $T \simeq 273$  K) no se observan cambios significativos en la longitud de onda del patrón cuando se varía el flujo entre  $\Phi = 1 \times 10^{15} - 4 \times 10^{15}$  iones  $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ . En el trabajo de Qi *et al.* (2005) para bombardeo de Si con  $\text{Ar}^+$  se pone de manifiesto que son necesarios al menos flujos del orden de  $100 \mu\text{A cm}^{-2}$  (e. d.  $6.24 \times 10^{14}$  iones  $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ ) para la formación de nanopuntos.<sup>3</sup>

##### - *Tiempo*

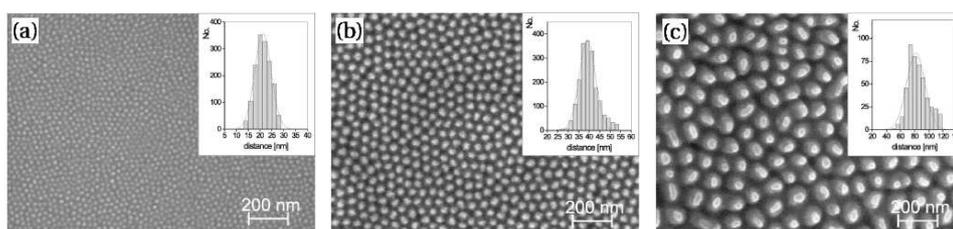
El estudio de la evolución temporal del patrón es una de las observaciones más frecuentes en estos experimentos. En la mayoría de trabajos se observa

<sup>3</sup>Para un ion con una única carga positiva,  $1 \mu\text{A cm}^{-2} \simeq 6.24 \times 10^{12}$  iones  $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ .

que el tamaño de los puntos aumenta con el tiempo hasta saturar [Facsko *et al.* 1999; Gago *et al.* 2001; Gago *et al.* 2002; Bobek *et al.* 2003; Ozaydin *et al.* 2005], es decir, la estructura está sometida a un proceso de ensanchamiento o “coarsening” hasta alcanzar un determinado tamaño fijo. De los experimentos citados anteriormente, tan sólo en el estudio de Gago *et al.* (2001) se cuantifica el crecimiento del  $l$  en el transcurso del tiempo. En este trabajo  $l$  se ajusta a una ley de potencias de la forma  $l \sim t^{0.2}$  antes de que el patrón alcance un valor constante en torno a 60 nm de anchura y 7.5 nm de altura.

- *Tipo y energía de los iones*

En el estudio de Facsko, Kurz y Dekorsy (2001) se obtienen nanopuntos con orden hexagonal para GaSb e InSb. A pesar de que el tamaño de los puntos es aproximadamente 1.2 veces mayor para el GaSb, se obtienen resultados similares cuando se investiga el efecto que tiene la energía en la formación de estos patrones. Se observa un crecimiento sistemático en el tamaño de los puntos conforme aumenta la energía, concretamente como  $l \sim E^{0.5}$  (ver figura 2.7).



**Figura 2.7** — Vista cenital obtenida por SEM de patrones en GaSb inducidos con iones de  $\text{Ar}^+$  a incidencia normal y diferentes energías: (a) 0.1 keV; (b) 0.5 keV; (c) 1.5 keV. Los puntos se ordenan hexagonalmente. Se observa que la longitud de onda depende de la energía cinética de los iones. Los detalles muestran la distribución de las distancias a los próximos vecinos. Tomada de Facsko, Kurz y Dekorsy (2001).

▪ **Orden**

Una de las características generales que se observa en este tipo de experimentos es la agrupación de los puntos en orden hexagonal [Facsko *et al.* 1999; Gago *et al.* 2001; Facsko, Kurz y Dekorsy 2001; Bobek *et al.* 2003; Xu y Teichert 2004]. Este efecto es común a la mayoría de experimentos y puede observarse claramente a partir de la función de autocorrelación bidimensional.

▪ **Rugosidad**

Como se mencionó anteriormente, la rugosidad nos da una medida de la amplitud de los puntos y del desorden en altura que muestran éstos. En el trabajo de Bobek *et al.* (2003) en GaSb se estudia la evolución temporal de

$W$ . Se observan tres regímenes de comportamiento. En una primera etapa la rugosidad crecería exponencialmente, tras lo cual le sucedería un crecimiento más lento y un pequeño decaimiento hasta alcanzar, a continuación, una tercera etapa donde  $W$  permanecería constante. Un comportamiento similar se recoge en Xu y Teichert (2004). En el estudio de Facsko, Kurz y Dekorsy (2001) se menciona que la rugosidad aumenta con la energía del ion, pero no se cuantifica dicho crecimiento. En Gago *et al.* (2006) sí se representa el decaimiento de  $W$  conforme aumenta la temperatura.

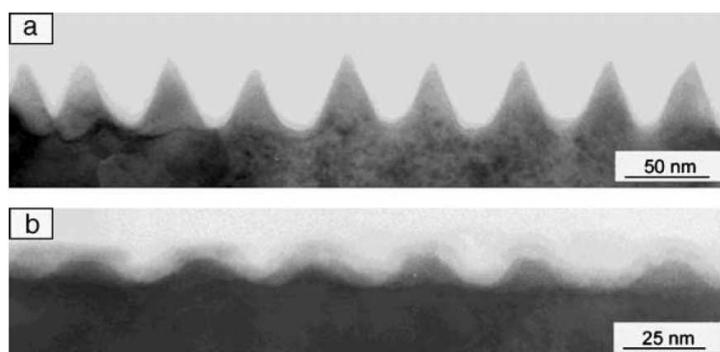
Además de los resultados expuestos anteriormente se ha observado la aparición de puntos para incidencia oblicua en los casos de Ge bombardeado con  $Xe^+$  a 2 keV [Ziberi, Frost y Rauschenbach 2006] e InP con  $O_2^+$  a 1 keV [Tan *et al.* 2006], sin rotación del sustrato. En el primero de estos trabajos aparece un patrón de nanopuntos para ángulos menores de  $5^\circ$ . Si aumentamos  $\theta$  la morfología se transforma en una estructura de estrías, que se convierte nuevamente en un patrón de puntos ordenados hexagonalmente para  $\theta = 20^\circ$ . En este estudio tanto la rugosidad como la longitud de onda de los puntos y estrías decaen cuando aumenta el ángulo de incidencia. En el experimento de Tan *et al.* (2006) se obtiene una estructura de puntos que se alinea en la dirección de la proyección del haz para  $\theta$  entre  $38^\circ$  y  $62^\circ$ .

### 2.4.1.3. Puntos o fosos (sustrato rotante)

No hemos incluido en el análisis anterior otros experimentos donde la incidencia es oblicua, pero el giro simultáneo del sustrato da como resultado la formación de nanopuntos. Originalmente, el bombardeo oblicuo de la muestra en rotación se utilizó para producir un mayor rendimiento de erosión y transformar las estrías en un patrón desordenado más plano [Cirlin *et al.* 1991]. En el experimento de Frost, Schindler y Bigl (2000) fue donde se utilizó por primera vez esta técnica para obtener un patrón de puntos ordenados sobre InP bombardeado con iones de  $Ar^+$ . Con el fin de estimar la velocidad de rotación de la muestra, señalaremos que en el trabajo de Frost *et al.* (2004) se bombardean diversos materiales (InP, GaSb, InSb y InAs) girándose a la vez la muestra a una velocidad de 15 revoluciones por minuto. Nuevamente, esta velocidad de rotación nos da una estimación de los tiempos típicos de formación de los patrones. Como ya se indicó en la sección 2.3, éstos son del orden del segundo, y por tanto mucho más lentos que los fenómenos individuales de erosión que no sobrepasan las centenas de picosegundos. En el estudio de Frost, Schindler y Bigl (2000) se observa que las muestras no rotadas presentan una morfología más rugosa que las giradas, donde aparecen puntos que se ordenan hexagonalmente. Se examinan estas estructuras estudiando el comportamiento de la longitud de onda (que varía entre 20 y 100 nm) y de la rugosidad al modificarse los diferentes parámetros experimentales. A continuación se resume cómo se alteran las principales características de los patrones cuando se modifican las condiciones experimentales.

- *Ángulo*

En el trabajo de Frost, Schindler y Bigl (2000), con  $T = 285$  K para ángulos de incidencia menores de  $50^\circ$ , la longitud de onda aumenta conforme lo hace  $\theta$  a la vez que se mantiene la forma hexagonal en la distribución espacial de los puntos y la rugosidad total de la superficie tiende a decrecer. Para  $\theta > 50^\circ$  desaparece la estructura, volviendo a tenerse puntos ordenados con  $\theta = 80^\circ$ . Un resultado similar se observa en Frost *et al.* (2004), donde se pone de manifiesto que para GaSb el perfil de la estructura cambia de una forma conoidal a sinusoidal cuando el ángulo varía entre  $0^\circ$  y  $75^\circ$  y la energía entre 0.5 keV y 1.2 keV respectivamente, como se muestra en la figura 2.8.



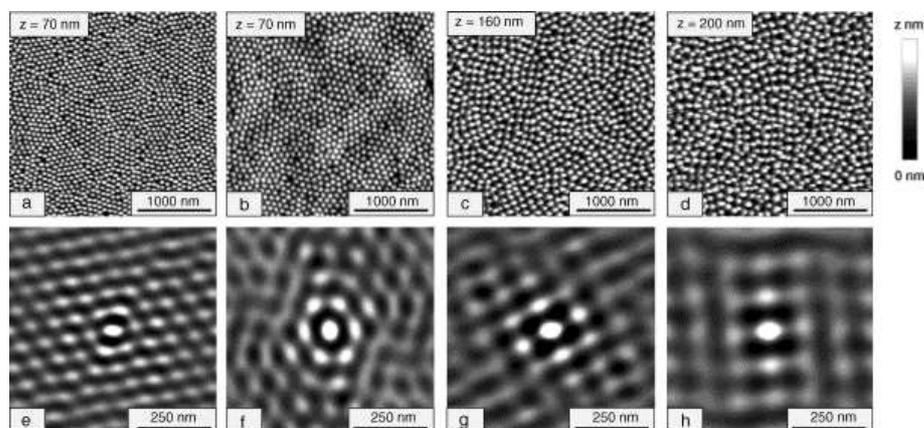
**Figura 2.8** — Imagen obtenida mediante microscopía de transmisión electrónica (TEM) para una sección longitudinal de un sustrato rotante de GaSb. (a)  $\theta = 0^\circ$ ,  $E = 0.5$  keV,  $T = 285$  K,  $\Phi = 300 \mu\text{A cm}^{-2}$  tras 90 minutos de bombardeo; (b)  $\theta = 75^\circ$ ,  $E = 1.2$  keV,  $T = 285$  K,  $\Phi = 300 \mu\text{A cm}^{-2}$  tras 90 minutos de bombardeo. La capa superficial amorfa tiene aproximadamente 4 nm de grosor. Tomada de Frost *et al.* (2004).

- *Temperatura*

Se observa en Frost, Schindler y Bigl (2000) que tanto  $l$  como  $W$  aumentan al hacerlo la temperatura. El rango estudiado va de 285 a 375 K, observándose que para  $T > 315$  K la formación de puntos ordenados casi desaparece. Un resultado análogo se obtiene en Frost *et al.* (2004), donde además se observa que para altas temperaturas ( $T \geq 313$  K) y  $\theta = 30^\circ$  se forma una estructura de puntos con orden cuadrado tanto para GaSb como para InP (figura 2.9).

- *Tiempo*

Con el fin de caracterizar el crecimiento de la longitud de onda y la rugosidad en el transcurso del tiempo, en Frost, Schindler y Bigl (2000) se representan ambas magnitudes frente a la fluencia. Se observa que  $W$  aumenta como  $W \sim t^\beta$  con  $\beta = 0.80$  en las fases iniciales y  $\beta = 0.27$  en las etapas finales,



**Figura 2.9** — Vista cenital por AFM (imágenes fila superior,  $3 \mu\text{m} \times 3 \mu\text{m}$ ) y sus correspondientes funciones de autocorrelación (imágenes fila inferior,  $750 \text{ nm} \times 750 \text{ nm}$ ) de un sustrato de InP sometido a bombardeo con iones de  $\text{Ar}^+$ ,  $\theta = 30^\circ$ ,  $E = 0.5 \text{ keV}$ ,  $\Phi = 300 \mu\text{A cm}^{-2}$ ,  $t = 90$  minutos a diferentes temperaturas: (a)  $T = 268 \text{ K}$ ; (b)  $T = 286 \text{ K}$ ; (c)  $T = 313 \text{ K}$ ; (d)  $T = 335 \text{ K}$ . Tomada de Frost *et al.* (2004).

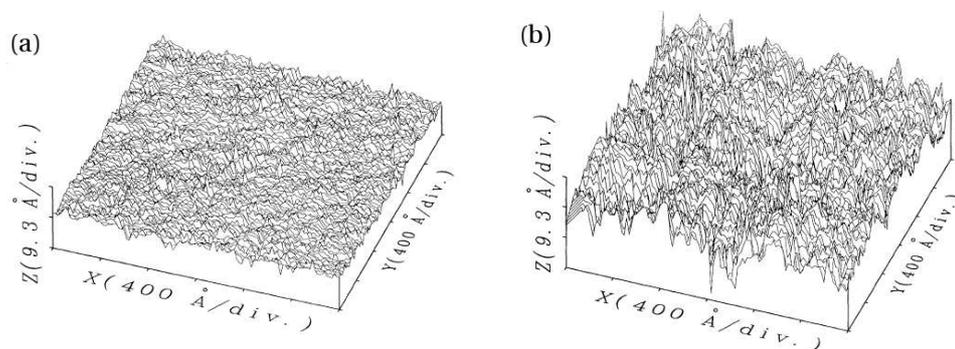
mientras que el crecimiento de la longitud de onda verifica  $l \sim t^{0.26}$  antes de saturar.

#### ■ Energía

En el experimento de Frost, Schindler y Bigl (2000) se utilizaron energías entre 200 y 1200 eV, y se observó la formación de patrones por encima de 350 eV. En general, tanto  $l$  como  $W$  aumentan al hacerlo la energía.

#### 2.4.1.4. Superficies rugosas

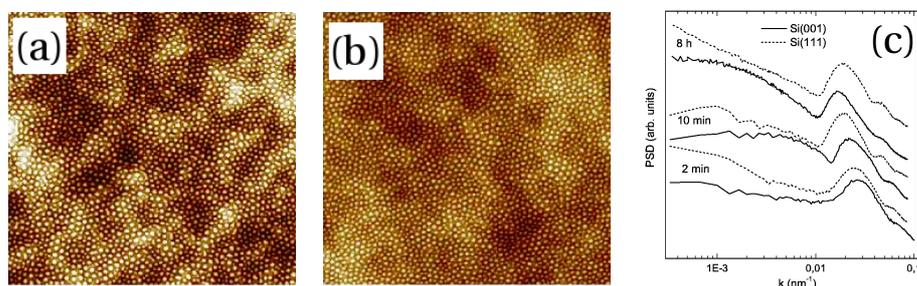
No siempre tiene por qué aparecer el tipo de patrones mostrado anteriormente cuando se somete un sustrato a erosión iónica. Esto ocurre, por ejemplo, en el experimento de Cirlin *et al.* (1991) donde al girar un sustrato de GaAs sometido a irradiación con iones de  $\text{O}_2^+$  a 3 keV se eliminan las estrías formadas al bombardear oblicuamente y, en lugar de aparecer un patrón ordenado, se obtiene una estructura desordenada. Mediante esta técnica, como mencionamos en el apartado anterior, se aumentó el rendimiento de erosión y se redujo a su vez la rugosidad total. También pueden aparecer superficies desordenadas sin que exista rotación simultánea de la muestra. Esto ocurre en el experimento de Chey, Nostrand y Cahill (1995) donde la morfología de la superficie cambia desde un conjunto de pilas desordenadas a un patrón más regular de hoyos o fosos cuando aumentamos la temperatura por encima de 543 K. Es frecuente, por tanto, que la intercara no presente la formación de un patrón ni de una escala característica, sino que se obtenga una superficie rugosa con propiedades de rugosidad cinética [Barabási y Stanley 1995]. Por ejemplo, en



**Figura 2.10** — Topografías obtenidas por STM de grafito pirolítico bombardeado con iones de  $\text{Ar}^+$  a 5 keV,  $\theta = 60^\circ$  y  $\Phi = 6.9 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$  a temperatura ambiente para fluencias: (a)  $10^{16} \text{ iones cm}^{-2}$ ; (b)  $10^{17} \text{ iones cm}^{-2}$ . Tomada de Eklund *et al.* (1991).

el experimento de Eklund *et al.* (1991) se bombardea grafito pirolítico con iones de  $\text{Ar}^+$  a 5 keV y  $\theta = 60^\circ$ ; se observa que la superficie se hace más rugosa en el transcurso del tiempo y presenta propiedades de autoafinidad (figura 2.10). Las medidas de los exponentes críticos muestran valores de 1.6-1.8 para el *exponente dinámico*  $z$  y  $\alpha = 0.2 - 0.4$  para el *exponente de rugosidad*. Estos valores no son lejanos de las propiedades de escalado dinámico de la clase de universalidad de KPZ. Otros experimentos han mostrado también un comportamiento de rugosidad cinética para la evolución de la superficie en diversos materiales como GaAs [Wang, Pechman y Weaver 1996], Ge [Smilgies *et al.* 1997] o Si [Chan y Wang 1998]. En este último experimento, por ejemplo, las medidas de los exponentes de escalado son consistentes con los obtenidos en la ecuación estocástica de Kuramoto-Sivashinsky (KS), de nuevo perteneciendo a esta clase de universalidad.

Debemos mencionar que en algunos experimentos se obtiene un patrón de un determinado tamaño mientras que a escalas mucho mayores la superficie presenta rugosidad cinética [Ziberi, Frost y Rauschenbach 2006; Gago *et al.* 2006]. En las figuras 2.11 (a) y (b) se muestra esta propiedad para el caso de un patrón de puntos en silicio donde se observa, debido a la diferencia de color entre las zonas más deprimidas (oscuras) y las más altas (claras), el desorden a distancia mucho mayores que el tamaño de los puntos. Habíamos mencionado que una forma de estimar la longitud de los dominios para la cual el patrón aparece ordenado era a partir de la longitud de correlación  $\zeta$ . Para distancias mucho mayores que esta longitud puede aparecer rugosidad cinética. Esta propiedad se pone de manifiesto, tal y como se mencionó en el capítulo anterior, en el factor de estructura. En la figura 2.11 (c) se muestran los factores de estructuras a escala logarítmica para superficies obtenidas en condiciones experimentales análogas a las de las figuras 2.11 (a) y (b), pero a diferentes tiempos. Podemos observar cómo la curva alcanza una única pendiente, al menos para el caso de Si(111), para distancias mucho mayores que el tamaño del patrón, lo cual indica que la superficie es autoafín a estas distancias.



**Figura 2.11** — Vistas cenitales obtenidas mediante AFM ( $3 \times 3 \mu\text{m}^2$  de la superficie de Si(001) y Si(111) (figuras (a) y (b), respectivamente) bombardeadas perpendicularmente tras 16 h. con iones de  $\text{Ar}^+$  a 1.2 keV. (c) Factor de estructura obtenido a partir de las imágenes por AFM en el mismo caso que (a) y (b) y diferentes tiempos de irradiación. Tomada de Gago *et al.* (2006).

## 2.4.2. Metales

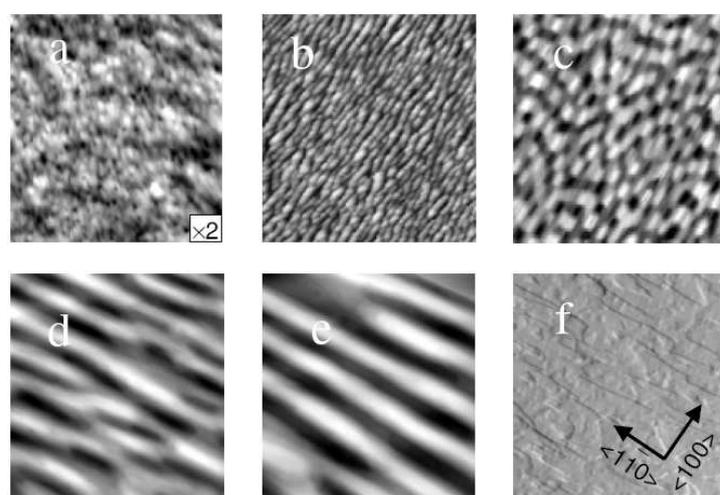
En contraste con los materiales amorfos o semiconductores, debido a la naturaleza de los enlaces atómicos, los metales no presentan amorfización de la superficie cuando son irradiados con iones, al menos a energías del orden del keV. Incluso después de un bombardeo prolongado las propiedades cristalinas del sustrato no se ven afectadas, aunque sí se producen agregados de vacantes y átomos superficiales [Costantini *et al.* 2001] que hacen aumentar la ya de por sí alta difusividad superficial de estos materiales. En este caso, a la inestabilidad morfológica debida a la mayor erosión de valles que de picos hemos de añadirle la causada por el hecho de que cuando los átomos difunden sobre la superficie existe una barrera extra de energía para los que intentan descender a un escalón inferior. Este efecto, conocido como barrera de Ehrlich-Schwoebel [Ehrlich y Hudda 1966; Schwobel y Shipsey 1966; Schwobel 1968], explica algunos de los resultados observados que mostraremos a continuación.

En el trabajo de Valbusa, Boragno y de Mongeot (2002) se puede encontrar una amplia revisión de los resultados experimentales de erosión en metales. En este estudio se distingue entre dos regímenes de comportamiento: *difusivo* y *erosivo*.

### ■ Régimen difusivo

Mientras que la erosión es responsable de que se formen un mayor número de partículas difusivas (átomos o vacantes), la inestabilidad de Ehrlich-Schwobel es determinante en la formación de las estructuras, las cuales tienden a alinearse a lo largo de las direcciones termodinámicamente más favorables. La morfología es por tanto consecuencia de la dirección dominante de difusión superficial. A diferencia de lo que ocurría para materiales amorfos o semiconductores, en este caso las simetrías del sustrato se reflejan en los patrones observados. Así, por ejemplo, en la figura 2.12, tomada

del trabajo de Rusponi, Boragno y Valbusa (1997) donde se bombardea plata con iones de  $\text{Ar}^+$  y  $\theta = 0^\circ$ , se observa que la orientación de las ondulaciones depende de  $T$ . Esto se debe a que la barrera de Ehrlich-Schwoebel afecta de forma diferente a la difusión sobre las terrazas dependiendo de la dirección cristalográfica. La activación térmica de la difusión superficial es la responsable de que al variar la temperatura se formen estrías orientadas en distintas direcciones. En el caso de la figura 2.12-c, como consecuencia de que a esa temperatura la difusión superficial es isótropa, se forma un patrón de bultos con simetría rectangular. Algunas de las características que presentan estas



**Figura 2.12** — Imágenes obtenidas por STM de nuestras  $350 \times 350 \text{ nm}^2$  de  $\text{Ag}(110)$  para  $\Phi = 4 \mu\text{A cm}^{-2}$ ,  $\theta = 0^\circ$ ,  $t = 15$  minutos y a diferentes temperaturas: (a)  $T = 160 \text{ K}$ ; (b)  $T = 230 \text{ K}$ ; (c)  $T = 270 \text{ K}$ ; (d)  $T = 290 \text{ K}$ ; (e)  $T = 320 \text{ K}$ ; (f)  $T = 350 \text{ K}$ . Tomada de Valbusa, Boragno y de Mongeot (2002).

estructuras son las siguientes:

- Se producen surcos incluso cuando el bombardeo es normal a la superficie.
- La orientación de los surcos depende de  $T$ . Esto se debe a que la inhibición de la barrera Ehrlich-Schwoebel se produce a diferentes temperaturas dependiendo de la dirección cristalográfica.
- La longitud de onda depende de  $T$ . A mayor temperatura la difusión superficial es mayor, y por tanto también  $l$ .
- La longitud de onda aumenta con la fluencia, es decir, se produce un crecimiento en el tamaño de las ondulaciones en el transcurso del tiempo.
- Las nanoestructuras producidas en el régimen difusivo muestran una periodicidad apenas dependiente de la energía de los iones.

Para materiales en los que la difusión de átomos/vacantes es isótropa, la morfología refleja esta simetría. Así, por ejemplo, en el caso del platino se encuentran unas pilas con forma piramidal y simetría hexagonal cuyo tamaño aumenta con la fluencia [Michely y Comsa 1991]. De nuevo la formación de este tipo de estructuras y la variación que se observa con la temperatura en éste y otros experimentos similares hacen indispensable la consideración de una causa de la inestabilidad alternativa a la puramente erosiva.

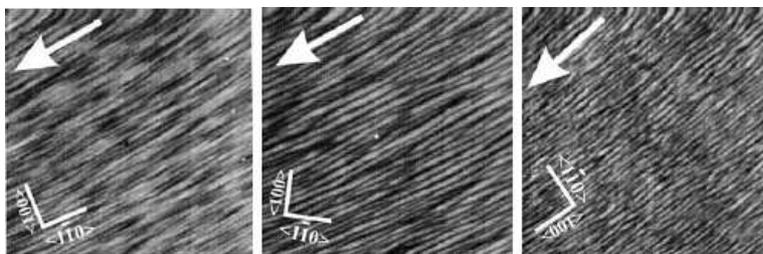
Similares características se han observado también en experimentos de crecimiento homoepitaxial<sup>4</sup> en el caso de sustratos anisótropos e isótropos, lo cual indica que los mecanismos que gobiernan ambos procesos son similares [Valbusa, Boragno y de Mongeot 2002].

■ *Régimen erosivo*

El régimen erosivo sólo se produce para ángulos próximos a incidencia rasante, aproximadamente para  $\theta \geq 70^\circ$ , y a bajas temperaturas, con el fin de inhibir los procesos de difusión activados térmicamente. En este régimen la formación de estructuras no depende del tipo, simetría u orientación del cristal. Podemos observar en la figura 2.13 que no se producen cambios significativos en la morfología (longitud de onda, amplitud, rugosidad, etc.) a pesar de que la proyección del haz se orienta en diferentes direcciones del sustrato. Esto significa que podemos obtener nanoestructuras que se alineen a lo largo de direcciones termodinámicamente desfavorables y que no pueden obtenerse mediante otras técnicas como crecimiento epitaxial, o erosión iónica en el régimen difusivo. Las principales características del patrón formado en este régimen son que las estrías se orientan paralelas a la proyección del haz, que  $l$  tiende principalmente a aumentar linealmente con  $E$  y que tanto la rugosidad como la longitud de onda aumentan como potencias del tiempo (concretamente como  $W \sim t^{0.33}$  y  $l \sim t^{0.24}$  para Ag(001) bombardeada con  $\text{Ne}^+$ ,  $\Phi = 3.1 \times 10^{13} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ ,  $E = 1 \text{ keV}$ ,  $\theta = 70^\circ$  y  $T=180 \text{ K}$  [Valbusa, Boragno y de Mongeot 2002]).

No siempre se obtienen patrones ordenados cuando se bombardea un sustrato metálico; a veces, como ocurría en el caso de los materiales amorfos, es posible encontrar superficies autoafines que muestran rugosidad cinética o no, dependiendo de las condiciones experimentales. Un ejemplo de este primer tipo de comportamiento es el experimento de Krim *et al.* (1993) en el cual se bombardea un sustrato de hierro con iones de  $\text{Ar}^+$  a  $5 \text{ keV}$ ,  $\theta = 25^\circ$ ,  $\Phi = 5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ . A partir de las imágenes obtenidas por STM se mide el valor de  $\alpha = 0.53 \pm 0.02$  para el exponente de rugosidad. Un estudio más amplio del régimen en el que nos encontramos y el tipo de superficies obtenidas dependiendo de las condiciones experimentales puede encontrarse en Chason y Chan (2006), donde se muestran las

<sup>4</sup>El término homoepitaxial en este contexto se refiere al crecimiento de películas epitaxiales sobre un sustrato del mismo material.



**Figura 2.13** — Imágenes obtenidas por STM de sustratos de Cu(110) ( $400 \times 400 \text{ nm}^2$ ) tras el bombardeo con iones de  $\text{Ar}^+$  a  $E = 1 \text{ keV}$ ,  $\theta = 70^\circ$ ,  $\Phi = 4 \mu\text{A cm}^{-2}$ ,  $t = 15$  minutos y  $T = 180 \text{ K}$  para diferentes orientaciones de la proyección del haz (flecha). Tomada de Rusponi *et al.* (1998a).

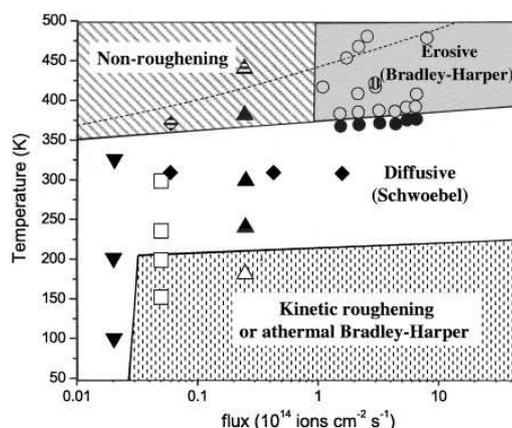
diferentes morfologías obtenidas al irradiar una blanco de cobre. En la figura 2.14 se representa un diagrama de los diferentes comportamientos de la superficie en función del flujo de iones y la temperatura del sustrato para Cu(001) bombardeado con iones de  $\text{Ar}^+$ . Para flujos pequeños y altas temperaturas la superficie se mantiene plana y no muestra ni rugosidad cinética ni ningún tipo de estructuras. Si aumentamos el flujo, encontramos el régimen erosivo descrito anteriormente donde se forman patrones cuya geometría es independiente de la orientación del sustrato.<sup>5</sup> A temperaturas medias, la barrera de Ehrlich-Schwoebel es determinante para describir satisfactoriamente el tipo de morfologías observadas; nos encontramos, entonces, en el régimen difusivo mencionado con anterioridad. Si la temperatura es aún menor, pero el flujo de iones es alto, se tiene de nuevo que la orientación cristalina no es relevante en la evolución de la superficie, la cual puede presentar rugosidad cinética o, de nuevo, la aparición de patrones del tipo de los mostrados en las secciones precedentes.

## 2.5. Conclusiones

En este capítulo hemos mostrado los orígenes históricos de la erosión iónica. Hemos señalado algunas de las aplicaciones de esta técnica que, debido a su versatilidad y a su bajo coste, es una candidata ideal para la construcción de diversos nanocomponentes. Como se ha podido comprobar, la erosión es un proceso complejo donde intervienen una gran variedad de mecanismos físicos. Pese a esto, es necesaria una descripción correcta de la evolución de la morfología para el desarrollo de las numerosas aplicaciones de esta técnica. En la sección 2.2 se han mostrado los principios microscópicos del proceso puramente erosivo. Básicamente, estos mecanismos fueron descritos teóricamente por Sigmund hace casi cuatro

<sup>5</sup>Los estados en los que se observa la formación de patrones vienen indicados como Bradley-Harper por ser éstos autores los creadores del modelo continuo original que aborda su descripción, tal y como se verá en el siguiente capítulo.

**Figura 2.14** — Diagrama de los regímenes de comportamiento y tipos de morfologías obtenidas al irradiar una muestra de Cu(001) con iones de  $\text{Ar}^+$  en función de la temperatura y el flujo. Cada símbolo representa una energía y un ángulo de incidencia diferente. Tomada de Chason y Chan (2006)



décadas y muchas de sus predicciones siguen siendo válidas. Por otro lado, el desarrollo de los modelos computacionales y el aumento de la potencia de cálculo han permitido abordar este problema mediante simulaciones numéricas. Sin embargo, tal y como se mostró en la sección 2.3, en la evolución de la morfología participan otros mecanismos, como la difusión superficial, que son fundamentales para describir satisfactoriamente este fenómeno. Una vez presentado de forma breve los principales ingredientes presentes en la erosión iónica y antes de utilizar las herramientas matemáticas y computacionales necesarias para describirla (las cuales se mostrarán en el siguiente capítulo), en la sección 2.4 hemos intentado dar una visión lo más completa posible el estado experimental actual.

Hemos separado por un lado los materiales amorfos o amorfizables de los metales, debido a que el carácter anisótropo de los primeros hacen que su estudio sea algo más sencillo (como se pondrá de manifiesto en el siguiente capítulo). En el caso de materiales amorfos o equivalentes hemos visto que tras el bombardeo, dependiendo de las condiciones experimentales, pueden aparecer nanoestructuras ordenadas o superficies desordenadas que pueden ser autoafines. En el caso de que se obtenga un patrón ordenado, lo más común son estructuras con formas de estrías y puntos. En el texto se detallan las características más comunes de estos patrones y cómo se modifican al cambiar las condiciones experimentales. A pesar de la diversidad de resultados, y de que muchos de ellos se muestran contradictorios, es posible establecer unos comportamientos generales para la formación de estos patrones. Habitualmente las muestras presenta una simetría similar a la del montaje experimental. Si el haz es perpendicular a la superficie se obtienen puntos, mientras que si se irradia de forma oblicua se obtienen surcos cuya orientación depende del ángulo de incidencia. El tamaño de las estructuras suele aumentar cuando lo hace la energía, aunque a altas temperaturas se han observado estrías cuya longitud de onda decrece. En el caso de altas temperaturas, si la difusión superficial activada térmicamente es relevante, el tamaño de las estrías aumenta con  $T$ , mientras que se ha encontrado que, o bien no se altera la longitud de onda cuando se

varía el flujo, o decrece al aumentar éste. También se ha observado que las estructuras pueden aumentar su tamaño o no en el transcurso del tiempo. Además, este crecimiento puede ser ilimitado o interrumpido dependiendo de las condiciones experimentales. La rugosidad es otro observable que suele aumentar en el transcurso del tiempo. Este crecimiento puede ser debido al crecimiento del patrón o al desorden de la estructura en alturas. Otra característica relevante en el caso de la formación de estrías es que éstas se mueven en la dirección de la proyección del haz. Un observable importante en el caso de la formación de nanopuntos es la simetría del orden espacial en el que se sitúan, generalmente lo hacen siguiendo una estructura hexagonal, pero a altas temperaturas y bajo incidencia rotante, se han obtenido también puntos siguiendo un orden cuadrado.

Por último, hemos presentado el caso de los metales, cuyas propiedades cristalinas no se ven afectadas cuando son sometidos a irradiación para las energías consideradas. Si las anisotropías del sustrato son relevantes para la formación de los patrones se dice que nos encontramos en el *régimen difusivo*; si, por el contrario no dependen del tipo, simetrías u orientación del cristal, se habla de un *régimen erosivo*.

A pesar de que a primera vista estos resultados pueden parecer complejos y en algunos casos contradictorios, en el siguiente capítulo se mostrará, en parte, a qué es debido esta amplia dispersión en los experimentos y cómo se explican en gran medida tan diversos comportamientos.



# 3

---

## Modelos de erosión iónica

---

En este capítulo se abordarán los modelos más importantes desarrollados hasta la fecha para describir los resultados experimentales mostrados en capítulo anterior. Mientras que en los modelos discretos se trata el problema desde un punto de vista microscópico y se obtienen resultados utilizando simulaciones de Monte Carlo que relacionan los fenómenos particulares de erosión con las observaciones experimentales de escalas espaciales y temporales mucho mayores, en las teorías continuas se obtienen ecuaciones diferenciales, cuyos coeficientes están relacionadas con los parámetros experimentales, con el fin de describir la evolución de la superficie desde un punto de vista mesoscópico.

### 3.1. Modelos discretos

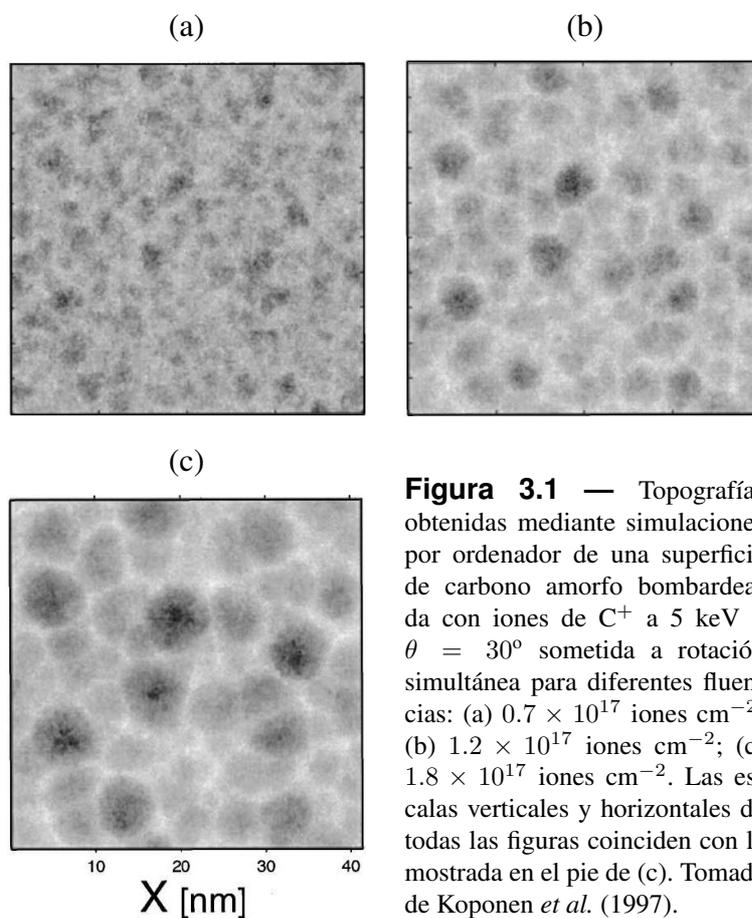
Las simulaciones por ordenador son fundamentales para entender los procesos microscópicos que dan lugar a la evolución de la morfología. Para estudiar el sistema a escala atómica, donde la aproximación continua deja de ser válida, debemos acudir a los modelos discretos. A cambio de ser capaces estudiar la superficie desde un punto de vista microscópico, tendremos que pagar el precio de no poder alcanzar escalas espaciales y temporales varios órdenes de magnitud mayores que las involucradas en los procesos de erosión o difusión superficial. Como se ha mencionado en el capítulo anterior, debido a que los métodos numéricos basados en aproximación de colisiones binarias (BCA) o dinámica molecular (MD) nece-

sitan un elevado número de cálculos, estos se limitan a escalas temporales mucho menores que las involucradas en la evolución de la superficie. Para resolver este problema se utilizan métodos de Monte Carlo en los que se simula la evolución de la superficie utilizando versiones discretas de los procesos atómicos involucrados en la erosión, pero donde se pierden los detalles de las interacciones entre las partículas constituyentes. Se ha comprobado la validez de estos métodos para reproducir diversos resultados experimentales, y han suministrado importantes ideas acerca de los mecanismos que participan en la formación y evolución de la morfología superficial. En esta sección, discutiremos brevemente las aportaciones de algunos trabajos en esta materia.

En el trabajo de Cuerno *et al.* (1995) se propone un modelo estocástico de crecimiento discreto que incorpora la dependencia de la tasa de erosión con la pendiente y con la curvatura local (de forma que se erosionan más rápidamente los valles que las crestas) y un mecanismo de difusión superficial que tiende a aplanar el perfil de la superficie. Se encuentra una etapa inicial en la cual se forma un patrón periódico de estrías, seguida de una etapa rugosa caracterizada por la clase de universalidad correspondiente a la versión estocástica de la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky (KS).

En los trabajos de Koponen *et al.* se estudia el efecto del bombardeo con iones de  $\text{Ar}^+$  sobre una superficie de carbono amorfo [Koponen, Hautala y Sievänen 1996; Koponen, Hautala y Sievänen 1997b]; se propone un mecanismo erosivo basado en BCA y un mecanismo de relajación que minimiza la configuración energética de la superficie, basado en una serie de saltos de los átomos difusivos los cuales quedan fijados a aquellos vecinos que maximizan el número de enlaces y que se encuentran a una cierta distancia (la cual varía según el caso considerado). En todos estos trabajos se observan morfologías autoafines que presentan rugosidad cinética cuyos exponentes de rugosidad,  $\alpha$ , dependen de la energía de los iones y del ángulo de bombardeo. En Koponen, Hautala y Sievänen (1997a), Koponen, Hautala y Sievänen (1997c) y Koponen *et al.* (1997) se observa también la formación de estrías en determinadas condiciones experimentales. En Koponen, Hautala y Sievänen (1997c), por ejemplo, se observa la formación de patrones cuando el mecanismo de relajación superficial es poco relevante, e incluso cuando es eliminado (se observa que la longitud de onda es mayor cuanto mayor es la difusión superficial). Se reproducen también otras de las características observadas en los experimentos como, por ejemplo, el crecimiento de la longitud de onda de los patrones cuando aumenta la energía, el cambio en la orientación de las estrías respecto al ángulo de bombardeo o el movimiento de las ondulaciones. En Koponen *et al.* (1997) se estudia el caso de un blanco sometido a bombardeo y rotación simultánea cuando se suprime la existencia de un mecanismo de relajación difusivo para dos casos de incidencia oblicua:  $\theta = 30^\circ$  y  $60^\circ$ . Se encuentra una estructura celular donde el tamaño de las celdas aumenta linealmente con la fluencia, tal y como se muestra en la figura 3.1, hasta alcanzar un valor constante.

El mecanismo difusivo considerado en el resto de los artículos [Stepanova y Dew 2004; Yewande, Kree y Hartmann 2005; Yewande, Hartmann y Kree 2006;



**Figura 3.1** — Topografías obtenidas mediante simulaciones por ordenador de una superficie de carbono amorfo bombardeada con iones de  $C^+$  a 5 keV y  $\theta = 30^\circ$  sometida a rotación simultánea para diferentes fluencias: (a)  $0.7 \times 10^{17}$  iones  $cm^{-2}$ ; (b)  $1.2 \times 10^{17}$  iones  $cm^{-2}$ ; (c)  $1.8 \times 10^{17}$  iones  $cm^{-2}$ . Las escalas verticales y horizontales de todas las figuras coinciden con la mostrada en el pie de (c). Tomada de Koponen *et al.* (1997).

Chason, Chan y Bharathi 2006] es similar a los anteriores, pero se utiliza un modelo erosivo basado en la teoría de Sigmund (ésta se estudiara en la siguiente sección) en la que la probabilidad de que un átomo se erosione es proporcional a la cantidad de energía depositada en sus cercanías, la cual se distribuye según una determinada función. En el primero de ellos [Stepanova y Dew 2004] se simula la evolución de la morfología de una superficie de cobre bombardeada con iones de  $Ar^+$  a 1keV y se muestra que la altura de las estrías puede crecer gradualmente o saturar en el transcurso del tiempo si la movilidad de los átomos sobre la superficie es baja o alta, respectivamente. En los trabajos de Yewande, Kree y Hartmann (2005) y Yewande, Hartmann y Kree (2006) se estudian algunas características particulares del proceso erosivo. En el primero, se analiza el movimiento de las estrías y se observa que, dependiendo de la temperatura del sustrato, pueden encontrarse dos regímenes de comportamiento en los cuales las estrías se mueven en dirección opuesta a la proyección del haz. En el caso de bajas temperaturas,  $T = 968$  K, la longitud de onda aumenta siguiendo una ley de potencias ( $l \sim t^{0.32}$ ) antes de

saturar, mientras que el movimiento de las estrías se desacelera hasta permanecer en reposo según  $v \sim t^{-0.70}$ . Para altas temperaturas,  $T = 1935$  K, el patrón crece ilimitadamente en el transcurso del tiempo y se mueve con velocidad uniforme durante algún tiempo, después del cual se para completamente. En el trabajo posterior de estos autores [Yewande, Hartmann y Kree 2006] se extiende el modelo anterior introduciendo la posibilidad de que los átomos se erosionen lateralmente, es decir, no sólo aquellas partículas que se encuentran en la cima de una columna pueden ser erosionadas, sino también aquellas que no tengan vecinos en alguno de sus lados. Dependiendo de los parámetros que gobiernan el depósito de energía en el sustrato (en la siguiente sección se abordará en detalle este concepto), se encuentran diferentes morfologías: superficies rugosas, formación y crecimiento de fosos, estrías largas o entrecortadas perpendiculares a la proyección del haz, y otras estructuras sin una orientación bien definida. En el estudio, más reciente, de Chason, Chan y Bharathi (2006) se analiza la dependencia de la velocidad de las estrías y su tamaño con diversos parámetros experimentales como el flujo y la temperatura. Al igual que ocurría en Yewande, Kree y Hartmann (2005), se encuentra que las estrías se mueven en sentido opuesto al de los iones incidentes con una velocidad que depende de la longitud de onda del patrón.

A pesar de que, como vemos, los modelos discretos predicen correctamente muchas de las observaciones experimentales mostradas en el capítulo anterior y que permiten abordar el problema de la erosión sin las aproximaciones matemáticas utilizadas en el caso de las teorías continuas que mostraremos a continuación, su carácter discreto y, sobre todo, la imposibilidad de alcanzar tiempos de simulación suficientemente largos debido a que los tiempos típicos en los que ocurre la difusión que son muy cortos, limitan su aplicabilidad. Para corregir esta última deficiencia suele considerarse que la frecuencia de los eventos difusivos y erosivos, a pesar de la diferencia de escalas temporales entre ambos mecanismos (ver sección 2.3), es del mismo orden (para ello se suele suponer que el flujo de iones incidente es mucho mayor que en los experimentos). Esto permite estudiar la evolución de la morfología en el rango de los segundos. Otra de las limitaciones de estos modelos es el tamaño de los sistemas sometidos a estudio. Por ejemplo, si se considera que el espaciado de red es de  $5 \text{ \AA}$  (el tamaño aproximado de un átomo de Si) harían falta sistemas de  $2000 \times 2000$  nodos para simular superficies de  $1 \mu\text{m}^2$ . Ninguno de los grupos aquí mencionados ha simulado sistemas de este tamaño.<sup>1</sup> Una forma de solucionar estos inconvenientes es considerar sistemas continuos en los que podemos utilizar aproximaciones y herramientas matemáticas que nos facilitarán la descripción del proceso erosivo, tal y como se verá en las siguientes secciones.

---

<sup>1</sup>Como máximo se han conseguido simular sistemas del orden de  $10^5$  nodos [Chason, Chan y Bharathi 2006].

## 3.2. Teoría de Sigmund

Las ideas básicas del proceso de erosión planteadas por Sigmund [Sigmund 1969; Sigmund 1973] ya fueron adelantadas en la sección 2.2, pero volveremos aquí sobre ellas por ser fundamentales para el desarrollo de las teorías continuas. Una de las principales magnitudes descritas en estas teorías es la tasa o rendimiento de erosión (“sputtering yield” en inglés),  $S$ .

Como se mencionó en la sección 2.3, cuando se produce la cascada de colisiones que sigue al impacto del ion, muchos de los átomos se desplazan de sus posiciones de equilibrio. Algunos de estos átomos, aquellos cuya cantidad de energía y momento sean suficientes para ser arrancados de las capas superficiales del sustrato y no se redepositen, serán erosionados. Para obtener una estimación del número de átomos erosionados por ion incidente, Sigmund estudió mediante teoría cinética cómo se transfiere la energía del ion en el sólido durante el proceso de bombardeo.

Para materiales amorfos se supone que la cascada de colisiones es aleatoria y se usa un promedio estadístico para obtener la distribución de energía depositada por los iones. Esta función para un medio infinito<sup>2</sup> toma la forma de una gaussiana la cual, como se ha demostrado en posteriores trabajos tanto experimentales como *in silico*<sup>3</sup>, resulta ser una descripción adecuada para gran variedad de materiales que no presentan una estructura cristalina o que se amorfizan durante el proceso de bombardeo. Concretamente, la energía depositada por unidad de volumen en un punto  $O$  debida al impacto de un ion con energía cinética  $E$  en un punto  $r' = (x', y', z')$  de la superficie viene dada por

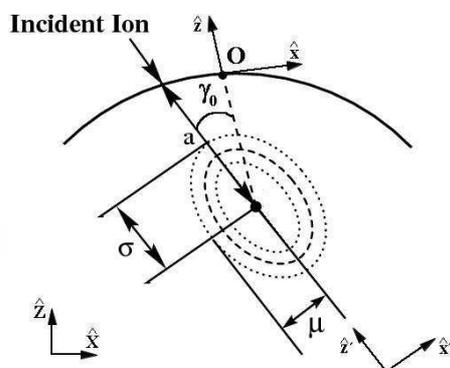
$$\varepsilon_s(r') = EN_s e^{-\frac{x'^2+y'^2}{2\mu^2}} e^{-\frac{(z'+a)^2}{2\sigma^2}}, \quad (3.1)$$

siendo  $N_s$  la constante de normalización de valor  $N_s = [(2\pi)^{3/2}\sigma\mu^2]^{-1}$ . El origen del sistema de coordenadas  $(x', y', z')$  lo hemos situado en  $O$  y hemos definido  $\hat{z}'$  en la dirección del haz incidente (ver figura 3.2) con el fin de simplificar los cálculos que vendrán a continuación. El plano  $x'y'$  se define perpendicular a  $\hat{z}'$ . La anchura longitudinal de la distribución viene dada por  $\sigma$ , mientras que las anchuras transversales se representan por  $\mu$ . Esto significa que la energía se distribuye de forma isótropa en el plano  $x'y'$ . Debido a la cantidad de momento inicial del ion, el punto donde el depósito de energía es máximo se encuentra a una distancia  $a$  de la superficie en la dirección  $-\hat{z}'$  del impacto. Aunque  $a$  depende de

<sup>2</sup>Esta suposición es necesaria pues de otra forma la interrupción del medio afectaría a las cascadas y el depósito de energía dependería de la morfología. Como se verá más adelante la longitud media de penetración del ion,  $a$ , es pequeña en comparación con las alteraciones morfológicas del sustrato y esta aproximación es robusta.

<sup>3</sup>*In silico* es una expresión usada recientemente para describir trabajos o “experimentos” llevados a cabo usando simulaciones por ordenador. La primera vez que se utilizó esta expresión en público fue en 1989 en la reunión “Cellular Automata: Theory and Applications” en Los Alamos, New Mexico, por el matemático Pedro Miramontes, perteneciente a la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) en su presentación del trabajo DNA and RNA Physicochemical Constraints, Cellular Automata and Molecular Evolution.

los detalles microscópicos de la interacción entre iones y el sustrato, para regímenes intermedios de energías (10-100 keV), se considera proporcional a  $E$ . Para este rango de energías las anchuras de la distribución,  $\sigma$  y  $\mu$ , y el rango de penetración,  $a$ , son del mismo orden, en concreto de unos pocos nanómetros<sup>4</sup>. Las desviaciones de esta distribución gaussiana ocurren principalmente cuando la masa del proyectil es mayor que la del sustrato o cuando se producen efectos debidos a la estructura cristalina del blanco como el caso del “channeling” descrito en la sección 2.2. Estos efectos provocan que no sean asumible la aproximación de cascadas aleatorias y la distribución (3.1) no es apropiada para describir el proceso. Como se verá en la sección 3.4, es posible obtener esta distribución a partir de simulaciones por ordenador; de esta forma, se podrá describir de una manera más apropiada el proceso de erosión en sustratos cristalinos, como es el caso de los metales.



**Figura 3.2** — Contorno bidimensional de la distribución de energía depositada debida al impacto de un ion de acuerdo a la teoría de Sigmund. Las anchuras transversal y longitudinal de la gaussiana son  $\sigma$  y  $\mu$ , respectivamente. Se presenta también un esquema de los ejes de coordenadas considerados en el texto. Adaptada de Makeev, Cuerno y Barabási (2002).

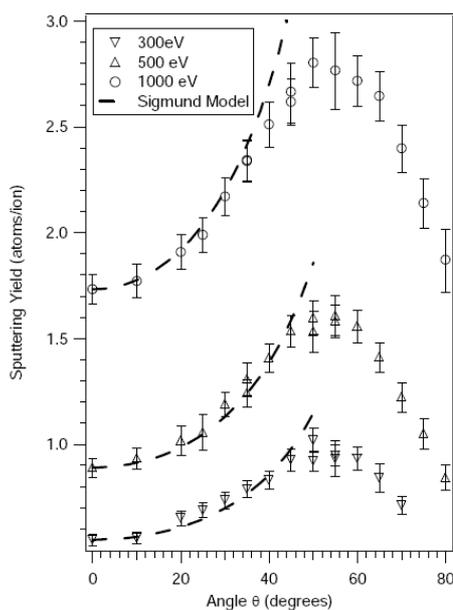
En general, hasta el estudio de Sigmund (1973) la mayoría de las teorías sobre erosión suponían que el rendimiento de erosión era independiente de la geometría local de la superficie y despreciaban las posibles inhomogeneidades que ésta pudiera presentar. Se consideraba una superficie plana y se suponía que las posibles alteraciones en la morfología eran mucho mayores que el rango de penetración de los iones. De hecho, el propio Sigmund en [Sigmund 1969] bajo las hipótesis anteriores y para una relación moderada entre las masas de los iones,  $M_1$ , y las de los átomos del blanco,  $M_2$  (concretamente para  $M_1/M_2 \leq 3$ ), obtiene la siguiente relación entre el rendimiento y el ángulo de incidencia

$$\frac{S(\theta)}{S(0)} = (\cos \theta)^{-f}, \quad (3.2)$$

con  $f = 5/3$ , donde  $S(0)$  representa la tasa de erosión para incidencia normal. Según esta expresión, el rendimiento aumenta monótonamente cuando el ángulo

<sup>4</sup>Un ejercicio instructivo es estudiar cómo varían estos parámetros dependiendo con las condiciones experimentales. Para ello puede utilizarse el popular código SRIM [Ziegler, Biersack y Littmark 1985] disponible en la siguiente dirección electrónica: <http://www.srim.org>

de bombardeo se aleja de la normal. Este resultado analítico predice de forma apropiada el comportamiento de  $S$  en multitud de experimentos para ángulos pequeños. Esto se debe a que cuando el ángulo de incidencia,  $\theta$ , aumenta (es decir, se hace más rasante) se deposita una cantidad mayor de energía en la superficie como consecuencia de que los iones pasan más tiempo cerca de ésta y, por tanto, el número de átomos eyectados es mayor (veremos en la sección siguiente cómo un análisis más detallado, donde se tiene en cuenta la geometría local, permitirá corregir este resultado). En cualquier caso, esta predicción sólo es válida para ángulos cercanos a incidencia normal dado que se observa experimentalmente que a partir de cierto ángulo el número de átomos erosionados decrece. Concretamente, por encima de  $\theta = 45^\circ$  los efectos superficiales se hacen más importantes y para  $\theta$  entre  $50^\circ$  y  $80^\circ$  el rendimiento se hace máximo, decreciendo rápidamente para ángulos mayores (ver figura 3.3). Este efecto se ha justificado clásicamente como consecuencia del aumento de la reflexión de los iones por la superficie para ángulos cercanos a incidencia rasante [Witcomb 1974] y de la anisotropía de las cascadas de colisiones en esta región [Behrisch 1981].



**Figura 3.3** — Rendimiento de erosión obtenido al bombardear molibdeno con iones de Xe en función del ángulo de incidencia  $\theta$  para energías de 0.3, 0.5 y 1 keV. La línea discontinua representa la predicción del rendimiento dada por (3.2). Se observa un máximo en el rendimiento para ángulos ligeramente superiores a  $50^\circ$ . Tomada de Kolasinski (2005).

En Sigmund (1973) se pone de manifiesto que la topografía de la superficie puede influir en la magnitud de la tasa de erosión. Se realiza una descripción analítica que describe el incremento del rendimiento para geometrías diferentes a la morfología plana. Se propone que *la velocidad de erosión en un punto O de la superficie es proporcional a la cantidad de energía depositada allí por los iones a través de una constante que caracteriza al material y que se denomina  $\Lambda$* . Esta magnitud depende de la densidad atómica del blanco  $n_v$ , de la energía atómica de enlace en la superficie,  $U_0$  y de una constante  $C_0$  proporcional al cuadrado del

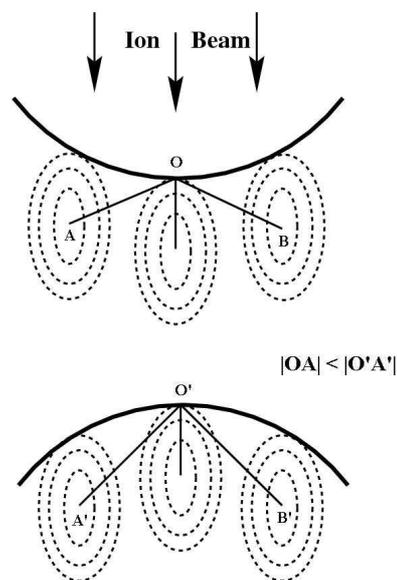
radio efectivo del potencial de interacción efectivo según

$$\Lambda = \frac{3}{4\pi^2 n_v U_0 C_0}. \quad (3.3)$$

Bajo estas hipótesis, es posible obtener una expresión matemática para la cantidad de volumen por unidad de tiempo que se erosiona en  $O$ , a saber,

$$V_O = \Lambda \int_{\mathcal{R}} \Phi(r') \varepsilon_s(r') d\mathcal{R}, \quad (3.4)$$

donde la integral se extiende a la región  $\mathcal{R}$  donde impactan los iones depositando energía en  $O$ . El término  $\Phi(r')$  representa el número de iones por unidad de área y unidad de tiempo que llegan a la superficie.<sup>5</sup> Hemos explicitado la dependencia de  $\Phi$  con  $r'$  para poner de manifiesto que existe una corrección debida a la geometría local (de pendientes locales en primera aproximación) a un posible flujo homogéneo que en adelante denominaremos  $\Phi_0$ . A partir de la expresión (3.4), Sigmund obtuvo la tasa de erosión para diversas geometrías artificiales como una superficie plana seguida de un plano inclinado o un vértice en el caso de incidencia normal [Sigmund 1973].



**Figura 3.4** — Esquema del depósito de energía para dos perfiles diferentes. La energía depositada en  $O$  es mayor que la depositada en  $O'$ . Esto provoca que la erosión en los valles sea mayor que en las crestas, lo que produce una inestabilidad morfológica en el sistema. Adaptada de Makeev, Cuerno y Barabási (2002).

La anterior descripción, como fue observado por Sigmund, ya implica la aparición de una inestabilidad morfológica. Supongamos que bombardeamos con un

<sup>5</sup>En el trabajo original de Sigmund se considera la fluencia total en vez del flujo. Allí se calcula el número total de átomos erosionados en vez de la velocidad de erosión de un punto arbitrario como se hace aquí.

flujo homogéneo una determinada superficie como se muestra en la figura 3.4. Podemos comprobar que las distancias  $\overline{OA}$  y  $\overline{OB}$  son menores que  $\overline{O'A'}$  y  $\overline{O'B'}$  debido a la geometría de la intercara. Esto implica que para una misma función de distribución los impactos sobre  $A$  y  $B$  depositan mayor energía en  $O$  que los impactos sobre  $A'$  y  $B'$  en  $O'$ . Como la tasa de erosión es proporcional a la energía depositada, se tiene que  $O$  se erosionará más rápidamente que  $O'$ . Esto provoca que el valle se excave más rápidamente que la cresta, lo cual conduce a una inestabilidad en el sistema. El mismo Sigmund sugiere que debe existir un proceso alternativo que aplane la superficie y propone la migración atómica como mecanismo para corregir esta inestabilidad.

Las teorías de Sigmund supuso la base para el posterior trabajo de Bradley y Harper [Bradley y Harper 1988] que se presentará en la siguiente sección. A pesar de que muchas de sus predicciones y las ideas generales siguen manteniéndose vigentes hoy día, también presenta algunas limitaciones adicionales a las expuestas en el transcurso de esta sección y que se comentan a continuación: no predice la alteración de la morfología durante el proceso de bombardeo para escalas mucho mayores que el rango de penetración de los iones; al despreciarse los efectos de difusión superficial, el tamaño de las posibles estructuras debería ser del orden de las distancias propuestas en la distribución de energía (3.1); desprecia los posibles efectos de sombreado o redeposición; no predice la evolución temporal de la morfología y cómo afectaría ésta a la tasa de erosión.

### 3.3. Teoría de Bradley y Harper

Mientras que la ecuación (3.4) proporciona una estimación para la velocidad de erosión normal en el punto  $O$ , no suministra información sobre la evolución dinámica de la superficie y cómo ésta se ve alterada por su morfología. En el trabajo de Bradley y Harper (1988) (BH), se deriva una ecuación lineal en derivadas parciales para describir la evolución de la morfología cuando se supone que la variación en la altura de la superficie es suave en comparación con la distancia de penetración de los iones.<sup>6</sup> Bradley y Harper se basan en la expresión (3.4) y desarrollan la altura en función de las curvaturas principales, quedándose hasta cierto orden en el desarrollo para obtener una ecuación de evolución cerrada para la altura de la superficie.

A continuación reproduciremos estos resultados con una descripción algo diferente a la utilizada en el trabajo original. En Bradley y Harper (1988) se aborda en primer lugar el problema unidimensional para presentar a continuación el resultado bidimensional. Aquí mostraremos el desarrollo directamente en dos dimensiones al considerar que no complica en demasía la exposición.

---

<sup>6</sup>Esta hipótesis coincide con la mayoría de observaciones experimentales. Habíamos indicado en la sección anterior que  $a$  es del orden de unos pocos nanómetros para el rango de energías del keV, mientras que, como se vio en el capítulo anterior, las longitudes de onda de los patrones que se encuentran en los experimentos suelen ser de decenas o centenas de nanómetros.

### 3.3.1. Dependencia de la velocidad de erosión con las curvaturas principales

Emplearemos un sistema de coordenadas locales (ver figura 3.2) con el eje  $\hat{z}$  orientado a lo largo de la normal en  $O$  y los ejes  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$  pertenecientes al plano perpendicular a  $\hat{z}$  (es decir, al plano tangente a la superficie en  $O$ ). Definimos  $\hat{x}$  como la dirección de proyección del haz incidente sobre este plano, e  $\hat{y}$  perpendicular a  $\hat{x}$ . Aún no se han definido las direcciones  $\hat{x}'$  e  $\hat{y}'$  y sólo se ha mencionado que ambas pertenecen al plano perpendicular a  $\hat{z}'$ . Definiremos  $\hat{y}'$  paralela a  $\hat{y}$ , de forma que ambas se orientan hacia el interior del papel en la figura 3.2. La relación entre el sistema de coordenadas local,  $(x, y, z)$ , y el sistema de coordenadas solidario con la dirección de los iones incidentes,  $(x', y', z')$ , viene dada por la siguiente matriz de rotación

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \gamma_0 & 0 & \sin \gamma_0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \gamma_0 & 0 & \cos \gamma_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

donde  $\gamma_0$  es el ángulo formado entre la dirección de bombardeo y la normal local en  $O$ .<sup>7</sup>

Si se supone que la función que representa la altura de la superficie es monovaluada y varía suavemente, podemos aproximar la altura en las cercanías de un punto arbitrario en función de los radios de curvatura principales según<sup>8</sup>

$$z(x, y) = -\frac{1}{2} \left( \frac{x^2}{R_x} + \frac{y^2}{R_y} \right). \quad (3.6)$$

Al considerar esta expresión se hacen dos suposiciones. Primero, que  $a$  es pequeño en comparación con los radios de curvatura principales. Esto será suficiente para conocer cuánta energía se deposita en  $O$ , pues, debido que la energía depositada decae más deprisa que la distancia al cuadrado (exponencial), sólo aquellos iones que impacten a una distancia menor que  $a$  del punto  $O$  contribuyen apreciablemente a la erosión en ese punto. En segundo lugar, hemos considerado que las direcciones de curvatura principales (cuyos radios de curvatura son  $R_x$  y  $R_y$ , respectivamente) se alinean con los ejes  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$ . Esto es cierto, al menos para los casos donde las estructuras se alinean, o bien paralelas, o bien perpendiculares a la proyección del haz incidente (lo cual suele ser lo habitual, tal y como se ha observado en el capítulo anterior).<sup>9</sup>

Llegados a este punto, estamos en disposición de obtener la velocidad de erosión local en  $O$  utilizando la expresión (3.4). Integramos en el sistema local de

<sup>7</sup>En la figura 3.2, el punto  $O$  no coincide con con el máximo local donde la normal tiene la dirección  $\hat{Z}$

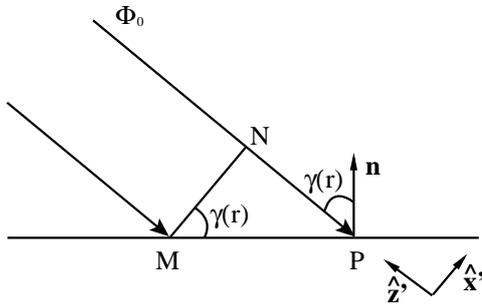
<sup>8</sup>El signo de los radios de curvatura se define tal que para una parábola de la forma  $h(x) = x^2$  el radio de curvatura es negativo.

<sup>9</sup>En caso contrario debemos redefinir los ejes  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$  de forma que se orienten en la direcciones de curvatura principales. Esto no alterará los resultados finales cuando se obtenga la ecuación final de evolución de la morfología.

coordenadas  $y$ , por tanto, debemos sustituir en la distribución de energía (3.1) los valores de  $x'$ ,  $y'$  y  $z'$  en función de  $x$ ,  $y$  y  $z$  según (3.5). Nos resta por conocer cuál es el valor del flujo en cualquier punto de la superficie. Si suponemos un flujo inicial homogéneo,  $\Phi_0$ , la corrección a ese flujo en un punto cualquiera de la superficie,  $r = (x, y, z)$ , es

$$\Phi(r) = \Phi_0 \cos \gamma(r), \quad (3.7)$$

donde  $\gamma(r)$  es el ángulo entre la dirección del haz y la normal a la superficie en el punto considerado (ver figura 3.5). En el caso de que dicho punto sea  $O$  (que



**Figura 3.5** — El flujo por unidad de longitud que llega a un punto situado sobre el segmento  $MN$  es constante y de valor  $\Phi_0$ . Como las distancias  $\overline{MN}$  y  $\overline{MP}$  están relacionadas según  $\overline{MN} = \overline{MP} \cos \gamma(r)$ , esto implica que el flujo por unidad de longitud que llega a un punto situado en el segmento  $MP$  será  $\Phi_0 \cos \gamma(r)$ . Este razonamiento se extiende de forma análoga al caso bidimensional discutido en el texto.

es donde estamos calculando la velocidad de erosión),  $\gamma(r)$  coincide con  $\gamma_0$ . Para obtener el valor de  $\cos \gamma(r)$  en el sistema de coordenadas local solidario con  $O$  tendremos en cuenta que

$$\cos \gamma(r) = \frac{\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{z}}'}{|\mathbf{n}| |\hat{\mathbf{z}}'|}, \quad (3.8)$$

donde  $\mathbf{n}$  el vector normal a la superficie y  $\hat{\mathbf{z}}'$  es el vector unitario paralelo a la dirección del haz. El vector normal en un punto cualquiera de la superficie verifica  $\mathbf{n} = (-\partial_x z, -\partial_y z, 1)$ . El vector  $\hat{\mathbf{z}}'$  expresado en el sistema local toma la forma  $\hat{\mathbf{z}}' = (-\sin \gamma_0, 0, \cos \gamma_0)$ . Se tiene por tanto

$$\cos \gamma(r) = \frac{\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{z}}'}{|\mathbf{n}| |\hat{\mathbf{z}}'|} = \frac{\cos \gamma_0 + (\partial_x z) \sin \gamma_0}{\sqrt{1 + (\partial_x z)^2 + (\partial_y z)^2}}. \quad (3.9)$$

En este punto estamos en condiciones de obtener la velocidad de erosión en  $O$  en el sistema local de coordenadas. Retomamos la expresión para la velocidad de erosión de Sigmund (3.4) y expresamos la integral en función de  $x$  e  $y$  teniendo en cuenta que  $d\mathcal{R} = [1 + (\partial_x z)^2 + (\partial_y z)^2]^{1/2} dx dy$ . Extenderemos los límites de integración de  $-\infty$  a  $+\infty$  para facilitar los cálculos analíticos, aunque ciertamente a distancias muchos mayores que  $a$  la contribución de la energía en  $O$  es despreciable.

$$V_O = \Lambda \int_{\mathcal{R}} \Phi(r) \epsilon_s(r) d\mathcal{R} = \Lambda \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(r) \epsilon_s(r) \sqrt{1 + (\partial_x z)^2 + (\partial_y z)^2} dx dy, \quad (3.10)$$

con

$$\Phi(r) = \Phi_0 \frac{\cos \gamma_0 + (\partial_x z) \sin \gamma_0}{\sqrt{1 + (\partial_x z)^2 + (\partial_y z)^2}} \quad (3.11)$$

y

$$\begin{aligned} \varepsilon_s(r) = EN_s \exp \left( -\frac{(x \cos \gamma_0 - z \sin \gamma_0)^2 + y^2}{2\mu^2} \right) \\ \times \exp \left( -\frac{(-x \sin \gamma_0 + z \cos \gamma_0 + a)^2}{2\sigma^2} \right). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Sustituyendo  $z$  por su valor, dado en (3.6), y desarrollando la exponencial hasta primer orden en los radios de curvatura ( $1/R_{x,y} \ll a$ ) la expresión (3.12) se reduce a

$$\begin{aligned} \varepsilon_s(x, y) \simeq EN_s \exp \left( -\frac{x^2 \cos^2 \gamma_0 + y^2}{2\mu^2} \right) \exp \left( -\frac{a^2 + x^2 \sin^2 \gamma_0 - 2ax \sin \gamma_0}{2\sigma^2} \right) \\ \times \left\{ 1 - [(\sigma^{-1} + \mu^{-1}) x \cos(\gamma_0) \sin(\gamma_0) - a \cos(\gamma_0)] \left( \frac{x^2}{R_x} + \frac{y^2}{R_y} \right) + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Con esto la integral (3.10), escrita ya sólo en función de  $x$  e  $y$ , es

$$V_O = \Lambda \Phi_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \cos \gamma_0 - \frac{x}{R_x} \sin \gamma_0 \right) \varepsilon_s(x, y) dx dy. \quad (3.14)$$

Completando los cuadrados y haciendo el cambio de variable adecuado se obtiene una serie de integrales gaussianas. Integrando, podemos expresar la velocidad de erosión en función de los radios de curvatura principales y  $\gamma_0$ ,

$$V_O = S_0 \left[ \Gamma_0(\gamma_0) + \frac{\Gamma_x(\gamma_0)}{R_x} + \frac{\Gamma_y(\gamma_0)}{R_y} \right], \quad (3.15)$$

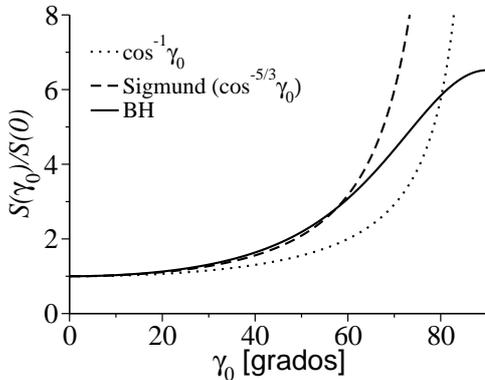
con [Bradley y Harper 1988]

$$\begin{aligned} S_0 &= \Lambda \Phi_0 EN_s 2\pi \mu^2 e^{-\frac{a^2}{2\sigma^2}}; \Gamma_0 = \frac{e^{\frac{A_s^2}{2B_s}}}{\mu B_s^{1/2}} \cos \gamma_0; \\ \Gamma_x &= \frac{e^{\frac{A_s^2}{2B_s}}}{\mu B_s^{7/2}} [B_s^2 b_s + B_s A_s (A_s b_s - a_s B_s) - A_s c_s (A_s^2 + 3B_s)]; \\ \Gamma_y &= \frac{\mu e^{\frac{A_s^2}{2B_s}}}{B_s^{3/2}} [B_s b_s - A_s c_s]; A_s = \frac{a}{\sigma^2} \sin \gamma_0; B_s = \frac{1}{\sigma^2} \sin^2 \gamma_0 + \frac{1}{\mu^2} \cos^2 \gamma_0; \\ a_s &= -\sin \gamma_0; b_s = -\frac{a}{2\sigma^2} \cos^2 \gamma_0; c_s = -\left( \frac{1}{2\sigma^2} - \frac{1}{2\mu^2} \right) \cos^2 \gamma_0 \sin \gamma_0. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Aunque a primera vista las funciones  $\Gamma_{x,y}$  de (3.15) parecen complicadas, sólo dependen del ángulo local de bombardeo  $\gamma_0$  y de las anchuras y profundidad de la distribución de energía (3.1). Mientras que el primer sumando en (3.15) implica una contribución constante independiente de la geometría de la superficie, la dependencia con las curvaturas principales de los dos restantes sumandos viene dada por  $\Gamma_x$  y  $\Gamma_y$ . La función  $\Gamma_0$  es siempre positiva,  $\Gamma_y$  es siempre negativa y el signo de  $\Gamma_x$  depende de  $\gamma_0$  (ver figuras 3.6 y 3.7).<sup>10</sup> El hecho de que  $\Gamma_x$  y  $\Gamma_y$  no sean iguales se debe a que la dirección del haz incidente rompe la simetría entre las direcciones  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$  del sustrato. Si  $\gamma_0 = 0$ , se restaura dicha simetría y efectivamente se tiene  $\Gamma_x(\gamma_0 = 0) = \Gamma_y(\gamma_0 = 0)$ . Más abajo se estudiarán las consecuencias del signo de estas funciones en la evolución de la morfología, pero primero, con el fin de entender mejor estos resultados, consideraremos el límite de una superficie plana ( $R_{x,y} = \infty$ ). La tasa de erosión  $S$  se ha definido como el número de átomos erosionados por ion incidente. El número de átomos erosionados en esta superficie es  $V_0 n_v$ , donde  $n_v$  es el número de átomos por unidad de volumen en el sólido. El flujo de iones incidente depende del ángulo de bombardeo según (3.7).<sup>11</sup> Con esto, el rendimiento de erosión para una superficie plana será

$$S(\gamma_0) = \frac{n_v V_0(\gamma_0, R_{x,y} \rightarrow \infty)}{\Phi_0 \cos \gamma_0} = \frac{n_v S_0 e^{\frac{A_s^2}{4B_s}}}{\Phi_0 \mu B_s^{1/2}}, \quad (3.17)$$

de forma que se ha definido  $S_0$  proporcional al rendimiento de erosión a incidencia normal; en concreto,  $S(\gamma_0 = 0) = n_v S_0 / \Phi_0$ .



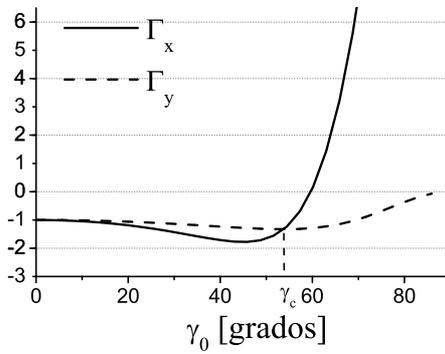
**Figura 3.6** — Comparativa del rendimiento de erosión normalizado  $S(\gamma_0)/S(0)$  en función del ángulo de incidencia  $\gamma_0$  para: la corrección geométrica al flujo para una superficie plana inclinada un ángulo  $\gamma_0$  respecto a la dirección del haz incidente, Ec. (3.7) (línea punteada); teoría de Sigmund, Ec. (3.2) (línea rayada); modelo de Bradley-Harper, Eq. (3.17) con  $a = 3.8$  nm,  $\sigma = 2.2$  nm y  $\mu = 1.5$  nm (línea continua).

Para ángulos pequeños el crecimiento del rendimiento en este modelo es similar al obtenido por Sigmund y algo mayor del que se derivaría de una simple

<sup>10</sup>Para representar las figuras 3.6 y 3.7 se ha considerado  $a = 3.8$  nm,  $\sigma = 2.2$  nm y  $\mu = 1.5$  nm, pero la forma de estas funciones no cambia cualitativamente cuando se modifican estos parámetros dentro del rango de energías considerado.

<sup>11</sup>Se debe notar que en el caso de una superficie plana el ángulo local  $\gamma_0$  coincide con el ángulo de incidencia de laboratorio  $\theta$  para toda la superficie.

proyección geométrica. Sin embargo, como se muestra en la figura 3.6, el crecimiento para ángulos grandes es más suave, lo cual está más de acuerdo con los experimentos. Esta teoría presenta el inconveniente, como también ocurría en el trabajo de Sigmund, de que, en contraposición con los resultados experimentales, la función obtenida para el rendimiento de erosión es una función creciente de  $\gamma_0$  entre  $0^\circ$  y  $90^\circ$  y, por tanto, la mayor eficacia de erosión se produce a incidencia rasante. Esto es consecuencia de que, debido a la forma de la distribución, a incidencia rasante el punto donde se deposita mayor energía se encuentra directamente sobre la superficie, en concreto a una distancia  $(-a)$  del punto de impacto del ion en la superficie en la dirección  $\hat{z}'$  en el sistema de coordenadas solidario al haz.



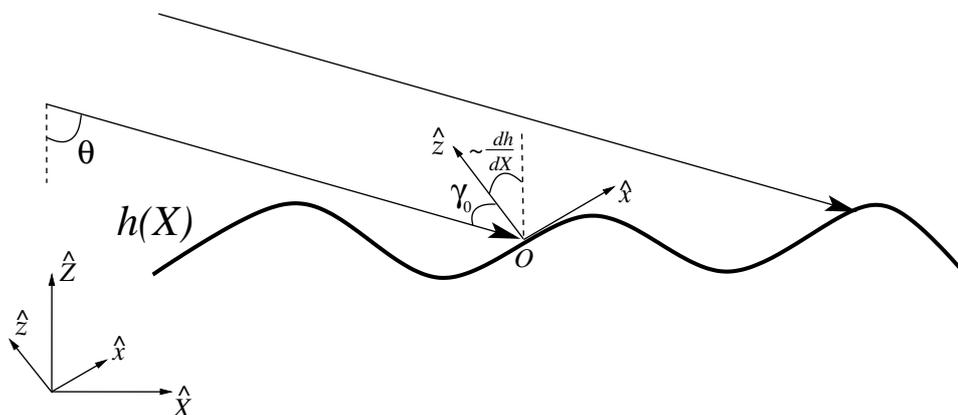
**Figura 3.7** — Funciones  $\Gamma_x$  y  $\Gamma_y$  normalizadas por  $\Gamma_x(\gamma_0 = 0) = \Gamma_y(\gamma_0 = 0)$  en función del ángulo de incidencia  $\gamma_0$  dadas por (3.15) a partir de la distribución (3.1) con  $a = 3.8$  nm,  $\sigma = 2.2$  nm y  $\mu = 1.5$  nm.  $\gamma_c$  indica el ángulo umbral a partir del cual  $\Gamma_x > \Gamma_y$ .

A partir de la ecuación (3.15) se pueden obtener algunas predicciones sobre la morfología de la superficie. Tal y como se observa en la figura 3.7,  $\Gamma_x(\gamma_0)$  y  $\Gamma_y(\gamma_0)$  son negativas para ángulos pequeños. En ese caso, si nos encontramos en el fondo de un valle las curvaturas locales principales son negativas ( $R_{x,y} < 0$ ) y por tanto  $\Gamma_x/R_x > 0$  y  $\Gamma_y/R_y > 0$ , lo cual implica que la velocidad de erosión [Ec. (3.15)] será suma de tres sumandos positivos. Si nos encontramos en una cima los radios de curvatura son positivos y  $\Gamma_x/R_x < 0$  y  $\Gamma_y/R_y < 0$ ; por tanto, la velocidad de erosión será más pequeña que en el caso anterior. El hecho de que se erosionen más rápidamente los valles que las crestas es la expresión matemática de la inestabilidad morfológica descrita por Sigmund. Además, como para ángulos pequeños se tiene que  $\Gamma_x < \Gamma_y$  (ver figura 3.7), la inestabilidad dominante estará orientada en la dirección del eje  $\hat{x}$ . Si  $\gamma_0$  es mayor que cierto ángulo umbral  $\gamma_c$ , entonces  $\Gamma_x$  es mayor que  $\Gamma_y$ , al punto de que para ángulos cercanos a incidencia rasante,  $\Gamma_x$  es positiva y, por lo tanto, se elimina completamente la inestabilidad morfológica a lo largo de  $\hat{x}$ . Esto implica que partir de dicho ángulo crítico  $\gamma_c$  la inestabilidad morfológica sólo se produce a lo largo de la dirección  $\hat{y}$  y las estrías se orientan paralelas a este eje. Esto provoca el giro de las estrías cuando se aumenta el ángulo de incidencia, tal y cómo se mostró en la figura 2.1, como consecuencia de que el número de iones que llega a las crestas es mayor del que lo hace a los valles, lo cual provoca que las depresiones se erosionen más lentamente. Matemáticamente,

este hecho es una consecuencia de la corrección al flujo dada por (3.7).

### 3.3.2. Dinámica de la morfología superficial

Una vez obtenida la dependencia de la velocidad de erosión con la morfología local, estamos en disposición de obtener una ecuación continua en derivadas parciales para la altura local de la superficie,  $h$ , en el sistema de referencia de laboratorio, de ejes  $\hat{X}$ ,  $\hat{Y}$  y  $\hat{Z}$ , y coordenadas  $(X, Y, Z)$ . Definiremos este sistema de la siguiente forma: la tercera componente  $\hat{Z}$  es perpendicular a la superficie inicial;<sup>12</sup> la proyección del haz de iones sobre el plano del sustrato en el sistema de laboratorio define el eje  $\hat{X}$ , mientras que la dirección  $\hat{Y}$  está contenida en dicho plano y es perpendicular a  $\hat{X}$ ; el ángulo que forma el haz de iones con la perpendicular a la superficie (eje  $\hat{Z}$ ) lo hemos representado con el símbolo  $\theta$ ; la altura local en un punto arbitrario  $(X, Y)$  del sustrato viene dada por  $Z = h(X, Y)$  (ver figura 3.8).



**Figura 3.8** — Esquema de los ejes de coordenadas utilizados en el texto. Por simplicidad hemos considerado un perfil unidimensional  $Z = h(X)$ , independiente de  $Y$ .

A partir de la suposición de que  $h$  varía lentamente, en el trabajo de Bradley y Harper se obtiene la siguiente relación entre el ángulo de incidencia en el sistema de laboratorio,  $\theta$ , y el ángulo local en  $O$ ,  $\gamma_0$ , definido anteriormente:  $\theta = \gamma_0 + \partial_X h$ . A partir de esta relación, desarrollan la expresión de la velocidad de erosión [Ec. (3.15)] en las cercanías de  $\theta$  según

$$V_O(\gamma_0) \simeq V_O(\theta) - \left. \frac{\partial V_O(\gamma_0)}{\partial \gamma_0} \right|_{\gamma_0=\theta} \frac{\partial h}{\partial X} + \dots \quad (3.18)$$

Despreciando los términos no lineales,<sup>13</sup> y teniendo en cuenta que los radios de

<sup>12</sup>Obsérvese que al definir esta dirección perpendicular al sustrato en el sistema de laboratorio no estamos teniendo en cuenta la variación de la geometría local, es decir, estamos definiendo la dirección  $\hat{Z}$  como la normal a la superficie desde un punto de vista macroscópico.

<sup>13</sup>Como hemos supuesto que  $h$  varía lentamente, los términos de orden cuadrático en  $h$  como, por ejemplo,  $(\partial_X h)^2$  o superiores, serán despreciados.

curvatura principales verifican  $R_x^{-1} = -\partial_X^2 h$  y  $R_y^{-1} = -\partial_Y^2 h$ , podemos identificar la variación temporal de la altura de la superficie con la velocidad de erosión en un punto arbitrario  $O$  (teniendo en cuenta que deben tener signos opuestos). Se obtiene<sup>14</sup>

$$\frac{\partial h}{\partial t} = S_0 \left[ -\Gamma_0(\theta) + \frac{\partial \Gamma_0(\theta)}{\partial \theta} \frac{\partial h}{\partial X} + \Gamma_x(\theta) \frac{\partial^2 h}{\partial X^2} + \Gamma_y(\theta) \frac{\partial^2 h}{\partial Y^2} \right], \quad (3.19)$$

donde las funciones  $\Gamma$  son las definidas en (3.15), pero ahora evaluadas en  $\theta$ .

La ecuación en derivadas parciales (3.19) ha sido obtenida en aproximación lineal y es de origen puramente erosivo. Antes de considerar la difusión superficial, estudiaremos la relación de dispersión lineal de (3.19). Si suponemos una perturbación periódica de frecuencias  $k_X$  y  $k_Y$  y amplitud  $A$  en el instante  $t$  de la de la forma

$$h(X, Y, t) = A e^{i(k_X X + k_Y Y)} e^{\omega t}, \quad (3.20)$$

y la sustituimos en (3.19), obtenemos cómo evoluciona dicha perturbación en el transcurso del tiempo. La parte real de la relación de dispersión  $\omega$  es

$$\mathcal{R}e(\omega) = S_0(-\Gamma_x k_X^2 - \Gamma_y k_Y^2) \quad (3.21)$$

y la parte imaginaria

$$\mathcal{I}m(\omega) = S_0 \frac{\partial \Gamma_0}{\partial \theta} k_X. \quad (3.22)$$

Como habíamos indicado, la función  $\Gamma_0$  es siempre positiva y, por tanto, la altura de la superficie decrece a velocidad constante  $S_0 \Gamma_0$ . A partir de (3.21) podemos observar que si  $\Gamma_x$  y  $\Gamma_y$  son negativos (como ocurre a ángulos pequeños) la amplitud de la perturbación crece de forma exponencial como consecuencia de la inestabilidad morfológica, creciendo más rápidamente a lo largo de la dirección  $\hat{X}$  si  $\Gamma_x < \Gamma_y$  o del eje  $\hat{Y}$  si  $\Gamma_y < \Gamma_x$ . Si hubiésemos despreciado la dependencia de la velocidad de erosión con la morfología, como hizo Sigmund, se tendría que  $\Gamma_x = \Gamma_y = 0$  y, por tanto, las pequeñas perturbaciones iniciales de la superficie no se verían afectadas. Por otro lado, la parte imaginaria de la relación de dispersión nos indica la magnitud y dirección de la velocidad de desplazamiento de las perturbaciones (éstas se mueven en la dirección  $\hat{X}$  en sentido opuesto al signo de  $S_0 \partial_\theta \Gamma_0$ ).

Estos resultados predicen de forma correcta muchas de las observaciones experimentales presentadas en el capítulo anterior, como la dependencia de la orientación de las estrías con el ángulo de incidencia y el movimiento de éstas. Sin embargo, sin un mecanismo adicional que estabilice el sistema, las perturbaciones aumentarían sin límite de forma exponencial. Esto hace que matemáticamente

<sup>14</sup>En general, para obtener la relación entre la velocidad de erosión  $V_O$ , la cual se ha definido normal a la superficie en  $O$ , y la variación en altura a lo largo del eje normal a la superficie en el sistema de laboratorio  $\hat{Z}$ , debemos proyectar esta última sobre la primera según  $\partial h / \partial t = -V_O \sqrt{1 + (\partial_X h)^2 + (\partial_Y h)^2}$ , para quedarnos con  $\partial h / \partial t \simeq -V_O$  en primera aproximación.

la ecuación (3.19) esté mal planteada (en inglés suele utilizarse el término “ill-posed”). Por otro lado, se esperaría a partir de (3.19) que las longitudes de onda observadas en los experimentos fuesen del orden de las únicas distancias involucradas por ahora en nuestra descripción, es decir, del orden de la distancia de penetración de los iones  $a$ . Esto no ocurre, sino que la longitud de onda de las estrías suelen ser, al menos, dos órdenes de magnitud mayores. Para resolver este problema, Bradley y Harper incorporan los efectos de la difusión superficial de origen térmico introduciendo un término en la expresión (3.19) análogo al obtenido en Mullins (1957) para superficies isótropas mostrado en la sección 1.5.2. Con este fin, definen un término  $B\nabla^2\nabla^2h$ , donde el coeficiente  $B$  es equivalente a la constante  $K$  definida en (1.29), de forma que de nuevo  $B = D_s\gamma'_s\nu'_s/(n_v^2k_B T)$ . La ecuación resultante es

$$\frac{\partial h}{\partial t} = S_0 \left[ -\Gamma_0(\theta) + \frac{\partial\Gamma_0(\theta)}{\partial\theta} \frac{\partial h}{\partial X} + \Gamma_x(\theta) \frac{\partial^2 h}{\partial X^2} + \Gamma_y(\theta) \frac{\partial^2 h}{\partial Y^2} \right] - B\nabla^2\nabla^2h. \quad (3.23)$$

Para homogeneizar la notación con las siguientes secciones escribiremos la ecuación (3.23) como

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -v_0 + \gamma_x \frac{\partial h}{\partial X} + \nu_x \frac{\partial^2 h}{\partial X^2} + \nu_y \frac{\partial^2 h}{\partial Y^2} - B\nabla^2\nabla^2h, \quad (3.24)$$

con

$$v_0 = S_0\Gamma_0, \quad \gamma_x = S_0\partial_\theta\Gamma_0, \quad \nu_x = S_0\Gamma_x, \quad \nu_y = S_0\Gamma_y. \quad (3.25)$$

Como consecuencia de que la velocidad de variación de  $h$  no puede depender de dónde consideremos el origen de la altura, lo cual es compatible con lo observado experimentalmente, se tiene que (3.24) no depende explícitamente de  $h$ , sino de sus derivadas y un término de velocidad constante. Dicho de otra forma, la ecuación (3.24) es invariante bajo translación global en altura,  $h \rightarrow h + cte$ .

Si tenemos en cuenta el nuevo término en el análisis de estabilidad lineal, resulta

$$\mathcal{R}e(\omega) = -S_0\Gamma_x k_X^2 - S_0\Gamma_y k_Y^2 - B(k_X^2 + k_Y^2)^2, \quad (3.26)$$

donde la parte real de la relación de dispersión es negativa para  $k$  grandes y, a diferencia de (3.19), la ecuación (3.24) está bien planteada. La expresión (3.24) también suministra una estimación de la longitud de onda observada en los experimentos. Su valor coincidirá con la asociada al modo de Fourier que hace máxima (3.26) y será  $2\pi[2B/(S_0\Gamma_x)]^{1/2}$ , orientada en la dirección  $\hat{X}$  si  $\Gamma_x < \Gamma_y$ , o  $2\pi[2B/(S_0\Gamma_y)]^{1/2}$  orientada a lo largo del eje  $\hat{Y}$  si  $\Gamma_y < \Gamma_x$ . En el caso de incidencia normal todas las direcciones son equivalentes y el valor de los *coeficientes efectivos de tensión superficial* son iguales, es decir,  $\Gamma_x = \Gamma_y$  con lo que el patrón resultante es isótropo. Este fenómeno ocurre también para el ángulo crítico mostrado en la figura 3.7 a partir del cual cambia la orientación de las estrías.

Si la difusión superficial está térmicamente activada, como es el caso de altas temperaturas y pequeños flujos, es fácil obtener cómo varía la longitud de onda del patrón  $l_l$  con la temperatura. Al ser  $S_0\Gamma_{x,y}$  independiente de  $T$ , sustituyendo

la dependencia de  $B$  con la temperatura en el resultado anterior se obtiene  $l_l \sim (1/T^{1/2}) \exp(-\Delta E/2k_B T)$ , donde  $\Delta E$  es la barrera de activación energética de la difusión superficial. Para obtener una estimación teórica de la longitud de onda, Bradley y Harper suponen incidencia normal,  $a \simeq \sigma \simeq \mu \simeq 10$  nm,  $B \simeq 2 \times 10^{-22}$  cm<sup>4</sup> s<sup>-1</sup> y un rendimiento de erosión de 2 átomos por ion incidente, con lo que obtienen  $l_l \simeq 5$  μm. Además, debido que  $B$  es independiente de la energía y del flujo, la dependencia de  $l_l$  con estos parámetros vendrá dada por  $S_0 \Gamma_{x,y}$  según  $l_l \sim (S_0 \Gamma_{x,y})^{-1/2}$ . Como se comentó en la sección 3.2, las distancias de la distribución (3.1),  $a$ ,  $\sigma$  y  $\mu$ , son del mismo orden y, aproximadamente, proporcionales a  $E$ . Teniendo esto en cuenta, de la expresiones (3.1) y (3.15) se deduce que  $S_0$  es independiente de  $E$  y que  $\Gamma_{x,y} \sim E$ , con lo cual se obtiene  $l_l \sim E^{-1/2}$ . Por otro lado,  $\Gamma_{x,y}$  es independiente del flujo y  $S_0$  es proporcional a  $\Phi_0$ , así que, de nuevo,  $l_l \sim \Phi_0^{-1/2}$ .

A pesar de que la ecuación (3.24) explica de forma apropiada la aparición y evolución de las estrías, así como su orientación y longitud de onda, no describe correctamente algunas características experimentales, como la saturación de la amplitud de los surcos (ver sección 2.4) y la aparición de rugosidad cinética, entre otras. Tampoco explica cómo aparecen los patrones a bajas temperaturas, puesto que el mecanismo de difusión considerado es estrictamente de origen térmico. Estos inconvenientes serán superados en parte mediante la ampliación del desarrollo a términos no lineales de orden superior como se mostrará en la sección 3.5.

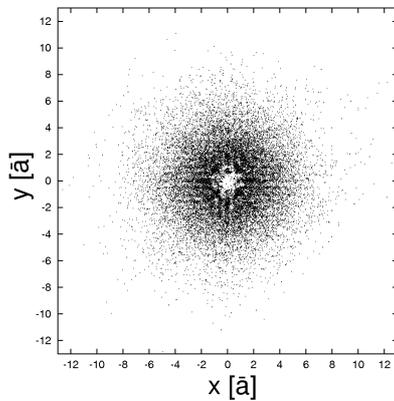
### 3.4. Ampliación de la teoría lineal a metales; nuevas distribuciones de energía

La distribución gaussiana (3.1) propuesta por Sigmund describe correctamente el depósito de energía para materiales amorfos y policristalinos, y en ella se basan la mayoría de teorías continuas que tratan el fenómeno de la erosión. Sin embargo, los resultados obtenidos en Feix *et al.* (2005) mediante la aproximación de colisiones binarias para iones de Ar<sup>+</sup> a 5 keV proyectados sobre un sustrato cristalino de Cu (100) nos muestran una distribución de energía diferente. En este trabajo se analiza la energía depositada y de las partículas eyectadas y se encuentra que en las cercanías del eje de la trayectoria inicial del ion la densidad de energía depositada tiende a cero (ver figura 3.9). Esto tendrá importantes consecuencias en los resultados obtenidos en el modelo de Bradley y Harper cómo se verá a continuación.

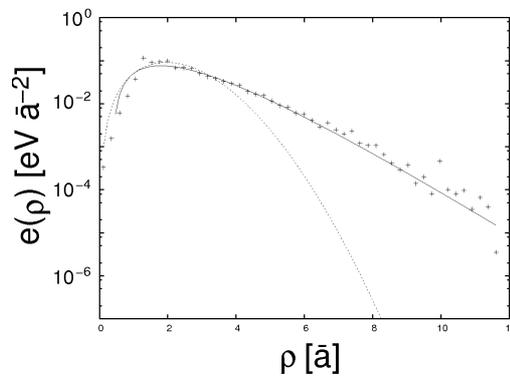
Para obtener los anteriores resultados se consideró una estructura fcc con una constante de red  $\bar{a} = 3.61$  Å, donde se disponen los átomos en reposo y desplazados de su posición de equilibrio una cierta cantidad descorrelacionada y distribuida aleatoriamente (la desviación estándar de la distribución gaussiana fue de 0.16 Å) para dar cuenta de las fluctuaciones de origen térmico, y se sigue la trayectoria de las partículas involucradas en las cascadas de colisiones provocadas por el impacto del ion. Cada partícula es seguida hasta que interacciona con otra mediante un potencial de origen coulombiano (se consideró que una partícula impacta con otra si

### 3.4 Ampliación de la teoría lineal a metales; nuevas distribuciones de energía 71

la distancia es menor o igual a  $2.6 \text{ \AA}$ ), la cual, si estaba en reposo y se le transfiere una energía suficiente para romper sus enlaces con el sólido (se consideró una energía de enlace  $E_b = 3.5 \text{ eV}$ ), se añade a la cascada de colisiones. Se calculan las nuevas posiciones y velocidades tras cada colisión hasta que la partícula alcanza una energía inferior a  $2 \text{ eV}$ , en cuyo caso se elimina de la cascada. A pesar de que esta técnica es estándar en el estudio de la irradiación iónica sobre sólidos, el método descrito anteriormente tiene sus limitaciones. Por ejemplo, a pesar de que el código permitía tener en cuenta el efecto de la acumulación de defectos provocados durante el bombardeo, éste no fue considerado y se supuso que las cascadas eran originadas de forma independiente por el impacto de un único ion.



**Figura 3.9** — Distribución espacial de los átomos eyectados de una superficie de cobre bombardeada a incidencia normal con iones a  $5 \text{ keV}$ . Datos obtenidos mediante simulaciones numéricas bajo la aproximación de colisiones binarias (BCA) tras 6000 impactos independientes. Se observa claramente que casi ningún átomo es erosionado en las proximidades del impacto del ion,  $(0, 0)$ . Las distancias están dadas en unidades de  $\bar{a} = 3.61 \text{ \AA}$ . Tomada de Feix *et al.* (2005).



**Figura 3.10** — Densidad de energía trasmiteda a los átomos superficiales de cobre erosionados frente a la distancia lateral a la trayectoria del ion de energía cinética  $5 \text{ keV}$ . La línea continua representa el mejor ajuste a los datos de simulación, dado por un decaimiento exponencial con un prefactor polinómico [Ec. (3.27)]. La línea punteada representa el ajuste a la distribución gaussiana obtenida por Sigmund para materiales amorfos y policristalinos [Ec. (3.1)]. Las distancias están dadas en unidades de  $\bar{a} = 3.61 \text{ \AA}$ . Tomada de Feix *et al.* (2005).

La información presentada en el trabajo anterior se alcanzó tras 3000-6000 impactos de iones y condiciones iniciales independientes para cada realización. La distribución de energía obtenida mediante estas simulaciones toma la forma (ver figura 3.10)

$$\epsilon_e(r', z') = N_e E (r'^2 + cr') e^{-\frac{r'}{\sigma_{xy}}} e^{-\frac{(z'+a)^2}{2\sigma_z^2}}, \quad (3.27)$$

donde la distancia a la trayectoria del haz viene dada por  $r' = x'^2 + y'^2$  y  $N_e$  es la

constante de normalización, de valor  $N_e = [(2\pi)^{3/2} \sigma_z (6\sigma_{xy}^4 + 2c\sigma_{xy}^3)]^{-1}$ . Los valores de  $c$  y  $\sigma_{xy}$  que mejor se ajustan a los resultados de simulación son  $c = -0.14$  nm y  $\sigma_{xy} = 0.28$  nm (ver figura 3.10). Debemos notar dos importantes diferencias con respecto a la distribución (3.1) obtenida por Sigmund: el depósito de energía decae exponencialmente<sup>15</sup> (y por tanto más lentamente) cuando nos alejamos en el plano perpendicular a la trayectoria del ion; además, la energía depositada a lo largo de dicha trayectoria es nula. Por otro lado, el ajuste a los resultados de las simulaciones implica  $c < 0$  y, por tanto, una distribución de energía no física pues, para valores pequeños de  $r'$ , se tiene un depósito negativo de energía. Por este motivo, y debido a que en el caso de sustratos bidimensionales no fue posible obtener una expresión analítica para la velocidad de erosión en función de los parámetros experimentales utilizando (3.27), también consideraremos la siguiente distribución de energía:

$$\epsilon_g(r', z') = N_g E r'^2 e^{-\frac{r'^2}{2\sigma_{xy}^2}} e^{-\frac{(z'+a)^2}{2\sigma_z^2}}, \quad (3.28)$$

$$N_g = [2(2\pi)^{3/2} \sigma_{xy}^4 \sigma_z]^{-1},$$

donde de nuevo, al igual que ocurría en la distribución (3.27), no se deposita energía a lo largo de la trayectoria del ion aunque el decaimiento, como ocurría en el caso de (3.1), es gaussiano<sup>16</sup> en todas las direcciones y, por tanto, más rápido que en (3.27) (ver figura 3.10).

### 3.4.1. Superficies unidimensionales: rendimiento de erosión

Con el fin de de obtener cierta intuición física sobre las consecuencias morfológicas de considerar las distribuciones (3.27) y (3.28), y para simplificar los cálculos analíticos, supondremos una superficie unidimensional. Estos resultados ya nos permitirán comparar con los obtenidos por Bradley-Harper y extraer algunas consecuencias del hecho de que no se deposite energía a lo largo de la dirección del haz.

La versión unidimensional de la distribución (3.28) se escribe

$$\epsilon_g^{1d}(x', z') = N_g E x'^2 e^{-\frac{x'^2}{2\sigma_x^2}} e^{-\frac{(z'+a)^2}{2\sigma_z^2}}, \quad (3.29)$$

$$N_g^{1d} = (2\pi\sigma_z\sigma_x^3)^{-1}.$$

Podemos repetir los cálculos de la sección anterior para obtener la velocidad de erosión [Ec. (3.10)] considerando esta nueva distribución de energía. Si la expresamos en función de  $\Gamma_0^{g,1d}$  y  $\Gamma_x^{g,1d}$ , se tiene

$$V_O = N_g^{1d} \Lambda E \Phi_0 e^{-\frac{a^2}{2\sigma_z^2}} \left[ \Gamma_0^{g,1d} + \frac{\Gamma_x^{g,1d}}{R_x} \right], \quad (3.30)$$

<sup>15</sup>Por este motivo hemos utilizado el subíndice  $e$ .

<sup>16</sup>Por ello, en adelante, utilizaremos el subíndice  $g$ .

### 3.4 Ampliación de la teoría lineal a metales; nuevas distribuciones de energía 73

donde la forma de  $\Gamma_0^{g,1d}$  y  $\Gamma_x^{g,1d}$  en función de los parámetros experimentales se encuentra en el apéndice B.1.

Por otro lado, si consideramos la distribución unidimensional análoga a (3.27), se tiene

$$\begin{aligned} \epsilon_e^{1d}(x', z') &= N_e E (x'^2 + c|x'|) e^{-\frac{|x'|}{\sigma_x}} e^{-\frac{(z'+a)^2}{2\sigma_z^2}}, \\ N_e^{1d} &= \left[ \sqrt{2\pi}\sigma_z(4\sigma_x^3 + 2c\sigma_x^2) \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

La velocidad de erosión para esta distribución es

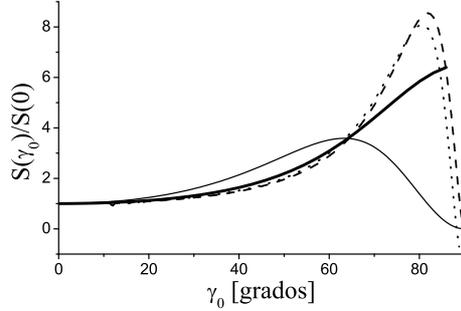
$$V_O = N_e^{1d} \Lambda E \Phi_0 e^{-\frac{a^2}{2\sigma_z^2}} \left[ \Gamma_0^{e,1d} + \frac{\Gamma_x^{e,1d}}{R_x} \right], \quad (3.32)$$

donde las expresiones para los coeficientes  $\Gamma_0^{e,1d}$ ,  $\Gamma_x^{e,1d}$  en función de los parámetros fenomenológicos son algo más complicadas y se detallan en el apéndice B.2.

En la figura 3.11 comparamos la tasa de erosión dada por la expresión (3.17) normalizada por su correspondiente valor a incidencia normal para una superficie plana en el modelo de Bradley y Harper unidimensional, para la distribución gaussiana modificada (3.29) y para distribución exponencial (3.31). Los parámetros  $a$ ,  $\sigma$ ,  $\mu$  y  $\sigma_z$  utilizados en la figura 3.11 fueron obtenidos a partir de simulaciones numéricas utilizando el código SRIM [Ziegler, Biersack y Littmark 1985] para bombardeo de cobre con iones de  $\text{Ar}^+$  a energías del orden del keV. Podemos observar que, a diferencia del resultado obtenido por Bradley y Harper, el rendimiento de erosión para las nuevas distribuciones de energía, (3.29) y (3.31), presenta un máximo a ángulos menores que incidencia rasante. Esto concuerda con los resultados experimentales [Oechsner 1975; Cheney y Pitkin 1965; Olivia-Florio *et al.* 1987] y se debe a que los puntos en los que se deposita más energía ya no se encuentran en la dirección del haz, sino a cierta distancia de él, lo que provoca que la incidencia rasante no sea la más efectiva. Se observa también que, si modificamos el valor de  $c$  en la distribución (3.31) desde el valor no físico obtenido en las simulaciones de colisiones binarias a  $c = 0$ , apenas se altera cuantitativamente el rendimiento. En el caso del decaimiento exponencial de la distribución (3.29) sí se obtiene un resultado cuantitativo algo más alejado del caso anterior. Por último, debemos señalar que el resultado no físico de obtener un rendimiento negativo para valores grandes de  $\gamma_0$  en la distribución (3.31) con  $c < 0$  se debe a que ésta toma valores negativos a distancias pequeñas de la trayectoria del ion. En todo caso, este hecho y que se anule el rendimiento a grandes ángulos de incidencia para la distribución (3.29) se corregirán cuando tratemos el problema bidimensional, como se verá en el apartado siguiente.

#### 3.4.2. Superficies bidimensionales

Desde el punto de vista experimental, el caso más interesante es el de un sustrato bidimensional. En este caso los cálculos se complican, hasta el punto de que



**Figura 3.11** — Rendimiento de erosión normalizado  $S(\gamma_0)/S(0)$  para una superficie plana unidimensional en función del ángulo de incidencia  $\gamma_0$  para las distribuciones de energía consideradas en el texto (unidades en nm): distribución (3.1) unidimensional (BH) con  $a = 3.8$ ,  $\sigma = 2.2$ ,  $\mu = 1.5$  (línea continua gruesa); distribución (3.29) con  $a = 3.8$ ,  $\sigma_z = 2.2$ ,  $\sigma_x = 1.5$  (línea continua fina); distribución (3.31) con  $a = 3.8$ ,  $\sigma_z = 2.2$ ,  $\sigma_x = 0.28$ ,  $c = -0.14$  (línea de rayas); distribución (3.31) con  $a = 3.8$ ,  $\sigma_z = 2.2$ ,  $\sigma_x = 0.28$ ,  $c = 0$  (línea de puntos).

no podemos obtener una expresión analítica de la velocidad de erosión utilizando la Ec. (3.10) para la distribución que mejor ajustaba los datos obtenidos por BCA [Ec. (3.27)] y debemos integrar las ecuaciones numéricamente. Para la distribución (3.28) sí se obtuvo, sin embargo, una expresión analítica para la velocidad de erosión en función de los radios de curvatura; ésta es

$$V_O = N_g \Lambda E \Phi_0 e^{-\frac{a^2}{2\sigma_z^2}} \left[ \Gamma_0^g + \frac{\Gamma_x^g}{R_x} + \frac{\Gamma_y^g}{R_y} \right], \quad (3.33)$$

donde la forma de las funciones  $\Gamma_0^g$ ,  $\Gamma_x^g$  y  $\Gamma_y^g$  se muestra en el apéndice B.3.

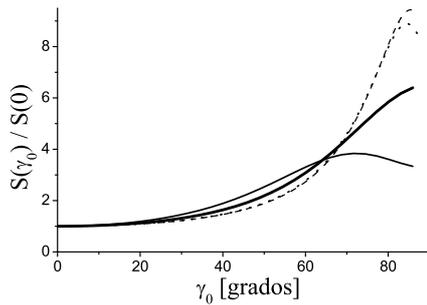
### 3.4.2.1. Rendimiento de erosión

Si representamos el rendimiento de erosión para una superficie plana bidimensional [Ec. (3.17)] en el caso de las distribuciones (3.27) y (3.28) se comprueba (figura 3.12), como ocurría en el caso unidimensional, que a diferencia del modelo de Bradley y Harper (línea gruesa en la figura) aparece un máximo para valores próximos a incidencia rasante. Esto coincide con los resultados observados en diferentes metales [Oechsner 1975; Cheney y Pitkin 1965; Olivia-Florio *et al.* 1987]. Así, por ejemplo, en el experimento de Olivia-Florio *et al.* (1987) para cobre bombardeado con iones de  $\text{Xe}^+$  a energías entre 5 y 50 keV, el máximo rendimiento de erosión se produce entre 65 y 80°, como se observa en la figura 3.13. Esto se debe a que, al igual que ocurría en el caso unidimensional, el depósito de energía es máximo cuando se bombardea a grandes ángulos. A incidencia rasante, debido a que el depósito de energía es nulo a lo largo de la trayectoria del haz, el rendimiento es menor. El hecho de que se obtenga una tasa teórica de erosión alta para ángulos cercanos a 90° y no un rendimiento negativo o nulo, como ocurría en el caso unidimensional, se debe a que, a diferencia de allí, donde no se depositaba energía en la superficie pues la distribución se anulaba a lo largo del eje de la trayectoria del

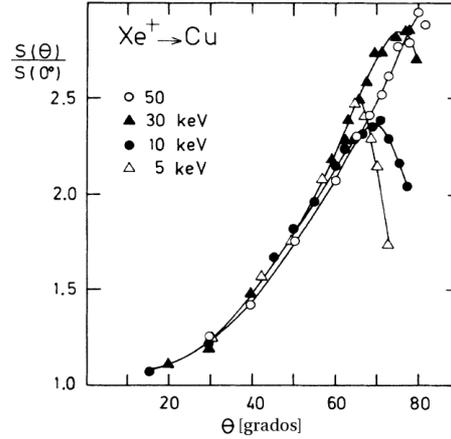
### 3.4 Ampliación de la teoría lineal a metales; nuevas distribuciones de energía 75

ion, en este caso sí se deposita energía en la superficie a cierta distancia lateral, lo que supone un rendimiento positivo.

Por otro lado, habíamos visto en la sección 3.3.2 que el sentido del movimiento de las estrías dependía del signo de  $\partial_{\gamma_0}\Gamma_0$ . El hecho de que  $\Gamma_0$  tenga un máximo a determinado ángulo implica que a partir de ese ángulo el movimiento de las estrías debe cambiar de sentido.



**Figura 3.12** — Rendimiento de erosión normalizado  $S(\gamma_0)/S(0)$  para una superficie plana en función del ángulo de incidencia  $\gamma_0$  para las distribuciones de energía consideradas en el texto (unidades en nm): distribución (3.1) (BH) con  $a = 3.8$ ,  $\sigma = 2.2$ ,  $\mu = 1.5$  (línea continua gruesa); distribución (3.28) con  $a = 3.8$ ,  $\sigma_z = 2.2$ ,  $\sigma_{xy} = 1.5$  (línea continua fina); distribución (3.27) con  $a = 3.8$ ,  $\sigma_z = 2.2$ ,  $\sigma_{xy} = 0.28$ ,  $c = -0.14$  (línea de rayas); distribución (3.27) con  $a = 3.8$ ,  $\sigma_z = 2.2$ ,  $\sigma_{xy} = 0.28$ ,  $c=0$  (línea de puntos).



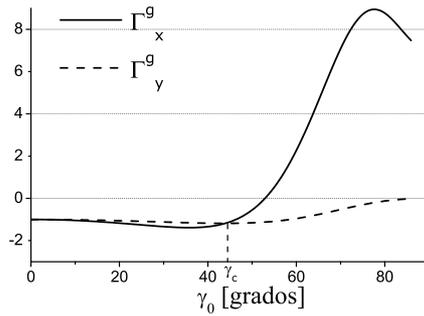
**Figura 3.13** — Rendimiento de erosión medido experimentalmente normalizado  $S(\gamma_0)/S(0)$  en función del ángulo de incidencia  $\theta$  para un sustrato de cobre bombardeado con iones de  $\text{Xe}^+$  a diferentes energías. Tomada de Olivia-Florio *et al.* (1987).

En la figura 3.12 se observa la similitud del rendimiento de erosión para la distribución exponencial (3.27) entre el caso de los parámetros obtenidos en el ajuste a las simulaciones y el de  $c = 0$ . Al igual que ocurría en el ejemplo unidimensional, el máximo rendimiento de erosión en el caso de la distribución gaussiana (3.28) se produce a ángulos menores que en el caso de la distribución exponencial (3.27), para los valores de los parámetros considerados en el texto.

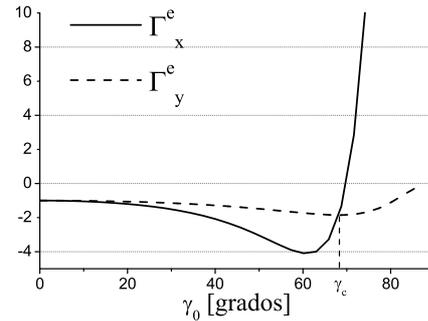
#### 3.4.2.2. Efecto de la velocidad de erosión en la morfología superficial

Estamos en disposición de estudiar las consecuencias de considerar las distribuciones (3.27) y (3.28) en la formación de patrones. De forma análoga a la sección 3.3, podemos obtener información sobre la evolución de la morfología a partir de

la dependencia de la velocidad de erosión con las curvaturas. Para incidencia normal, la simetría  $x \leftrightarrow y$  se debe restaurar y, por tanto, los valores de  $\Gamma_x$  y  $\Gamma_y$  deben coincidir. Esto nos permitirá comprobar los cálculos analíticos para el caso de la distribución (3.28) donde se obtuvo  $\Gamma_x^g(0) = \Gamma_y^g(0) = -4\pi a \sigma_{xy}^6 / \sigma_z^2$  y los resultados numéricos para la distribución (3.27).



**Figura 3.14** —  $\Gamma_x^g$  y  $\Gamma_y^g$  normalizadas por  $\Gamma_x^g(0) = \Gamma_y^g(0)$  para la distribución (3.28) con  $a = 3.8$  nm,  $\sigma_z = 2.2$  nm,  $\sigma_{xy} = 1.5$  nm.



**Figura 3.15** —  $\Gamma_x^e$  y  $\Gamma_y^e$  normalizadas por  $\Gamma_x^e(0) = \Gamma_y^e(0)$  para la distribución (3.27) con  $a = 3.8$  nm,  $\sigma_z = 2.2$  nm,  $\sigma_{xy} = 0.28$  nm,  $c = -0.14$  nm.

En las figuras 3.14 y 3.15 se presentan los resultados para los coeficientes  $\Gamma_x$  y  $\Gamma_y$  para las distribuciones (3.27) y (3.28), normalizados por sus correspondientes valores absolutos a incidencia normal  $\gamma_0 = 0$ . En ambos casos se tiene que  $\Gamma_x$  es menor que  $\Gamma_y$  para  $\gamma < \gamma_c$  mientras que  $\Gamma_y$  es siempre negativa, tal y como ocurría en el modelo de Bradley y Harper (ver figura 3.7). Uno de los logros de este modelo, como vimos en la sección 3.3, es predecir la orientación de las ondulaciones para diferentes ángulos de incidencia. En este apartado comprobamos que, a pesar de que las distribuciones (3.27) y (3.28) son muy diferentes a la propuesta por Sigmund [Ec. (3.1)], con lo que el rendimiento de erosión respecto al ángulo de incidencia para una superficie plana sufre una importante modificación respecto al resultado de Bradley y Harper, no ocurre lo mismo con los coeficientes efectivos de tensión superficial  $\Gamma_x$  y  $\Gamma_y$ . En este caso el comportamiento cualitativo de estas funciones es similar al descrito en la sección 3.3, lo cual implica que los argumentos dados allí sobre la evolución de la morfología y la orientación de las estrías cuando modificamos el ángulo de incidencia son también válidos aquí. Además, las dependencias de la longitud de onda respecto a los parámetros experimentales como flujo, energía o temperatura son análogas a las obtenidas en el modelo de Bradley y Harper; de hecho, algunas de estas predicciones han sido corroboradas en experimentos sobre cobre [Rusponi *et al.* 1998b; Stepanova, Dew y Soshnikov 2002; Chan, Pavenayotin y Chason 2004].

### 3.5. Teoría no lineal

Con el fin de superar las limitaciones del modelo de BH y basándose en la expresión para la velocidad de erosión [Ec. (3.4)] obtenida por Sigmund para sustratos amorfos o policristalinos, en Cuerno y Barabási (1995), Makeev y Barabási (1997) y Makeev, Cuerno y Barabási (2002) se deriva una ecuación estocástica para describir la evolución de la morfología de una superficie sometida a bombardeo iónico. Esta teoría es una generalización no lineal del modelo de BH en la que, al igual que ocurría allí, los coeficientes que aparecen en la ecuación se obtienen a partir de los parámetros fenomenológicos (ángulo de incidencia, flujo, energía cinética y rango de penetración de los iones, etc.) La diferencia principal de estos trabajos con el modelo de BH es que aquí se obtiene la velocidad de erosión hasta órdenes superiores en el desarrollo en las derivadas de  $h$ . La ecuación resultante muestra algunas características no consideradas en los modelos lineales previos como, por ejemplo, un término de difusión superficial adicional cuyo origen es puramente erosivo, y la aparición de términos no lineales de orden cuadrático en  $h$  que estabilizan el crecimiento de la amplitud del patrón. Además, estos nuevos términos provocan que se produzca *rugosidad cinética* para tiempos suficientemente largos cuando las no linealidades se hacen relevantes.

#### 3.5.1. Ecuación continua para la altura de la superficie

Análogamente a como se hizo en la sección 3.3, se parte de la expresión propuesta por Sigmund para la velocidad de erosión, Ec. (3.4). Se desarrolla el flujo y la distribución de energía en función de la geometría local con el fin de obtener una expresión para la tasa de erosión, bajo la suposición de que la variación de la morfología es suave para las escalas del rango de penetración de los iones. A diferencia de BH, en este caso se aproxima la altura de la superficie en las proximidades de un punto arbitrario  $O$  por sus derivadas hasta cuarto orden y se amplía el desarrollo para la velocidad de erosión hasta ese orden en derivadas espaciales y hasta orden cuadrático en  $h$  (a diferencia de BH, donde nos quedábamos en derivadas segundas y orden lineal en  $h$ ). En Makeev, Cuerno y Barabási (2002) se introduce la siguiente notación

$$z(x, y) \simeq \frac{\Delta_{20}x^2}{a} + \frac{\Delta_{02}y^2}{a} + \sum_{m,n=0, n+m=3,4}^4 \frac{\Delta_{mn}}{a^{m+n-1}} x^m y^n, \quad (3.34)$$

con

$$\Delta_{mn} = \frac{a^{m+n-1}}{m!n!} \frac{\partial^{m+n} z(x, y)}{(\partial x)^m (\partial y)^n}. \quad (3.35)$$

Se considera que los radios de curvaturas principales  $R_x$  y  $R_y$  son proporcionales a  $\Delta_{20}$  y  $\Delta_{02}$ , de modo que se desprecian las derivadas cruzadas de segundo orden; si nos quedamos hasta ese orden en el desarrollo se recupera la expresión (3.6) propuesta por BH para la altura local.

Si sustituimos el valor de  $z$  dado por la ecuación (3.34) en la expresión del flujo local (3.11) y en la distribución de energía (3.12), podemos repetir los cálculos de la sección 3.3.1 desarrollando las exponenciales hasta orden cuatro en las derivadas de  $z$ . Se obtiene así una expresión para la velocidad de erosión en  $O$  en función de la geometría local de la superficie, de la forma

$$V_O \propto \cos \gamma_0 + \Gamma_{20}(\gamma_0)\Delta_{20} + \Gamma_{02}(\gamma_0)\Delta_{02} + \Gamma_{30}(\gamma_0)\Delta_{30} + \Gamma_{21}(\gamma_0)\Delta_{21} \\ + \Gamma_{40}(\gamma_0)\Delta_{40} + \Gamma_{22}(\gamma_0)\Delta_{22} + \Gamma_{04}(\gamma_0)\Delta_{04}, \quad (3.36)$$

donde la dependencia explícita de estos coeficientes con el ángulo local de incidencia, las anchuras y rango de penetración de la distribución de energía (3.1) puede encontrarse en el apéndice B de Makeev, Cuerno y Barabási (2002).

Al igual que se hizo en la sección 3.3.2, a partir de (3.36) puede obtenerse una ecuación en derivadas parciales para la evolución de la altura de la superficie,  $h$ , en el sistema de coordenadas de laboratorio.

La relación entre el ángulo local respecto a la normal en un punto cualquiera,  $O$ , y el ángulo de incidencia en el sistema de laboratorio,  $\theta$ , tras el desarrollo en potencias en derivadas de  $h$ , a orden lineal más bajo, viene dado por

$$\cos \gamma_0 = \cos \theta - (\partial_X h) \sin \theta - \frac{1}{2} \left[ (\partial_X h)^2 + (\partial_Y h)^2 \right] \cos \theta; \quad (3.37)$$

$$\sin \gamma_0 = \sin \theta + (\partial_X h) \cos \theta - \frac{1}{2} (\partial_X h)^2 \sin \theta + \frac{1}{2} (\partial_Y h)^2 \frac{\cos^2 \theta}{\sin \theta}. \quad (3.38)$$

Sustituyendo esta relación en la expresión para las funciones  $\Gamma$  de (3.36), análogamente a (3.19), se obtiene la siguiente expresión para la evolución de la altura de la superficie <sup>17</sup>

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -v_0 + \gamma_x \frac{\partial h}{\partial X} + \left[ \xi_x \left( \frac{\partial h}{\partial X} \right) + \nu_x \right] \left( \frac{\partial^2 h}{\partial X^2} \right) \\ + \left[ \xi_y \left( \frac{\partial h}{\partial X} \right) + \nu_y \right] \left( \frac{\partial^2 h}{\partial Y^2} \right) + \Omega_1 \frac{\partial^3 h}{\partial X^3} + \Omega_2 \frac{\partial^3 h}{\partial X \partial Y^2} \\ - K_{xy} \frac{\partial^4 h}{\partial X^2 \partial Y^2} - K_{xx} \frac{\partial^4 h}{\partial X^4} - K_{yy} \frac{\partial^4 h}{\partial Y^4} + \frac{\lambda_x}{2} \left( \frac{\partial h}{\partial X} \right)^2 + \frac{\lambda_y}{2} \left( \frac{\partial h}{\partial Y} \right)^2. \quad (3.39)$$

Esta ecuación es una generalización anisótropa de la versión bidimensional de la ecuación de Korteweg-de Vries modificada por disipación mostrada en la sección 1.5.5, donde sus coeficientes están relacionados con los parámetros experimentales,  $\theta$ ,  $E$ ,  $\Phi_0$ ,  $a$ ,  $\sigma$  y  $\mu$ , siendo la erosión el único mecanismo que interviene en la evolución temporal de la altura. La ecuación (3.39) se reduce a la obtenida por

<sup>17</sup>La velocidad de erosión es normal a la superficie en el punto  $O$  (dicho vector es  $\mathbf{n} = (-\partial_X h, -\partial_Y h, 1)$  expresado en el sistema de referencia de laboratorio). Tras una simple proyección geométrica de  $(\partial_t h)\hat{\mathbf{Z}}$  sobre este vector, se tiene la relación  $\partial_t h = -V_O \sqrt{1 + (\partial_X h)^2 + (\partial_Y h)^2}$ .

BH hasta segundo orden en derivadas de  $h$ . Debemos añadirle, como se hizo en la sección 3.3.2, los efectos de la difusión superficial mediante un término adicional  $-B\nabla^4 h$ . La ecuación resultante describe la evolución temporal de la morfología y suministra dos mecanismos difusivos responsables de la relajación del perfil, uno inducido por la erosión y anisótropo, y otro isótropo activado térmicamente. Debido a las fluctuaciones locales del flujo, se puede considerar un término adicional de ruido, descorrelacionado espacial y temporalmente y de amplitud  $\Phi_0$ , representado por  $\eta(X, Y, t)$ .

En general, la ecuación (3.39) predice gran variedad de morfologías y comportamientos dinámicos. Un estudio sistemático resulta complicado aunque en el apartado 3.5.2 se discutirán algunas características generales.

Debido a la elección de nuestro sistema de coordenadas la ecuación (3.39) y sus coeficientes presentan simetría bajo la transformación  $Y \rightarrow -Y$ , pero no bajo  $X \rightarrow -X$ . Para  $\theta = 0$  el sistema debe ser isótropo, es decir, todas las direcciones deben ser equivalentes y, efectivamente, se tiene  $0 = \gamma_x = \xi_x = \xi_y = \Omega_1 = \Omega_2$ ,  $\nu_x = \nu_y$ ,  $\lambda_x = \lambda_y$  y  $K_{xx} = K_{yy} = K_{xy}/2$ . En este caso la ecuación para la evolución de la altura se reduce a la ecuación isótropa de Kuramoto-Sivashinsky

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -v_0 + \nu_x \nabla^2 h - K_{xx} \nabla^4 h + \frac{\lambda_x}{2} (\nabla h)^2, \quad (3.40)$$

la cual predice rugosidad cinética para tiempos suficientemente largos como se verá en el apartado 3.5.3.

### 3.5.2. Análisis y predicciones morfológicas de la ecuación no lineal

En el trabajo de Makeev, Cuerno y Barabási (2002) se estudian las morfologías predichas por la ecuación obtenida en el apartado anterior. Se separa separan los tiempos cortos, donde las morfologías están exclusivamente descritas por los términos lineales, de las de tiempos largos en las cuales los términos no lineales son fundamentales para describir la evolución. Se distinguen también dos regímenes de comportamiento, uno a altas temperaturas, donde la difusión superficial de origen térmico es la más relevante, de otro a bajas temperaturas, donde la difusión inducida por la erosión es la dominante. Describimos en los siguientes apartados los principales resultados.

#### 3.5.2.1. Régimen lineal. Altas temperaturas

Si hacemos un análisis de estabilidad lineal similar al propuesto en la sección 3.3.2 para la ecuación (3.39) considerando que el término difusivo dominante es el térmicamente activado, se tiene siguiente relación de dispersión:

$$\mathcal{I}m(\omega) = -\gamma_x k_X + \Omega_1 k_X^3 + \Omega_2 k_X k_Y^2, \quad (3.41)$$

$$\mathcal{R}e(\omega) = -\nu_x k_X^2 - \nu_y k_Y^2 - B (k_X^2 + k_Y^2)^2, \quad (3.42)$$

donde, como se mostró en la sección 3.3.2, los coeficientes  $\gamma_x$ ,  $\Omega_1$  y  $\Omega_2$  contribuyen a la velocidad de movimiento de las estrías y ponen de manifiesto la anisotropía del sistema a incidencia oblicua ( $\theta \neq 0$ ). En este caso, la parte real de la relación de dispersión coincide con la obtenida por BH y ya fue discutida en la sección 3.3.2, donde se puso de manifiesto la dependencia de la orientación y tamaño de las ondulaciones respecto a los parámetros experimentales.

### 3.5.2.2. Régimen lineal. Bajas temperaturas

Cuando desarrollamos la expresión de la velocidad hasta cuarto orden se encuentran términos equivalentes a los de difusión superficial térmicamente activados de la forma  $-K_{xx}\partial_X^4 h$ ,  $-K_{yy}\partial_Y^4 h$  y  $-K_{xy}\partial_X^2\partial_Y^2 h$  [ver Ec. (3.39)]. Estos términos no implican transporte de masa sobre la superficie, sino que son un efecto erosivo de mayor orden que aplanan la superficie actuando en contraposición con la inestabilidad morfológica. Debido a que su origen no es térmico, se piensa que ésta es la explicación a la formación de estrías a bajas temperaturas [Carter y Vishnyakov 1996].

La forma de estos coeficientes en función de los parámetros experimentales puede consultarse en Makeev, Cuerno y Barabási (2002) y sus órdenes de magnitud son comparables con el de origen térmico,  $B$ , introducido por BH. A temperaturas suficientemente bajas, la difusión superficial dominante es la de origen erosivo; esto implica que la dependencia de la longitud de onda respecto de la energía y del flujo de iones es diferente a las obtenidas por BH. Ahora se tiene que la longitud de onda es proporcional a la energía de bombardeo,  $l_l \sim E$ , e independiente del flujo,  $\Phi_0$ . La dependencia de la orientación de las estrías en función del ángulo de incidencia es, sin embargo, similar a la obtenida allí; éstas sólo pueden orientarse en la dirección  $\hat{x}$ , en la  $\hat{y}$  o en ambas simultáneamente (ver apéndice C) y, de nuevo, se tiene que para ángulos pequeños se orientan perpendiculares al haz, mientras que para ángulos grandes se orientan paralelas al mismo.

Existe una pequeña franja intermedia de ángulos donde, debido a que se obtiene un signo para los coeficientes que hace que el problema esté mal planteado al orden cuarto en derivadas, habría que acudir a un desarrollo de mayor orden en  $h$  para obtener la orientación de las estrías.

### 3.5.2.3. Régimen no lineal

Para explicar muchas de las características observadas en los experimentos, debemos considerar el efecto de los términos no lineales de (3.39).

Existe una importante diferencia entre el régimen lineal y el no lineal. Mientras que en el primero se pueden obtener predicciones analíticas completas (como se ha visto en las secciones anteriores), la discusión de los efectos de los términos no lineales requiere la ayuda de técnicas numéricas y aproximaciones, aunque, incluso con la utilización de estas herramientas, no se ha obtenido aún una completa comprensión de las soluciones de esta ecuación.

Debido a que los términos no lineales no se ven afectados por la temperatura y a que la difusión térmica y erosiva tienen un efecto equivalente, se obtienen morfologías similares en los casos de altas y bajas temperaturas.

El efecto de los coeficientes  $\xi_x$  y  $\xi_y$  en (3.39) no ha sido estudiado en profundidad, pero simulaciones numéricas preliminares indican que no afectan al escalado asintótico de la superficie. Sí parecen tener un efecto relevante en el movimiento de las estrías para tiempos intermedios tras haberse desarrollado el patrón, así como al perfil asimétrico de las ondulaciones, como se vio en la sección 1.5.5. El signo de estos coeficientes pasa de negativo a positivo cuando aumentamos  $\theta$ , alcanzando un máximo, y siendo por tanto en este punto particularmente relevantes, para ángulos cercanos a incidencia rasante. En los siguientes capítulos se estudiará el efecto de estos términos cuando se integre numéricamente la ecuación (3.39).

Mucho más relevantes en la evolución de la morfología resultan los coeficientes  $\lambda_x$  y  $\lambda_y$  y sus signos relativos. Mientras que  $\lambda_y < 0$  para cualquier ángulo,  $\lambda_x$  es sólo negativo para ángulos pequeños, cambiando de signo para ángulos mayores. Mediante integraciones numéricas se ha mostrado la formación de estructuras periódicas para tiempos pequeños ( $t < t_c$ ) donde los términos lineales no son relevantes, y un régimen posterior ( $t > t_c$ ) donde determinan completamente la morfología de la superficie [Park *et al.* 1999]. Este tiempo crítico se estima a partir de (3.39) comparando la magnitud de los términos lineales y los no lineales para obtener

$$t_c = (B + K)/\nu^2 \ln(\nu/\lambda), \quad (3.43)$$

donde los coeficientes corresponden a los de la dirección paralela a la orientación de las ondulaciones. Para tiempos cortos la velocidad de movimiento de la altura global de la superficie es  $-v_0$ , a la que debemos de sumarle un término adicional proporcional a  $1/(\lambda_x + \lambda_y)$  si  $t \geq t_c$  pues los términos no lineales, además del citado anteriormente, son los únicos que no conservan la cantidad de material en la ecuación (3.39). Dependiendo de los signos relativos de  $\lambda_x$  y  $\lambda_y$  se esperan dos morfologías diferentes. En la primera de ellas, cuando  $\lambda_x$  y  $\lambda_y$  tienen el mismo signo, el patrón desaparece a largas distancias y la superficie presenta rugosidad cinética. En particular, es de esperar que ésta caiga dentro de la clase de universalidad de la ecuación KPZ. Por otro lado, si  $\lambda_x \cdot \lambda_y < 0$ , los términos no lineales inducen una nueva estructura de estrías rotadas un cierto ángulo respecto a la dirección del haz y la superficie deja de ser autoafín. En el estudio de Rost y Krug (1995) se mostró, para la versión determinista de (3.39) en ausencia de los términos  $\xi_i$ , que si se verifica  $\nu_x < 0$ ,  $\nu_y < 0$  y  $\lambda_x \lambda_y < 0$ , entonces se producen los denominados *modos de cancelación*, es decir, existe modos linealmente inestables orientados en una determinada dirección para los que los términos no lineales se cancelan de forma exacta. Esto es fácil de ver si suponemos una solución de la forma  $h(X, Y, t) = g(X - cY, t)$ , donde  $c$  es una constante arbitraria. Si escribimos

la ecuación (3.39) para esta nueva función se tiene

$$\frac{\partial g}{\partial t} = -v_0 + \gamma_x \frac{\partial g}{\partial M} + (\nu_x + c^2 \nu_y) \frac{\partial^2 g}{\partial M^2} + (\Omega_1 + c^2 \Omega_2) \frac{\partial^3 g}{\partial M^3} - B(1 + c^2) \frac{\partial^4 g}{\partial M^4} + \frac{(\lambda_x + c^2 \lambda_y)}{2} \left( \frac{\partial g}{\partial M} \right)^2, \quad (3.44)$$

donde  $g(M) = g(X - cY)$  es su solución estacionaria. Se observa claramente en (3.44) que si  $\lambda_x$  y  $\lambda_y$  tienen distinto signo y se verifica que  $c = \sqrt{-\lambda_x/\lambda_y}$ , se anula la no linealidad. Esto provoca que la ecuación (3.39) sea no linealmente inestable para determinados modos y que aparezcan patrones rotados un determinado ángulo,  $\tan^{-1}(-\lambda_y/\lambda_x)^{1/2}$  con respecto al eje  $\hat{X}$ , que crecen indefinidamente en el transcurso del tiempo y que parecen verificar  $l \sim t$ . En la figura 6.18 se presentan unos patrones similares para una ecuación parecida.

### 3.5.3. Incidencia normal

En el capítulo anterior se mostró la aparición de patrones de puntos o fosos ordenados y de tamaño nanométrico cuando se bombardea perpendicularmente el sustrato. En el trabajo de Kahng, Jeong y Barabási (2001) se estudia cómo se forman estructuras similares cuando se considera la versión isótropa de (3.39). Como se mostró en la sección 3.5.1 ésta es<sup>18</sup>

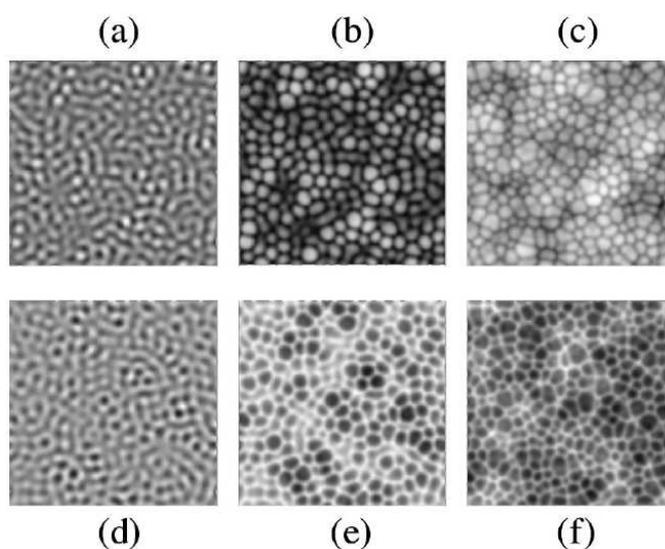
$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h - K \nabla^4 h + \frac{\lambda}{2} (\nabla h)^2 + \eta, \quad (3.45)$$

donde los coeficientes de (3.45) se corresponden con los de (3.39) para  $\theta = 0$  y verifican  $\nu < 0$ ,  $K > 0$ , y el signo de  $\lambda$  coincide con el de  $[(1/\mu)^2 - (1/\sigma)^2 - (1/\mu)^4]$ , donde  $\mu$  y  $\sigma$  son las anchuras transversal y longitudinal de la distribución (3.1). Debemos notar que en (3.45), a diferencia de lo que ocurre en (3.39), desaparecen todos los términos con derivadas impares en  $X$ , con lo que se restaura la simetría  $X \rightarrow -X$ .

Cuando se integra numéricamente la ecuación anterior con  $\eta = 0$  y condiciones iniciales aleatorias, se observa que aparecen unas estructuras celulares de longitud de onda  $l_l = 2\pi\sqrt{2K/\nu}$  debidas a los términos lineales que se mantienen en el transcurso del tiempo sin ensanchar [ver figuras 3.16 (a) y (d)]. La amplitud de éstas, sin embargo, crece exponencialmente hasta saturar y formar unas estructuras hexagonales de “puntos” [figura 3.16 (b)] o “fosos” [figura 3.16 (e)] dependiendo del signo de  $\lambda$ . Estos patrones se desordenan en altura y en el plano en el transcurso del tiempo y presentan un perfil rugosos descorrelacionado con propiedades de escalado cinético a distancias mayores que  $l_l$  [figuras 3.16 (c) y (f)]. La ecuación (3.45) es simétrica si cambiamos de signo simultáneamente  $\lambda$  y  $h$ . Esto hace que las propiedades morfológicas en la evolución de la superficie sólo se vean afectadas

<sup>18</sup>Se ha eliminado el término de velocidad constante  $-v_0$ . Esto es posible si elegimos un sistema de referencia móvil de la forma  $h \rightarrow h - v_0 t$  y aplicamos esta transformación en (3.39).

mediante una reflexión  $h \rightarrow -h$  cuando cambiamos el signo de  $\lambda$ ; por ejemplo, la parte superior de las estructuras adopta una forma redondeada y la parte inferior picuda si  $\lambda > 0$ , mientras que se redondea inferiormente con la parte superior picuda si  $\lambda < 0$ .



**Figura 3.16** — Morfologías superficiales bidimensionales (tamaño del sistema  $256 \times 256$ ) predichas por la ecuación (3.45) con  $\nu = 0.6169$ ,  $K = 2$ ,  $\eta = 0$  y  $\lambda = 1$  para: (a)  $t = 4.0$ ; (b)  $t = 5.8$ ; (c)  $t = 8.0 \times 10^4$ . (d)-(f) igual que (a)-(c), pero con  $\lambda = -1$ . Tomada de Kahng, Jeong y Barabási (2001).

Para obtener la expresión (3.45) hemos supuesto que el término difusivo es de origen puramente erosivo y por tanto las dependencias del tamaño de la estructura respecto al flujo o la energía son análogas a las obtenidas en el apartado 3.5.2.2. Como ocurría en el caso de altas temperaturas del apartado 3.5.2.1, si suponemos que la difusión está térmicamente activada, las relaciones del tamaño del patrón con la temperatura, energía o flujo son análogas a las de BH.

#### 3.5.4. Sustrato rotante

Tal y como vimos en el capítulo anterior, el giro simultáneo de la muestra mientras se bombardea puede inducir un patrón de puntos ordenados o una superficie que presente rugosidad cinética. En cualquier caso, la superficie resultante es siempre más plana que si no se produce rotación. En Bradley (1996) se obtiene una ecuación de evolución para la altura de la superficie a partir de una versión determinista de (3.39) con un término difusivo isótropo cuando se gira la muestra alrededor del eje  $\hat{Z}$ , perpendicular a la superficie, con una velocidad angular constante  $\dot{\varphi}$ , siendo  $\varphi$  el ángulo azimutal de rotación. Consideremos un nuevo sistema

de coordenadas  $(X', Y', Z')$  que gira de forma solidaria con la muestra, relacionado con el sistema de laboratorio según

$$X' = X \cos \varphi + Y \sin \varphi, \quad (3.46)$$

$$Y' = -X \sin \varphi + Y \cos \varphi, \quad (3.47)$$

$$Z' = Z, \quad (3.48)$$

y hagamos el cambio de variable en (3.39). Si la rotación es lo suficientemente rápida, podemos promediar para  $\varphi \in [0, 2\pi]$  (ver más detalles de los cálculos en la sección 4.2.2.5), con el fin de obtener una ecuación efectiva para la altura de la superficie, que presenta simetría rotacional análoga a (3.45) y que aquí toma la forma

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu_{av} \nabla'^2 h - B \nabla'^4 h + \frac{\lambda_{av}}{2} (\nabla' h)^2, \quad (3.49)$$

pero, en este caso, con  $\nu_{av} = (\nu_x + \nu_y)/2$  y  $\lambda_{av} = (\lambda_x + \lambda_y)/2$ . El proceso, pues, es equivalente a haber bombardeado simultáneamente desde todos los posibles ángulos  $\varphi$ . Si la velocidad de rotación  $\varphi$  es pequeña, se produciría la formación de estrías predicha por la ecuación (3.39) y descrita en la sección 3.5. Para dar una estimación de qué velocidades de rotación son grandes, Bradley supone que, si  $\dot{\varphi}$  es mucho mayor que el inverso del tiempo necesario para que se desarrolle la inestabilidad lineal, el cual es del orden de  $B/\nu_{av}^2$  [ver Ec. (3.43) en el apartado 3.5.2.3], entonces la ecuación que gobierna la evolución de la morfología es (3.49). Por ejemplo, en el experimento de Frost *et al.* (2004) esto se consigue para una velocidad de rotación de  $\dot{\varphi} = 15$  revoluciones por minuto.

Al introducir el ruido y promediar el valor de los términos de tensión superficial  $\nu_x$  y  $\nu_y$ , puede ocurrir que  $\nu_{av} > 0$  con lo que se elimina la inestabilidad morfológica y la superficie sería estable frente a pequeñas perturbaciones. En este caso, podemos despreciar el término de difusión superficial y la Ec. (3.49) (con ruido) se reduce a la ecuación KPZ, en donde la evolución de  $h$  presenta escalado cinético con un valor para el exponente de rugosidad,  $\alpha$ , de aproximadamente 0.38 [Barabási y Stanley 1995]. Por otro lado, si  $\nu_{av} < 0$ , entonces (3.45) se reduce a la ecuación de KS isótropa, ya discutida en el apartado 3.5.3, con nuevos coeficientes efectivos  $\nu_{av}$  y  $\lambda_{av}$ . El valor de estos coeficientes ha sido calculado en función de las distancias de la distribución de energía (3.1) y del ángulo de bombardeo en Frost (2002). En este trabajo se pone de manifiesto que, mientras que para el caso de incidencia normal se necesita que la anchura longitudinal,  $\sigma$ , sea menor que la transversal,  $\mu$ , para que se forme un patrón de puntos (es decir, para que se verifique  $\nu < 0$  y  $\lambda > 0$ , pues en el caso de  $\nu > 0$  no aparece el patrón, y si  $\lambda < 0$  se tiene un patrón de fosos), lo cual es poco frecuente para la mayoría de combinaciones ion/blanco, en el caso de incidencia oblicua y sustrato rotante existe un mayor rango de parámetros  $\sigma$  y  $\mu$  que hacen posible que  $\nu < 0$  y  $\lambda > 0$ , lo que induce la aparición de un patrón de puntos como el observado experimentalmente para la evolución de  $h$  en (3.49). Una limitación, sin embargo, tanto de la ecuación (3.49) como de (3.45) para describir los experimentos, es que, para tiempos largos, éstas no predicen la disposición hexagonal de los puntos sobre el plano.

### 3.5.5. Extensión de la teoría no lineal

En el trabajo de Kim *et al.* (2004) se extiende el modelo mostrado en la sección 3.5.1 hasta orden cuadrático en  $h$ ,  $\mathcal{O}(h^2)$ , y derivadas de orden cuarto,  $\mathcal{O}(\nabla^4 h)$ , para obtener una nueva ecuación para la evolución de  $h$  en el caso de incidencia normal de la forma

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \nabla^2 h - K \nabla^4 h + \lambda_1 (\nabla h)^2 + \lambda_2 \nabla^2 (\nabla h)^2 + \eta, \quad (3.50)$$

donde el nuevo coeficiente  $\lambda_2$  en función de las distancias,  $a$ ,  $\sigma$  y  $\mu$  de la distribución de energía (3.1) es proporcional a

$$\lambda_2 \propto \mu^2/2 + (3/8)(\mu/\sigma)^4(\sigma^2 - a^2), \quad (3.51)$$

y el resto de coeficientes coinciden con los obtenidos en el apartado 3.5.1.

Sin embargo, tal y como se demuestra en Castro y Cuerno (2005), debido a que  $\lambda_1$  es de la forma

$$\lambda_1 \propto (\mu^2/2a^2)(a^2/\sigma^2 - a^4/\sigma^4 - a^2/\mu^2), \quad (3.52)$$

para cualquier valor de  $a$ ,  $\sigma$  y  $\mu$ , los coeficientes  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  tienen el mismo signo y la ecuación (3.50) presenta modos en la banda inestable cuyos términos no lineales se cancelan exactamente (modos de cancelación) haciendo que la ecuación completa sea inestable para esos modos y que esta descripción continua no sea adecuada. Esto se comprueba fácilmente si escribimos (3.50) en el espacio de Fourier, a saber

$$\frac{\partial \hat{h}(\mathbf{k})}{\partial t} = (-\nu \mathbf{k}^2 - K \mathbf{k}^4) \hat{h}(\mathbf{k}) + (\lambda_1 - \lambda_2 \mathbf{k}^2) TF [(\nabla h)^2] + TF[\eta], \quad (3.53)$$

donde  $TF[f]$  representa la transformada de Fourier de la función  $f$  y  $\hat{h} = TF[h]$ . Si  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  tienen el mismo signo y  $\mathbf{k}^2 = \lambda_1/\lambda_2$ , las no linealidades se anulan, con lo que puede ocurrir que esta descripción no sea correcta. Para que el modelo matemático sea consistente debemos así tener en cuenta otros mecanismos físicos adicionales, tal y como se verá en el siguiente capítulo.

## 3.6. Otros modelos lineales

Además de las teorías continuas presentadas en las secciones anteriores, existen otros modelos que intentan describir algunas de las características no predichas por las ecuaciones de evolución mostradas hasta ahora.

Un importante mecanismo que no se ha tenido en cuenta para describir la evolución de la superficie es el flujo de la capa viscosa, la cual se forma frecuentemente sobre la intercara del material bombardeado e interviene como mecanismo adicional de relajación superficial. En los trabajos de Mayer, Chason y Howard (1994) y Chason *et al.* (1994), se propone la inclusión de un término viscoso que afecta a

la teoría lineal descrita anteriormente. En estos trabajos, la parte real de la relación de dispersión que domina el crecimiento de la amplitud de la inestabilidad en el transcurso del tiempo (ver apartado 3.3.2) toma la forma<sup>19</sup>

$$\mathcal{R}e(\omega) = -Fk - \nu k^2 - Bk^4, \quad (3.54)$$

donde  $\nu k^2$  y  $Bk^4$  son los términos de tensión y difusión superficial descritos en las secciones anteriores y  $Fk$  representa la velocidad de relajación debida al flujo viscoso, para la que se verifica  $F = \gamma'_s/\eta'_s$  con  $\gamma'_s$  la energía libre superficial y  $\eta'_s$  el coeficiente de viscosidad [Mullins 1959]. Si  $F \neq 0$  se modifica el máximo en la relación de dispersión, pudiendo incluso ocurrir que  $\mathcal{R}e(\omega) \leq 0$  para todo  $k$ , con lo que se eliminaría la inestabilidad morfológica y la aparición del patrón. A temperaturas altas ( $T \geq 523$  K en el experimento de Chason *et al.* (1994) para Ge bombardeado con  $\text{Xe}^+$  a 1 keV y  $\Phi_0 \sim 10^{12} - 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ) el sustrato se mantiene cristalino y no se produce una capa viscosa, por lo que domina el término de difusión superficial de origen térmico y la longitud de onda del patrón es inversamente proporcional a la raíz cuadrada del flujo, tal y como se dedujo en la sección 3.3.2. A bajas temperaturas ( $T \simeq 150$  K), el flujo viscoso es el responsable de la relajación de la superficie y puede incluso impedir la formación de estrías.

En el trabajo de Bradley y Cirlin (1996) se utiliza el argumento del flujo viscoso para predecir la morfología de un sustrato sometido a rotación y bombardeo oblicuo simultáneo. En este caso la relación de dispersión es de la forma

$$\mathcal{R}e(\omega) = -Fk - \nu_{av}k^2 - Bk^4, \quad (3.55)$$

donde, como ocurría en el apartado 3.5.4, puede ocurrir que para aquellos ángulos donde se tenía  $\nu_x > 0$  y  $\nu_y < 0$  y por tanto se formaban estrías paralelas a la proyección del haz cuando no se gira la muestra, con la rotación del sustrato se tenga  $\nu_{av} = (\nu_x + \nu_y)/2 > 0$ , con lo que se elimina la inestabilidad y se suprime la formación de las ondulaciones. De esta forma se obtiene una superficie más plana como se observa en los experimentos [Cirlin *et al.* 1991].

Otra teoría lineal que considera la existencia de una capa amorfa, pero en este caso para explicar el movimiento de las estrías, ha sido propuesta muy recientemente en Alkemade (2006). Aquí se propone un modelo para el movimiento inhomogéneo de una capa fina de flujo viscoso sobre una superficie de vidrio sometida a bombardeo con iones de  $\text{Ga}^+$  a 30 keV. Se predice el movimiento de las estrías paralelas a la dirección de la proyección del haz y se estima una velocidad uniforme próxima a la medida experimentalmente, una vez las ondulaciones se han desarrollado completamente.

<sup>19</sup>Por simplificar, consideraremos el caso isótropo en el cual  $\nu = \nu_x = \nu_y$ . Aquí  $k$  representa el módulo del vector  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ .

### 3.7. Comparación de la teoría actual con los experimentos, y limitaciones

Como se ha visto en el transcurso de este capítulo, las teorías actuales han permitido describir muchos de los principales resultados experimentales expuestos en el capítulo anterior. La teoría lineal de BH suministra una estimación de la longitud de onda del patrón de estrías y predice su orientación respecto al ángulo de bombardeo. Estos resultados han sido corroborados por numerosos experimentos [Navez, Sella y Chaperot 1962; Wittmaack 1990; Karen *et al.* 1995; Habenicht *et al.* 1999; Flamm, Frost y Hirsch 2001]. Además, según esta teoría, la amplitud del patrón crece exponencialmente en el transcurso del tiempo, como ha sido observado en Erlebacher *et al.* (1999). También ha sido comprobado experimentalmente en diversos estudios el carácter térmico de la difusión superficial, a través al aumento de la longitud de onda respecto a la temperatura [Erlebacher *et al.* 1999; Habenicht 2001; Brown y Erlebacher 2005], así como el decrecimiento de ésta con el flujo [Erlebacher *et al.* 1999] o con la energía de los iones [Brown y Erlebacher 2005], predichos a altas temperaturas en la sección 3.3.2. Además, ha permitido predecir la aparición de patrones con simetría rotacional para un determinado ángulo crítico diferente de la incidencia normal [Ziberi, Frost y Rauschenbach 2006; Tan *et al.* 2006]. Esta teoría necesita, sin embargo, la inclusión de términos no lineales para explicar, entre otras cosas, la saturación de la amplitud del patrón y la existencia de superficies rugosas autoafines con propiedades de rugosidad cinética [Chey, Nstrand y Cahill 1995; Eklund *et al.* 1991; Wang, Pechman y Weaver 1996; Smilgies *et al.* 1997; Chan y Wang 1998]. Cuando se extiende el desarrollo de BH a órdenes superiores aparecen términos difusivos inducidos por la erosión que justifican la aparición del patrón a bajas temperaturas y permiten explicar una dependencia diferente de la longitud de onda lineal respecto a los parámetros experimentales. En este caso, se obtiene que  $l_l$  es independiente de  $T$  [Carter y Vishnyakov 1996; Facsko, Kurz y Dekorsy 2001] y del flujo [Vajo, Doty y Cirlin 1996; Facsko, Kurz y Dekorsy 2001] y que aumenta cuando lo hace la energía [Karen *et al.* 1995; Vajo, Doty y Cirlin 1996; Flamm, Frost y Hirsch 2001; Facsko, Kurz y Dekorsy 2001; Ziberi *et al.* 2005]. La ampliación no lineal permite también explicar, de forma cualitativa, el movimiento de las estrías a velocidad no uniforme durante su proceso de formación, tal y como ha sido observado experimentalmente en Habenicht *et al.* (2002) y Alkemade (2006), y la separación temporal entre la etapa de evolución lineal y la etapa no lineal tras un tiempo  $t_c$ , en el cual la amplitud del patrón se estabiliza [Erlebacher *et al.* 1999]. La extensión de la teoría no lineal para el caso de un sustrato rotante, mostrada en el apartado 3.5.4, permite explicar por qué desaparecen las estrías y aparece una superficie rugosa más plana [Cirlin *et al.* 1991].

A pesar de que las teorías anteriores predicen muchas de las características experimentales, aún existen numerosas observaciones que no están descritas por estos modelos. Además de la agrupación de puntos o fosos en orden hexagonal,

lo cual ha sido comprobado en numerosos experimentos tanto para el caso de incidencia normal [Facsco *et al.* 1999; Gago *et al.* 2001; Facsco, Kurz y Dekorsy 2001; Bobek *et al.* 2003; Xu y Teichert 2004] como el de sustrato giratorio [Frost, Schindler y Bigl 2000; Frost *et al.* 2004], o el orden cuadrado encontrado en Frost *et al.* (2004) para altas temperaturas y blanco rotante, quizá el resultado experimental más importante que aún no ha sido explicado en el marco de la teoría actual es el hecho de que, frecuentemente, no se observa una longitud de onda fija cuya magnitud viene dada por los términos lineales y es independiente del tiempo, sino que, normalmente, ésta crece hasta alcanzar un máximo (tras lo cual, permanece constante) o aumenta indefinidamente [Carter y Vishnyakov 1996; Facsco *et al.* 1999; Gago *et al.* 2001; Flamm, Frost y Hirsch 2001; Habenicht *et al.* 2002; Gago *et al.* 2002; Bobek *et al.* 2003; Ozaydín *et al.* 2005; Toma *et al.* 2005; Brown y Erlebacher 2005]. Además, la teoría actual no explica por qué el orden se mantiene a distancias mucho mayores que el tamaño del patrón, como se encuentra en Ziberi *et al.* (2005) y Ziberi, Frost y Rauschenbach (2006), donde se mide la longitud de correlación  $\zeta$  y se obtiene que  $\zeta \simeq 10l_l$ . Tanto la ecuación (3.39), para incidencia oblicua, como (3.45), para incidencia normal, muestran un patrón desordenado, rugoso y autoafín a distancias mayores que  $l_l$ , lo cual no es compatible con el orden a distancias intermedias encontrado experimentalmente.

Otra de las limitaciones de las teorías anteriores es que no incorporan la existencia de una capa fluida de material amorfo [Umbach, Headrick y Chan 2001; Chini *et al.* 2003] que puede ser la responsable de que a bajas temperaturas la superficie sea menos rugosa e, incluso, que lleguen a desaparecer las estrías, tanto para el caso de incidencia oblicua sin rotación [Mayer, Chason y Howard 1994; Chason *et al.* 1994], como con rotación [Cirlin *et al.* 1991], tal y como se argumenta en algunos modelos en los que sí es tenida en cuenta (ver sección 3.6). A pesar de esto, el único efecto de esta capa amorfa no debe ser, sin embargo, la de aplanar la superficie, pues frecuentemente se encuentran patrones ordenados en experimentos donde se comprueba la existencia de esta película amorfa [Facsco *et al.* 1999; Gago *et al.* 2001; Frost *et al.* 2004; Ziberi *et al.* 2005; Gago *et al.* 2006]. De hecho, en Gago *et al.* (2006), se observa que la aparición de la capa de flujo viscoso parece ser la responsable del aumento del tamaño de los nanopuntos cuando disminuye la temperatura. En Alkemade (2006) donde sí se ha tenido en cuenta, este flujo ha permitido estimar una velocidad constante para el movimiento de las estrías sobre vidrio, próxima a la medida experimentalmente.

Debemos hacer notar que los modelos mostrados en este capítulo no consideran la posibilidad de que los átomos erosionados puedan, a su vez, al impactar de nuevo con la superficie, erosionar otros átomos, ni que parte del material erosionado se redeposite sobre la superficie y se mueva sobre ella. En la mayoría de las condiciones experimentales el primer efecto no es relevante, aunque sí parece serlo el segundo. Tan sólo una pequeña fracción de los átomos que rompen sus enlaces con la superficie son eliminados, la mayoría de ellos son redepositados y difunden sobre la superficie hasta que se fijan de nuevo al sustrato. Por ejemplo, en los resultados de Bringa, Nordlund y Keinonen (2001) basados en dinámica molecular

para oro bombardeado con  $\text{Xe}^+$  para  $\theta = 25^\circ$  y  $E = 10$  keV, aproximadamente sólo uno de cada diez átomos que abandonan la superficie son eliminados, el resto son redepositados. El hecho de que la erosión esté relacionada con la difusión, bien sea al redepositar nuevos átomos móviles, o bien por la creación de vacantes que difunden sobre la superficie [Ditchfield y Seebauer 2001], podría ser relevante a la hora de ampliar la descripción de este fenómeno y predecir algunas de las observaciones experimentales no contempladas en el marco teórico actual. Este asunto se tratará en el siguiente capítulo, donde se propondrá un modelo en el que la erosión y el número de partículas difusivas estarán acoplados.

### 3.8. Conclusiones

Tal y como se ha visto en el transcurso de este capítulo, se han hecho numerosos esfuerzos con el fin de explicar los resultados experimentales, ya sea mediante la utilización de modelos discretos y simulaciones de Monte Carlo (algunos de los cuales han sido revisados brevemente en la sección 3.1), como desde el punto de vista analítico, utilizando ecuaciones continuas para describir la evolución del perfil de la altura de la superficie. El objetivo principal ha sido caracterizar los mecanismos universales involucrados en la erosión, con independencia de las particularidades de las interacciones ion-sustrato, para poder describir de una forma general estos resultados. En este sentido, la extensión no lineal de la teoría de Bradley y Harper ha resultado ser la más completa pues, a pesar de sus limitaciones expuestas en la sección 3.7, captura muchas de las tendencias observadas experimentalmente. Asimismo, el hecho de que la evolución de la morfología sea análoga, al menos en primera aproximación lineal, cuando se consideran otras distribuciones para el depósito de la energía, tal y como se ha obtenido en el caso de cobre cristalino mostrado en la sección 3.4, indica que estos resultados no dependen de forma crucial de dichas interacciones y que son consistentes con las observaciones experimentales (similares en distintos tipos de materiales).

Además de presentar los conceptos y cálculos analíticos que permiten obtener una ecuación diferencial para la evolución de la superficie, en la sección 3.6, se han mostrado brevemente otros modelos basados en la existencia de una capa de flujo amorfo que intentan reproducir algunas características particulares no predichas en esta teoría. A pesar de ello, se hace necesario una teoría que incluya los resultados anteriores de forma sistemática y que permita explicar algunas de éstas y otras propiedades. Con este fin, en el capítulo siguiente se desarrolla un modelo en el que se tienen en cuenta mecanismos adicionales que permiten derivar algunas ecuaciones de evolución para la altura de la superficie que generalizan las propuestas hasta ahora y que presentan nuevos comportamientos.



# 4

---

## Modelos “hidrodinámicos” de erosión

---

Basándonos en las teorías fenomenológicas que describen las ondulaciones en la arena debidas a la acción del viento, propondremos un modelo con dos campos acoplados para describir la evolución de una superficie bombardeada con iones. En este modelo se incorporan nuevos mecanismos físicos que permiten a las partículas redepositarse y difundir sobre la superficie. A partir de un desarrollo de escalas múltiples en el umbral de la inestabilidad, obtendremos una única ecuación efectiva para la altura en el caso de incidencia oblicua, normal y de sustrato rotante.

### 4.1. Modelos de formación de ondulaciones en arena

En los dos capítulos anteriores nos hemos centrado en el proceso de erosión iónica y en la capacidad de esta técnica para modelar la superficie de un sólido. En esta sección hablaremos de otro fenómeno que ocurre a una escala *siete órdenes de magnitud* superior, la erosión eólica; más concretamente, la formación de ondulaciones en medios arenosos por la acción del viento. Debido a la diferencia de escalas, en principio podría parecer que ambos fenómenos no tienen ninguna relación; sin embargo, como se mostrará en este capítulo, la existencia de mecanismos erosivos y difusivos similares nos permitirán describir ambos procesos de una

forma parecida.

Una superficie plana de arena sometida a la acción del viento se convierte en un medio granular inestable sobre el que puede formarse atractivos patrones. Estos patrones se clasifican, dependiendo de su tamaño, en dunas (escalas grandes) u ondulaciones (escalas pequeñas). Las dunas son más difíciles de observar en la naturaleza debido a la gran cantidad de arena necesaria para su formación, pero las pequeñas ondulaciones son mucho más frecuentes, y se pueden encontrar, por ejemplo, en la arena de la playa. No debemos confundir estas estructuras con las ondulaciones subacuáticas pues, aunque la forma y tamaño de éstas son muy parecidas a las de origen eólico, los mecanismos que participan en su formación son diferentes. En esta sección nos ocuparemos de estas últimas y resumiremos de forma breve algunos modelos propuestos en la literatura para describir la aparición y evolución de estos patrones.



**Figura 4.1** — Ondulaciones en una duna arenosa debidas a la acción del viento. La distancia aproximada entre crestas es de 10 cm.

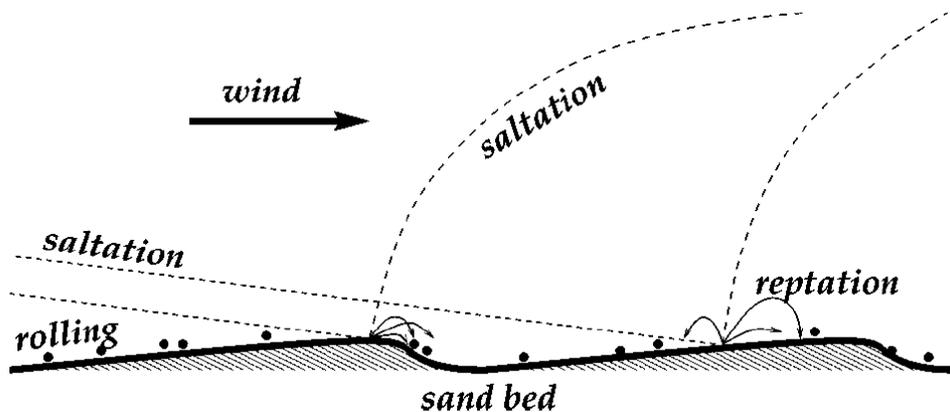
Inspirados en el trabajo original de Bagnold [Bagnold 1941] numerosos científicos han estudiado el fenómeno de la formación de las ondulaciones tanto teórica como experimentalmente.<sup>1</sup> A pesar de que la arena es un medio muy familiar, la comprensión de sus propiedades estáticas y dinámicas resulta un extraordinario reto para la comunidad científica que estudia los medios granulares. A diferencia de los materiales elásticos, viscoelásticos y de los fluidos newtonianos, no existe aún una teoría continua universal (como pueden ser las ecuaciones de Lamé o de Navier-Stokes) para describir este medio de una manera efectiva. En relación con la formación de las ondulaciones, las ideas de Bagnold sobre los mecanismos de transporte involucrados en el movimiento de la arena son, en general, aceptadas por la mayoría de los autores que han estudiado este fenómeno. En el siguiente apartado revisaremos estos conceptos.

---

<sup>1</sup>Ralph Alger Bagnold (3 de abril de 1896 - 28 de mayo de 1990), ingeniero, fue pionero en la exploración del desierto. Participó en la Primera guerra Mundial y fue el fundador del comando Long Range Desert Group del ejército británico durante la Segunda Guerra Mundial. Su libro “The Physics of Blow Sand and Desert Dunes” [Bagnold 1941] sigue siendo una referencia fundamental en los estudios sobre formación de estructuras arenosas.

### 4.1.1. Ideas generales del transporte eólico de arena

Existen dos mecanismos de transporte de material a lo largo de la dirección del viento. Los granos móviles pueden saltar o reptar sobre la superficie.<sup>2</sup> Los granos saltadores, que son los de mayor energía cinética, son eyectados desde su estado de reposo sobre la superficie debido al impacto de otro grano saltador que le comunica aproximadamente  $2/3$  de su energía cinética total (el resto les es transferida por el viento). La otra población involucrada en el transporte de masa son los granos reptadores. El impacto de un grano saltador sobre la superficie genera varios granos reptadores, los cuales se desplazan sobre el sustrato una longitud mucho menor que los saltadores y a los que el viento prácticamente no les aporta energía. Se estima que la energía de un grano reptador es algo menor que una décima parte la de la del grano saltador que se la ha transferido. En la figura 4.2 se esquematiza esta descripción.



**Figura 4.2** — Interacción entre los granos saltadores y reptadores. Los granos saltadores siguen largas trayectorias (líneas a trazos) y colisionan con la superficie con un ángulo de incidencia casi uniforme. La colisión provoca que algunos granos se despeguen de su posición fija en el sustrato y se desplacen una cierta distancia mucho más corta (líneas continuas) antes de que se detengan y se incorporen de nuevo a la base de arena. Tomada de Prigozhin (1999).

A partir del conocimiento de los mecanismos involucrados en el transporte de material, numerosos autores han explicado la formación de ondulaciones cuyas escalas temporales son mucho más lentas que las involucradas en el transporte. El primero de ellos fue el propio Bagnold, quien argumentó que la variación en la densidad del número de granos a lo largo de la superficie era la responsable de este fenómeno. De hecho, adelantó la idea de que la cantidad de granos reptadores es proporcional al número de granos saltadores que impactan en ese punto y, por

<sup>2</sup>Existe otra población de granos en suspensión, pero al no intervenir en el transporte de material, no se consideran en esta descripción.

tanto, para una pendiente opuesta a la dirección del viento el número de granos reptadores es mayor que para otra sombreada al efecto de las colisiones. De esta forma, si suponemos que la longitud media de reptado es menor que la amplitud de las ondulaciones, sobre una de éstas existe un mayor número de granos que reptan hacia arriba que los que lo hacen hacia abajo. Esto contribuye a que aumente la amplitud de la ondulación y provoca una inestabilidad morfológica.

#### 4.1.2. Descripción analítica del modelo y ecuaciones efectivas para la evolución de la altura

Existen otros modelos que abordan el fenómeno de la formación de patrones sobre arena, pero aquí nos centraremos en los desarrollados a partir de las ideas propuestas en Bouchaud *et al.* (1995), de origen fundamentalmente fenomenológico. En este trabajo se propone una descripción continua para dos tipos de poblaciones: la de los granos reptadores y la de los granos inmóviles que forman el sustrato. La altura local de granos móviles se representa por  $R(x, t)$ , mientras que la altura de la base inmóvil es  $h(x, t)$ , donde  $x$  es la coordenada en la dirección del viento. En general, en estos modelos suele considerarse por simplicidad el problema unidimensional, donde el sistema presenta invariancia traslacional en la dirección transversal a la dirección del viento,  $y$ . No intervienen en esta descripción los granos saltadores, cuyo número se considera constante y que sólo sirven para comunicarle una determinada cantidad de momento en la dirección del viento a la población reptadora. Estos últimos, tras desplazarse una cierta longitud media sobre la superficie, pierden su energía cinética y permanecen inmóviles incorporándose a la base del sustrato. De esta forma, ambos campos,  $R$  y  $h$ , se acoplan a través de las siguientes ecuaciones

$$\partial_t R = -v_r \partial_x h + \mathcal{D}_r \partial_x^2 h + \Gamma(R, h), \quad (4.1)$$

$$\partial_t h = -\Gamma(R, h), \quad (4.2)$$

donde  $v_r$  es la velocidad media de los granos reptadores debido a la cantidad de momento transferida por el impacto de los granos saltadores y  $\mathcal{D}_r$  es un término difusivo que da cuenta de la dispersión en las velocidades. La función  $\Gamma$  describe la tasa de granos del sustrato inmóvil que se convierten en reptadores o viceversa. El hecho de que la cantidad de átomos que son arrancados de  $h$  e incorporados a  $R$  sea la misma pone de manifiesto la conservación de material en este modelo. Por simplicidad hemos definido  $R$  y  $h$  como alturas; esto implica que  $\Gamma$  tiene dimensiones de velocidad. La tasa neta de intercambio de material,  $\Gamma$ , puede separarse en una velocidad de erosión del sustrato,  $\Gamma^{ex}$ , que da cuenta del número de granos de la base inmóvil que se incorporan al flujo de granos reptadores, y otra,  $\Gamma^{ad}$ , proporcional a la cantidad de granos reptadores que se depositan sobre la base  $h$ , según

$$\Gamma = \Gamma^{ex} - \Gamma^{ad}. \quad (4.3)$$

Las formas de  $\Gamma^{ex}$  y  $\Gamma^{ad}$  están basadas en argumentos fenomenológicos y se relacionan con los diferentes procesos físicos considerados, los cuales pueden diferir de un trabajo a otro.

En general, la velocidad de adición se supone proporcional a la densidad de granos reptadores,  $R$ , y dependiente de la geometría del sustrato según

$$\Gamma^{ad} = R\gamma_0 (1 + \gamma_1 \partial_x h + \gamma_2 \partial_x^2 h), \quad (4.4)$$

donde  $\gamma_0^{-1}$  depende de la fuerza del viento y representa el tiempo típico para un sustrato plano durante el cual un grano reptador se mueve sobre la superficie antes de ser incorporado. Si suponemos que este tiempo aumenta en aquellos puntos donde la pendiente se enfrenta a la dirección del viento ( $\partial_x h > 0$ ), entonces  $\gamma_1$  debe ser negativo con el fin de que se deposite mayor cantidad de material en las pendientes a sotavento. En este caso, en las pendientes enfrentadas al viento se deposita menor cantidad de material, lo que provoca que se produzca una inestabilidad similar a la descrita por Bagnold y que comentaremos a continuación. A veces, dependiendo de la fuerza de arrastre del viento, se ha estudiado también el caso de  $\gamma_1 > 0$ . Por otro lado, en general se espera que se deposite un mayor número de granos en los valles, donde  $\partial_x^2 h > 0$ , que en las crestas, donde  $\partial_x^2 h < 0$ , con lo cual se supone  $\gamma_2$  positivo. Éste es el mecanismo de adición considerado en Terzidis, Claudin y Bouchaud (1998), Valance y Rioual (1999) y Csehók *et al.* (2000).

En los trabajos anteriores se propone que la velocidad con la que los granos de la base se disocian de la base inmóvil para unirse a la población reptadora,  $\Gamma^{ex}$ , también depende de la geometría del sustrato. En Terzidis, Claudin y Bouchaud (1998) se propone

$$\Gamma^{ex} = \alpha_0 (1 + \alpha_1 \partial_x h + \alpha_2 \partial_x^2 h), \quad (4.5)$$

donde se considera que se excavan un mayor número de granos en las pendientes opuestas a la dirección del viento y en las crestas, y por lo tanto,  $\alpha_1 > 0$  y  $\alpha_2 < 0$ . El hecho de que exista una mayor cantidad de granos reptadores moviéndose hacia arriba debido al signo positivo de  $\alpha_1$  tiende a inestabilizar el sistema al provocar que se deposite mayor cantidad de material en las crestas que en los valles (como fue descrito por Bagnold), mientras que el efecto de que se erosionen más rápidamente los picos, debido al signo negativo de  $\alpha_2$ , actúa en la dirección contraria. En el trabajo citado sólo se estudia la estabilidad lineal del sistema de ecuaciones (4.1)-(4.5), sin derivar una ecuación efectiva para la altura del sustrato tal y como se hace en posteriores publicaciones [Valance y Rioual 1999; Csehók *et al.* 2000]. Además, en estas últimas referencias se propone una tasa de erosión que puede depender de dos mecanismos: la colisión directa de los granos saltadores, cuyo flujo depende de la geometría del sustrato, y otro término correspondiente a la erosión directa por parte del viento. Este último mecanismo tiene el mismo efecto que el término  $\alpha_2$  propuesto en (4.5). De esta forma, en Valance y Rioual (1999), se obtiene una  $\Gamma^{ex}$  equivalente a (4.5).

Supuesto  $\mathcal{D}_r = 0$ , en el umbral de inestabilidad y tras un desarrollo de escalas

múltiples, se deriva la siguiente ecuación no lineal para la evolución de  $h$ :

$$\partial_t h = -\nu \partial_x^2 h + \Omega \partial_x^3 h - K \partial_x^4 h + \lambda_2 \partial_x^2 (\partial_x h)^2. \quad (4.6)$$

Los detalles de la derivación no se mostrarán en esta memoria, pero la estrategia a seguir es similar a la que se mostrará en la sección 4.2 cuando se derive la ecuación efectiva para la altura de la superficie en el caso de erosión iónica. Esta ecuación es similar a la ecuación de Benney mostrada en la sección 1.5.5, salvo por el carácter conservado de la no linealidad correspondiente al coeficiente  $\lambda_2$ . Esto es consecuencia de que en el sistema de ecuaciones propuesto (4.1)-(4.1) la cantidad de granos de arena se conserva.

En el trabajo de Csahók *et al.* (2000) se extiende la dependencia de la tasa de erosión hasta orden no lineal para obtener

$$\Gamma^{ex} = \alpha_0 \left[ 1 + \alpha_1 \partial_x h - \alpha_2 \partial_x^2 h - \alpha_3 (\partial_x h)^2 - \alpha_4 (\partial_x h) (\partial_x^2 h) \right], \quad (4.7)$$

y, de forma análoga al caso anterior, se deriva una ecuación efectiva para  $h$ . Ésta es

$$\partial_t h = -\nu \partial_x^2 h + \Omega \partial_x^3 h - K \partial_x^4 h + \xi (\partial_x h) (\partial_x^2 h) + \lambda_2 \partial_x^2 (\partial_x h)^2. \quad (4.8)$$

De nuevo, salvo por el carácter conservativo de la no linealidad correspondiente al coeficiente  $\lambda_2$ , esta ecuación es muy similar a la ecuación de Korteweg- de Vries modificada por disipación (1.34), mostrada en la sección 1.5.5. En el caso de que el viento sea fuerte y se desprece su efecto erosivo directo, se tiene  $\xi = 0$  y, por tanto, (4.8) se reduce a (4.6).<sup>3</sup>

Las ecuaciones (4.6) y (4.8) predicen una evolución para la superficie similar a la obtenida en los experimentos [Andreotti, Claudin y Pouliquen 2006], en la cual se observa la aparición de un patrón estriado en las etapas iniciales, seguida de un ensanchamiento en el tamaño de las ondulaciones (en inglés, “coarsening”), a la vez que se desplazan en la dirección del viento. Una de las limitaciones de estos modelos teóricos es que no explican la saturación en el crecimiento de las estrías observada experimentalmente.

Existen otros trabajos similares a los presentados en esta sección, pero con algunas características diferentes. Por ejemplo, en el trabajo de Misbah y Valance (2003) la cantidad de material no se conserva y, tras un análisis débilmente no lineal similar, se obtiene una ecuación efectiva para la evolución de  $h$  que coincide con la ecuación de Benney presentada en la sección 1.5.5. Ésta es

$$\partial_t h = -\nu \partial_x^2 h + \Omega \partial_x^3 h - K \partial_x^4 h + \lambda_1 (\partial_x h)^2, \quad (4.9)$$

donde, en vez de la no linealidad conservada correspondiente al coeficiente  $\lambda_2$  de (4.6), aparece un término no conservado responsable de que, a diferencia de

<sup>3</sup>El valor de los coeficientes en función de los parámetros experimentales puede consultarse en las correspondientes publicaciones.

los casos anteriores, la longitud de onda del patrón no crezca en el transcurso del tiempo y éste se desordene en alturas.

En el estudio de Makse (2000) se propone un modelo discreto basado en la formulación continua descrita anteriormente donde, además, se tiene en cuenta la posibilidad de que los granos tengan diferentes tamaños o rugosidad. Por otro lado, existen también otros trabajos teóricos en los que se deriva una ecuación efectiva para la evolución de la superficie basándose en argumentos geométricos y leyes de conservación [Csahók, Misbah y Valance 1999].

## 4.2. Erosión iónica: modelos hidrodinámicos

En esta sección mostraremos las descripciones teóricas aplicadas a la erosión iónica que se han basado en algunas de las ideas introducidas en los modelos anteriores. Estos estudios [Aste y Valbusa 2004; Aste y Valbusa 2005; Castro *et al.* 2005; Muñoz-García, Castro y Cuerno 2006] presentan algunas semejanzas con las descripciones mostradas en la sección previa, pero, necesariamente, también tienen en cuenta algunas particularidades.

Probablemente, el lector ya haya notado que existen numerosas similitudes entre los mecanismos que participan en los procesos de erosión eólica e iónica. En los dos casos existe un flujo que puede considerarse uniforme de partículas (granos saltadores e iones) que inciden sobre un sustrato con gran energía cinética y ángulo de incidencia constante arrancando material del mismo, la mayor parte del cual se redeposita para moverse con una energía menor antes de ser de nuevo incorporado a la base inmóvil. Como se ha señalado en la sección anterior y en los capítulos precedentes, en ambos casos se producen patrones de formas parecidas y cuyas longitudes características y escalas temporales son mucho mayores que las que intervienen en los mecanismos responsables de la erosión y difusión de las partículas. Además, en determinadas condiciones, se observa que estos patrones, a pesar de la diferencia de tamaños, muestran una evolución parecida. Suele medirse un crecimiento del tamaño de la ondulación en el transcurso del tiempo a la vez que un desplazamiento espacial. En ambos casos hemos de tener en cuenta la morfología local para poder describir de forma adecuada los procesos de excavación, difusión y adsorción.

Existen, sin embargo, notables diferencias. Mientras que en la mayoría de los modelos de arena la cantidad de material se considera constante, en el caso de la erosión iónica una porción del material arrancado del sustrato es eliminado irreversiblemente. Otra diferencia fundamental es el origen de la inestabilidad morfológica. Mientras que en el caso de la erosión eólica ésta se debe a que existe una mayor cantidad de granos reptadores que ascienden sobre las pendientes más expuestas al viento, en el caso de los iones su origen se debe a que se erosiona mayor cantidad de material en el fondo de las depresiones que en los picos. Como consecuencia de esto, si el “viento” fuese vertical al sustrato, no se formaría ningún patrón, mientras que esto sí puede ocurrir en el caso de la erosión iónica. Además, los mecanismos

involucrados en el movimiento de las partículas son muy diferentes. Los granos sólo se mueven en la dirección del viento y su energía se debe exclusivamente a la fuerza de aquel. En el caso de los átomos, en las condiciones experimentales más comunes, la cantidad de momento que le suministran los iones es mucho menor que la de origen térmico y el movimiento de estos no se produce sólo en la dirección de la proyección del haz.<sup>4</sup>

#### 4.2.1. Estudio lineal

En los trabajos de Aste y Valbusa (2004) y Aste y Valbusa (2005) se propone un sistema de ecuaciones acopladas para describir la altura del perfil del sustrato,  $h$ , y el grosor de una capa móvil “fundida”,  $R$ . La diferencia fundamental entre ambos trabajos es que en Aste y Valbusa (2004) se considera un sistema unidimensional o isótropo, mientras que en Aste y Valbusa (2005) se amplía al caso bidimensional. En ambas publicaciones se proponen las siguientes ecuaciones para describir la evolución de  $h$  y  $R$ ,<sup>5</sup>

$$\partial_t h = -\Gamma^{ex}(R, h) + \Gamma^{ad}(R, h), \quad (4.10)$$

$$\partial_t R = -\nabla J(R, h) + (1 - \phi)\Gamma^{ex}(R, h) - \Gamma^{ad}(R, h), \quad (4.11)$$

donde  $\Gamma^{ex}$  es la tasa de átomos excavados por el bombardeo,  $\phi$  representa la fracción de átomos que tras ser eyectados se dispersan en la atmósfera y se pierden,  $(1 - \phi)$ , por tanto, representa la fracción de átomos arrancados que son redepositados en la superficie para difundir sobre ella, y  $\Gamma^{ad}$  es la velocidad con la que estos átomos móviles se adhieren al sustrato para permanecer fijos en él. El término  $\nabla J(R, h)$  representa la corriente de átomos sobre la superficie, donde  $J(R, h)$  se escribe como

$$J(R, h) = \mathcal{K}R\nabla(\nabla^2 h) + S_{ES}R \frac{\nabla h}{1 + (\alpha_{ES}\nabla h)^2} + vR - D\nabla R. \quad (4.12)$$

Se proponen varios mecanismos responsables de esta corriente: el primer sumando en (4.12) se corresponde con la variación del potencial químico local que tiende a aplanar la superficie desplazando los átomos hacia las depresiones; el segundo se debe a la corriente inducida por la barrera de Erlich-Schowoebel y se opone al anterior, donde  $S_{ES}$  es un parámetro que cuantifica la importancia de este mecanismo y  $\alpha_{ES}$  es una constante asociada con su longitud característica; el tercer término es una velocidad de arrastre debida al impacto de los iones; y el último sumando representa un coeficiente de dispersión asociado con el movimiento aleatorio de origen térmico. El hecho de que el movimiento de los átomos “reptadores” dependa de la geometría de  $h$  representa una sustancial diferencia respecto a los modelos de arena. Por otro lado, la forma de la velocidad de excavación y adición es similar

<sup>4</sup>Recordemos que la frecuencia con la que un ion impacta en un determinado átomo de la superficie es mucho menor que la de los eventos difusivos.

<sup>5</sup>Por simplicidad mostramos el caso unidimensional presentado en Aste y Valbusa (2004).

a la propuesta allí. En los trabajos de Aste y Valbusa se proponen las expresiones analíticas más generales y simples posibles que tienen en cuenta la dependencia lineal de estas funciones con la geometría local de la superficie, sin entrar en detalle en los mecanismos físicos responsables de dichos términos. De esta forma, se proponen

$$\Gamma^{ex} = \alpha_0 (1 + \alpha_1 \partial_x h + \alpha_2 \partial_x^2 h), \quad (4.13)$$

$$\Gamma^{ad} = R\gamma_0 (1 + \gamma_1 \partial_x h + \gamma_2 \partial_x^2 h), \quad (4.14)$$

donde, a diferencia del caso de las arenas donde el término  $\alpha_2$  era negativo y por tanto estable, en el caso de la erosión iónica  $\alpha_2$  es positivo y responsable de que se erosionen más los valles que los picos.

En los trabajos Aste y Valbusa (2004) y Aste y Valbusa (2005) se limitan a estudiar la estabilidad lineal del sistema (4.10)-(4.11), mostrándose en el segundo de ellos que el vector de onda que hace máxima la relación de dispersión puede orientarse en cualquier dirección dependiendo de los valores de los parámetros introducidos en su modelo. Además, otra de sus limitaciones es que, en el caso de que no exista redepósito ( $\phi = 1$ ), la relación de dispersión que obtienen es inestable para las escalas más pequeñas, con lo que el problema a orden lineal estaría mal planteado.

#### 4.2.2. Estudio no lineal

En las publicaciones Castro *et al.* (2005) y Muñoz-García, Castro y Cuerno (2006) se parte de las ideas anteriores y se proponen mecanismos alternativos a los propuestos en Aste y Valbusa (2004) y Aste y Valbusa (2005) para la difusión, erosión y adición en materiales amorfos o amorfizables. Partiendo de un sistema de ecuaciones similar a (4.10)-(4.11), pero introduciendo también términos no lineales en la velocidad de excavación, se realiza un análisis débilmente no lineal y un desarrollo de escalas múltiples que permiten obtener, al igual que se hacía en los modelos para arenas, una ecuación efectiva para la evolución de la altura del sustrato. En Castro *et al.* (2005) se estudia el caso isótropo, es decir, cuando se bombardea perpendicularmente la superficie, y se propone una tasa de erosión basada en argumentos geométricos donde se tiene en cuenta la posibilidad de que los átomos erosionados impacten con la superficie y erosionen a su vez otros átomos directamente (conocido como “knock-on sputtering” en inglés). En Muñoz-García, Castro y Cuerno (2006) se estudian el caso más general anisótropo (incidencia oblicua) y el caso de sustrato rotante, y se adopta la expresión obtenida en la sección 3.5.1 para describir la dependencia de la tasa de erosión con la geometría local, la cual relaciona de forma explícita  $\Gamma^{ex}$  con los parámetros experimentales. También se considera una expresión para  $\Gamma^{ad}$  algo diferente a la propuesta en Castro *et al.* (2005) y se desprecia la cantidad de momento transmitida a los átomos superficiales en la dirección del haz. En adelante se mostrarán en detalle el modelo general anisótropo y los cálculos analíticos que nos permiten obtener una ecuación efectiva no lineal para la evolución de  $h$ .

#### 4.2.2.1. Conceptos generales del modelo y descripción analítica

Al igual que ocurría en el apartado 4.2.1, y a diferencia de lo que ocurría en la mayoría de los modelos eólicos, en la erosión iónica la cantidad de material no se conserva. De nuevo definiremos la fracción de átomos excavados que son eliminados como  $\phi$ . Las ecuaciones dinámicas que acoplan el grosor de la capa superficial de átomos móviles,  $R(\mathbf{x}, t)$  (relacionado con la densidad de adátomos difusivos a través del volumen atómico) y la altura de la superficie bombardeada sobre un plano de referencia,  $h(\mathbf{x}, t)$ , vienen dadas en nuestro caso por

$$\partial_t R = (1 - \phi)\Gamma^{ex} - \Gamma^{ad} + D\nabla^2 R, \quad (4.15)$$

$$\partial_t h = -\Gamma^{ex} + \Gamma^{ad}. \quad (4.16)$$

En adelante, se definirá el plano  $xy$  como el de la superficie plana original sin bombardear en el sistema de referencia del laboratorio, donde el eje  $\hat{x}$  se encuentra en la dirección de la proyección del haz sobre este plano. En las ecuaciones (4.15) y (4.16),  $\Gamma^{ex}$  representa la tasa de átomos excavados del sustrato inmóvil, los cuales pueden ser eliminados o añadirse a la corriente de átomos difusivos con probabilidad  $(1 - \phi) = \bar{\phi}$ . De esta forma,  $\bar{\phi}$  se define como la fracción de átomos redepositados. Si  $\bar{\phi} = 0$ , todos los átomos erosionados serán eliminados, mientras que si  $\bar{\phi} = 1$  todos se redepositarán. En contraste con el mecanismo de excavación, existe un mecanismo de condensación representado por  $\Gamma^{ad}$ , que da cuenta de la velocidad con la que los adátomos difusivos se incorporan al sustrato. En este modelo se desprecia la cantidad de momento transmitida a los átomos superficiales en la dirección de la proyección del haz por los iones y, a diferencia del modelo de Aste y Valbusa, sólo se considera un termino difusivo para el transporte de masa sobre la superficie, que en el caso de materiales amorfos es isótropo y viene caracterizado por la constante  $D$  de origen térmico.

Otra de las aportaciones originales de nuestro modelo es considerar una determinada fracción de átomos móviles no nula incluso en ausencia de excavación ( $\Gamma^{ex} = 0$ ) o redepósito ( $\bar{\phi} = 0$ ). En este caso, el grosor de esta capa para una superficie plana viene dado por la constante  $R_{eq}$  introducida más abajo, que puede tener un origen térmico. Debemos señalar que, aunque por ahora estamos hablando de eventos discretos de difusión o redepósito para átomos, se puede pensar en el campo  $R$  como una capa fluida viscosa cuyo grosor depende en principio de forma continua de la velocidad a la que se genera ( $\bar{\phi}\Gamma^{ex}$ ) o se destruye ( $\Gamma^{ad}$ ) en cada punto. Estas velocidades, a su vez, dependen de la geometría de la base del sustrato. Por ejemplo, en Muñoz-García, Castro y Cuerno (2006) se propone la siguiente expresión para el mecanismo de adsorción:

$$\Gamma^{ad} = \gamma_0 [R(1 + \gamma_{2x}\partial_x^2 h + \gamma_{2y}\partial_y^2 h) - R_{eq}], \quad (4.17)$$

donde  $\gamma_0^{-1}$  representa el tiempo típico para una superficie plana en el que los átomos se adhieren a la base inmóvil y  $\gamma_{2x}, \gamma_{2y} \geq 0$  describen cómo ese tiempo puede modificarse dependiendo de la curvatura del sustrato, de forma que los eventos de

adsorción sean más frecuentes en los valles (donde por ejemplo  $\partial_x^2 h > 0$ ) que en los picos. Esta velocidad de adición es parecida a la propuesta en los modelos para arenas de la sección 4.1, donde la tasa de incorporación de granos era proporcional a  $R$ . Se debe notar, sin embargo, que en esta expresión el grosor de la capa móvil completa sólo se ve afectado por las curvaturas de la base inmóvil y no por la pendiente, a diferencia de lo que ocurría en los modelos para las arenas donde los efectos del viento y la gravedad obligaban a considerar esta última, y a diferencia de Aste y Valbusa (2004) y Aste y Valbusa (2005) donde se tiene en cuenta sin que se le asocie ningún origen físico. Como se demostrará posteriormente, el grosor de la capa móvil sólo se ve alterado ligeramente respecto a su valor de equilibrio,  $R_{eq}$ , con lo que también se puede considerar una velocidad de condensación  $\Gamma^{ad}$  equivalente, y análoga a la conocida fórmula de Gibbs-Thompson, a saber,

$$\Gamma^{ad} = \gamma_0 [R - R_{eq}(1 - \gamma_{2x}\partial_x^2 h - \gamma_{2y}\partial_y^2 h)]. \quad (4.18)$$

Usando tanto (4.17) como (4.18), se reproduce el efecto de la evaporación-condensación propuesto por Mullins presentado en la sección 1.5.1, que tiende a aplanar la superficie [Mullins 1957]. De hecho, si consideramos que no existe erosión ( $\Gamma^{ex} = 0$ ), tal y como se indicó anteriormente se tiene una densidad constante de partículas difusivas,  $R_{eq}$ , y para las dos expresiones de  $\Gamma^{ad}$  la ecuación (4.16) se reduce a

$$\partial_t h = \gamma_0 R_{eq} (\gamma_{2x}\partial_x^2 h + \gamma_{2y}\partial_y^2 h), \quad (4.19)$$

que recupera la formulación propuesta por Mullins para la evolución de la altura de la superficie cuando esta relaja exclusivamente por evaporación-condensación, donde la variación en la altura de una superficie debida a este efecto es proporcional a la cantidad de átomos emitidos por unidad de tiempo en equilibrio (análogo en nuestro modelo a  $\gamma_0 R_{eq}$ ) y a un término de tensión superficial que cuantifica el efecto de la curvatura en ese punto, que en nuestro modelo se corresponde con  $\gamma_{2x}\partial_x^2 h + \gamma_{2y}\partial_y^2 h$ . Por otro lado, como se mostrará más adelante, en ausencia de erosión, la difusión de los átomos sobre la superficie caracterizada por  $D$  reproduce también la ecuación de evolución para  $h$  propuesta por Mullins para una superficie que relaja por difusión superficial.

Como se ha visto en los capítulos 2 y 3, en general la velocidad a la que el material es arrancado de la superficie depende de las condiciones experimentales, como el ángulo de incidencia, los tipos de iones y sustrato, energía, flujo, etc. En el capítulo anterior se estudió en detalle esta dependencia y se obtuvo una expresión analítica para la velocidad de excavación en función de la geometría local. Aquí adoptaremos los argumentos mostrados allí para proponer una expresión para  $\Gamma^{ex}$  similar a (3.39), donde no tendremos en cuenta algunos términos de orden superior en derivadas cuya inclusión será discutida más adelante. Ésta queda

$$\Gamma^{ex} = \alpha_0 [1 + \alpha_{1x}\partial_x h + \alpha_{2x}\partial_x^2 h + \alpha_{2y}\partial_y^2 h + \alpha_{3x}(\partial_x h)^2 + \alpha_{3y}(\partial_y h)^2 + (\partial_x h)(\alpha_{4x}\partial_x^2 h + \alpha_{4y}\partial_y^2 h)], \quad (4.20)$$

donde los coeficientes se relacionan con los de la sección 3.3.2 dados en (3.25) y los de 3.5.1 según

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= v_0, & \alpha_{1x} &= -\gamma_x/v_0, & \alpha_{2x,y} &= -\nu_{x,y}/v_0, \\ \alpha_{3x,y} &= -\lambda_{x,y}/v_0, & \alpha_{4x,y} &= -\xi_{x,y}/v_0.\end{aligned}\quad (4.21)$$

Se obtiene así una relación entre los coeficientes propuestos en nuestro modelo y los parámetros experimentales. El parámetro  $\alpha_0$  representa la velocidad de erosión para una superficie plana. Como ocurría en (3.39), debemos notar la pérdida de simetría de reflexión en el eje  $\hat{x}$ , pero no en la dirección  $\hat{y}$ , como consecuencia de la anisotropía introducida por el bombardeo oblicuo que desaparece (la anisotropía) a incidencia normal.

Antes de analizar la estabilidad lineal del sistema (4.15)-(4.16) y estudiar su solución plana, vamos a recordar los órdenes de magnitud de los parámetros involucrados en nuestra descripción. Recordando que para una superficie plana  $\alpha_0 = v_0 = \Phi_0 S/n_v$ , y teniendo en cuenta que los flujos típicos son del orden de  $\Phi_0 = 10^{12}$ - $10^{17}$  iones  $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ , que el rendimiento de erosión,  $S$ , para energías del orden del keV es del orden de la unidad y que  $n_v \simeq 10^{-1} \text{nm}^{-3}$  (para un radio atómico algo menor de 5 Å), podemos estimar  $\alpha_0 \simeq 10^{-1} - 10^4 \text{nm s}^{-1}$ . Por otro lado, los tiempos típicos entre eventos de condensación son del orden del nanosegundo ( $\gamma_0 \simeq 10^9 \text{s}^{-1}$ ) y no parecen verse alterados por los efectos del bombardeo, tal y como se indica en Ditchfield y Seebauer (2001). Esto nos permite definir una longitud pequeña que denominaremos  $\epsilon = \alpha_0/\gamma_0 \simeq 10^{-5} - 10^{-10} \text{nm}$  y que refleja la diferencia en escalas temporales entre los eventos de erosión y adsorción. En la publicación anterior se mide también la difusividad para un sustrato sometido a bombardeo y se obtiene  $D \simeq 10^5 \text{nm}^2 \text{s}^{-1}$ , la cual da una idea del orden de magnitud espacial del fenómeno difusivo y será de utilidad en el siguiente apartado.

#### 4.2.2.2. Solución plana y análisis de estabilidad lineal

Las ecuaciones (4.15) y (4.16) para un sustrato plano, tanto si consideramos  $\Gamma^{ad}$  dado por (4.17) ó (4.18), se reducen a

$$\partial_t R^p = \epsilon \bar{\phi} \gamma_0 - \gamma_0 [R^p - R_{eq}], \quad (4.22)$$

$$\partial_t h^p = -\epsilon \gamma_0 + \gamma_0 [R^p - R_{eq}], \quad (4.23)$$

cuya solución para  $R^p$  puede obtenerse integrando (4.22); suponiendo  $R(t=0) = R_{eq}$ , se tiene

$$R^p(t) = R_{eq} + \epsilon \bar{\phi} (1 - e^{-\gamma_0 t}). \quad (4.24)$$

De aquí se deduce que, tras un tiempo breve (del orden de  $\gamma_0^{-1}$ ),  $R^p$  se hace constante e igual a  $R_{eq}$ , más una pequeña altura del orden de  $\epsilon$  proveniente del redepósito (de ahí el factor  $\bar{\phi}$ ). Tal y como se indicó en el apartado anterior, incluso en ausencia de redepósito ( $\bar{\phi} = 0$ ), existe una fracción intrínseca de material móvil proporcional a  $R_{eq}$ . Como consecuencia de las diferentes escalas temporales entre

la erosión y la difusión, la cantidad de material incorporado a la capa móvil debido a la erosión es pequeña en comparación con  $R_{eq}$  y, por tanto,  $R^p \approx R_{eq}$ . Si extendemos esta aproximación a las velocidades de adsorción se tiene que (4.17) y (4.18) son equivalentes.<sup>6</sup> En adelante consideraremos exclusivamente (4.18) ya que simplifica, en parte, los cálculos analíticos.

Si sustituimos en (4.23) el valor de  $R^p(t)$  dado por (4.24), se obtiene cómo evoluciona la altura de una superficie plana. Si suponemos que  $h(t = 0) = 0$ , se tiene

$$h^p(t) = -\epsilon\phi\gamma_0 t + \epsilon\bar{\phi} (e^{-\gamma_0 t} - 1), \quad (4.25)$$

donde, tras un tiempo del orden de  $\gamma_0^{-1}$ , el perfil retrocede con velocidad uniforme  $\epsilon\phi\gamma_0$ .

A continuación, analizaremos la estabilidad lineal del sistema con el fin de estudiar cómo se amplifica o elimina en el transcurso del tiempo una pequeña perturbación de la solución plana. Escribamos<sup>7</sup>

$$R(\mathbf{x}, t) = R^p(t) + R^l(\mathbf{x}, t), \quad (4.26)$$

$$h(\mathbf{x}, t) = h^p(t) + h^l(\mathbf{x}, t), \quad (4.27)$$

donde se consideran perturbaciones periódicas de la forma

$$R^l(\mathbf{x}, t) = R_0^l e^{i\mathbf{k}\mathbf{x} + \omega_{\mathbf{k}} t}, \quad (4.28)$$

$$h^l(\mathbf{x}, t) = h_0^l e^{i\mathbf{k}\mathbf{x} + \omega_{\mathbf{k}} t}. \quad (4.29)$$

Sustituyendo (4.26) y (4.27) en las ecuaciones (4.15) y (4.16) y despreciando los términos cuadráticos en  $R^l$  y  $h^l$ , se obtiene el siguiente sistema lineal homogéneo para  $R_0^l$  y  $h_0^l$

$$\begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{k}} + \gamma_0 + D\mathbf{k}^2 & -\bar{\phi}\Gamma_l^{ex} + \Gamma_l^{ad} \\ -\gamma_0 & \omega_{\mathbf{k}} + \Gamma_l^{ex} - \Gamma_l^{ad} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_0^l \\ h_0^l \end{pmatrix} = 0, \quad (4.30)$$

donde

$$\Gamma_l^{ex} = \epsilon\gamma_0 (\alpha_{1x} i k_x - \alpha_{2x} k_x^2 - \alpha_{2y} k_y^2), \quad (4.31)$$

$$\Gamma_l^{ad} = -\gamma_0 R_{eq} (\gamma_{2x} k_x^2 + \gamma_{2y} k_y^2). \quad (4.32)$$

Este sistema sólo admite solución distinta de la trivial si el determinante de la matriz de coeficientes es cero; esto nos permite obtener una expresión para la relación de dispersión,  $\omega_{\mathbf{k}}$ , como solución de la siguiente ecuación compleja de segundo orden:

$$\omega_{\mathbf{k}}^2 + \omega_{\mathbf{k}}(a + ib) + (c + id) = 0, \quad (4.33)$$

<sup>6</sup>Hemos comprobado que para ambas expresiones se obtiene una ecuación efectiva equivalente para la evolución de  $h$ .

<sup>7</sup>Para simplificar la notación hemos escrito  $\mathbf{x} = (x, y)$  y  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ . En adelante también consideraremos  $k = |\mathbf{k}|$ .

donde los coeficientes  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $d$  vienen dados por

$$a = \gamma_0 + (R_{eq}\gamma_0\gamma_{2x} - \epsilon\gamma_0\alpha_{2x} + D)k_x^2 + (R_{eq}\gamma_0\gamma_{2y} - \epsilon\gamma_0\alpha_{2y} + D)k_y^2; \quad (4.34)$$

$$b = \epsilon\gamma_0\alpha_{1x}k_x; \quad (4.35)$$

$$c = D(k_x^2 + k_y^2)[(R_{eq}\gamma_0\gamma_{2x} - \epsilon\gamma_0\alpha_{2x})k_x^2 + (R_{eq}\gamma_0\gamma_{2y} - \epsilon\gamma_0\alpha_{2y})k_y^2] + \\ - \epsilon\phi\gamma_0^2(\alpha_{2x}k_x^2 + \alpha_{2y}k_y^2); \quad (4.36)$$

$$d = \epsilon\gamma_0\alpha_{1x}k_xD(k_x^2 + k_y^2) + \epsilon\phi\gamma_0^2\alpha_{1x}k_x. \quad (4.37)$$

La Ec. (4.33) establece la forma de la relación de dispersión y, al ser una ecuación cuadrática, su solución tiene dos ramas cuyas partes real e imaginaria vienen dadas por

$$\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^{\pm}) = -\frac{a}{2} \pm \frac{1}{2\sqrt{2}} \sqrt{a^2 - b^2 - 4c + \sqrt{(a^2 - b^2 - 4c)^2 + (2ab - 4d)^2}}, \quad (4.38)$$

$$\mathcal{I}m(\omega_{\mathbf{k}}^{\pm}) = -\frac{b}{2} \pm \frac{1}{2\sqrt{2}} \sqrt{-a^2 + b^2 + 4c + \sqrt{(a^2 - b^2 - 4c)^2 + (2ab - 4d)^2}}, \quad (4.39)$$

donde  $\omega_{\mathbf{k}}^+$  y  $\omega_{\mathbf{k}}^-$  representan, respectivamente, la solución correspondiente al considerar el signo positivo o bien el negativo en (4.38) y (4.39).

Sustituyendo  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $d$  en (4.38) y (4.39) se obtiene una expresión analítica para la relación de dispersión en función de  $\omega_{\mathbf{k}}$ . La parte real representa cómo crece o decae la amplitud de una perturbación de la solución plana de vector de onda  $\omega_{\mathbf{k}}$  en el transcurso del tiempo, mientras que la parte imaginaria está asociada con su propagación (tal y como ya se vio en la sección 3.3.2). Nosotros sólo estamos interesados en el comportamiento asintótico de  $\mathbf{k}$  en el límite de longitudes de onda grandes. A pesar de ello, también resulta informativo el análisis para  $k \gg 1$ , por lo que a continuación mostramos la parte real de la relación de dispersión para las ramas positiva y negativa, obtenida tras desarrollar (4.38) en ambos límites; éstas resultan

$$\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^-) = \begin{cases} -\gamma_0 & \text{si } k \ll 1 \\ -D(k_x^2 + k_y^2) & \text{si } k \gg 1. \end{cases} \quad (4.40)$$

$$\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+) = \begin{cases} \epsilon[\phi\gamma_0\alpha_{2y}k_y^2 + (\phi\gamma_0\alpha_{2x} - \epsilon\phi\bar{\phi}\gamma_0\alpha_{1x}^2)k_x^2] & \text{si } k \ll 1 \\ -R_{eq}\gamma_0(\gamma_{2x}k_x^2 + \gamma_{2y}k_y^2) + \epsilon\gamma_0(\alpha_{2x}k_x^2 + \alpha_{2y}k_y^2) & \text{si } k \gg 1. \end{cases} \quad (4.41)$$

La forma de parte imaginaria para  $k \ll 1$  es  $\mathcal{I}m(\omega_{\mathbf{k}}) = -\epsilon\phi\gamma_0\alpha_{1x}k_x$  ó  $\mathcal{I}m(\omega_{\mathbf{k}}) = -\epsilon\bar{\phi}\gamma_0\alpha_{1x}k_x$  dependiendo de la rama, signo de  $k_x$  y valor de  $\phi$ . En cualquier caso, si suponemos que la fracción de material redepositado es alta, tal y como se observa en los experimentos, se tendrá que el movimiento de las estrías viene dado por

$$\mathcal{I}m(\omega_{\mathbf{k}}) = -\epsilon\phi\gamma_0\alpha_{1x}k_x + \mathcal{O}(k^3). \quad (4.42)$$

Tal y como se desprende de (4.40),  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^-)$  es negativa para longitudes de onda grandes y pequeñas, lo cual significa que cualquier perturbación periódica de la solución plana tiende a decaer exponencialmente en el tiempo. Por otro lado, para la rama positiva de la relación de dispersión existe, al menos, una banda de modos de gran longitud de onda que hacen  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+) > 0$ ; estos modos, denominados inestables, provocan que cualquier perturbación de este tamaño tienda a crecer exponencialmente. Esta será la rama que nos interese por ser la responsable de la aparición del patrón observado experimentalmente. Se debe notar que en ambos casos la relación de dispersión es negativa para  $k \gg 1$  para  $\epsilon$  pequeño; esto indica que los modos correspondientes a las escalas más pequeñas son estables. Si los tiempos de erosión fueran más cortos que los de difusión y adición, es decir, si dominase el mecanismo erosivo,  $\epsilon$  sería grande y  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+)$  sería positiva para los modos pequeños; esto haría inestables las escalas más pequeñas y el problema estaría, a orden lineal, mal planteado.

Con el fin de obtener el máximo de la relación de dispersión para estimar la longitud de onda de la inestabilidad lineal observada en los experimentos, debemos desarrollar la expresión (4.41) para  $k$  pequeños. Si despreciamos los términos de orden superior a  $\mathcal{O}(\epsilon k^4)$ , para los modos de longitud de onda larga la relación de dispersión (4.41) resulta

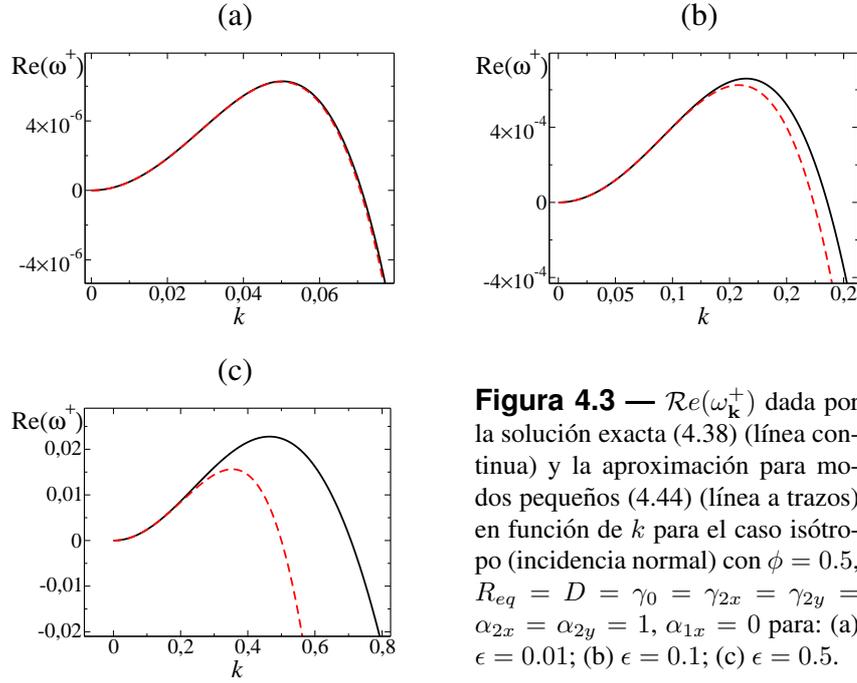
$$\begin{aligned} \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+) &= \epsilon\phi\gamma_0(\alpha_{2x}k_x^2 + \alpha_{2y}k_y^2) - \epsilon^2\phi\bar{\phi}\gamma_0\alpha_{1x}^2k_x^2 - R_{eq}D(k_x^2 + k_y^2)(\gamma_{2x}k_x^2 + \gamma_{2y}k_y^2) \\ &+ \epsilon\left[\bar{\phi}D(k_x^2 + k_y^2)(\alpha_{2x}k_x^2 + \alpha_{2y}k_y^2) - \phi\gamma_0R_{eq}(\gamma_{2x}k_x^2 + \gamma_{2y}k_y^2)(\alpha_{2x}k_x^2 + \alpha_{2y}k_y^2)\right]. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Con el fin de simplificar el cálculo del máximo de  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+)$ , despreciaremos los términos de orden  $\epsilon^2$  y  $\epsilon k^4$ . En ese caso, la ecuación (4.43) se reduce a

$$\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+) \approx \epsilon\phi\gamma_0(\alpha_{2x}k_x^2 + \alpha_{2y}k_y^2) - R_{eq}D(k_x^2 + k_y^2)(\gamma_{2x}k_x^2 + \gamma_{2y}k_y^2). \quad (4.44)$$

En la figura 4.3 se representan las ramas positivas de las relaciones de dispersión exacta [Ec. (4.38)] y aproximada [Ec. (4.44)] para diferentes valores de  $\epsilon$ . Se puede observar cómo ambas funciones coinciden para los valores realistas de  $\epsilon$ . En ambos casos se observa que existe una banda de modos cuya relación de dispersión es positiva.

Podemos reescribir los coeficientes de segundo orden en  $k$  de (4.44) a partir de la relación dada por (4.21) y coinciden, salvo por el factor  $\phi$ , con los de tensión superficial que hacían inestables las perturbaciones en el modelo de BH. Si suponemos que la evaporación-condensación es independiente de la orientación del material,  $\gamma_{2x} = \gamma_{2y}$  y la relación de dispersión (4.44) es como la propuesta por BH, donde el término difusivo de orden  $k^4$  se introducía *ad hoc* basándose en los resultados de Mullins [ver Ec. (3.26) en la sección 3.3.2]. En (4.44) se obtienen, al igual que ocurría allí, términos de orden  $k^2$  de origen puramente erosivo que



**Figura 4.3** —  $\mathcal{R}e(\omega_k^+)$  dada por la solución exacta (4.38) (línea continua) y la aproximación para modos pequeños (4.44) (línea a trazos) en función de  $k$  para el caso isótropo (incidencia normal) con  $\phi = 0.5$ ,  $R_{eq} = D = \gamma_0 = \gamma_{2x} = \gamma_{2y} = \alpha_{2x} = \alpha_{2y} = 1$ ,  $\alpha_{1x} = 0$  para: (a)  $\epsilon = 0.01$ ; (b)  $\epsilon = 0.1$ ; (c)  $\epsilon = 0.5$ .

tienen a inestabilizar la superficie, y un término estable de orden  $k^4$  debido al flujo de material y que tiende a aplanar la superficie. Este término tiene el mismo origen que el propuesto por Mullins para la difusión superficial, pero, a diferencia de éste, en nuestro caso hemos utilizado un modelo de dos campos acoplados. Así, en el modelo “hidrodinámico”, el coeficiente dominante correspondientes a  $k^4$  vale  $DR_{eq}\gamma_2$ , mientras que el coeficiente en la teoría de Mullins que describe la difusión superficial mostrado en la sección 1.5.2 era  $B = D_s\gamma'_s\nu'_s/(n_v^2k_B T)$ , donde  $D_s/(k_B T)$  era el coeficiente efectivo de difusión a una temperatura dada, y sería equivalente a nuestra  $D$ ;  $\nu'_s$  era la densidad de átomos, es decir, la cantidad de material disponible para difundir a esa temperatura y que nosotros hemos considerado proporcional a  $R_{eq}$ , y  $\gamma'_s$  era la tensión superficial. En la formulación de Mullins, se definía un potencial químico,  $\mu$ , proporcional a la tensión superficial y a la curvatura que tiende a aplanar la superficie, de forma análoga a como lo hace el término  $\gamma_2\partial_x^2 h$  en nuestro modelo. Vemos por tanto que ambas formulaciones son equivalentes.

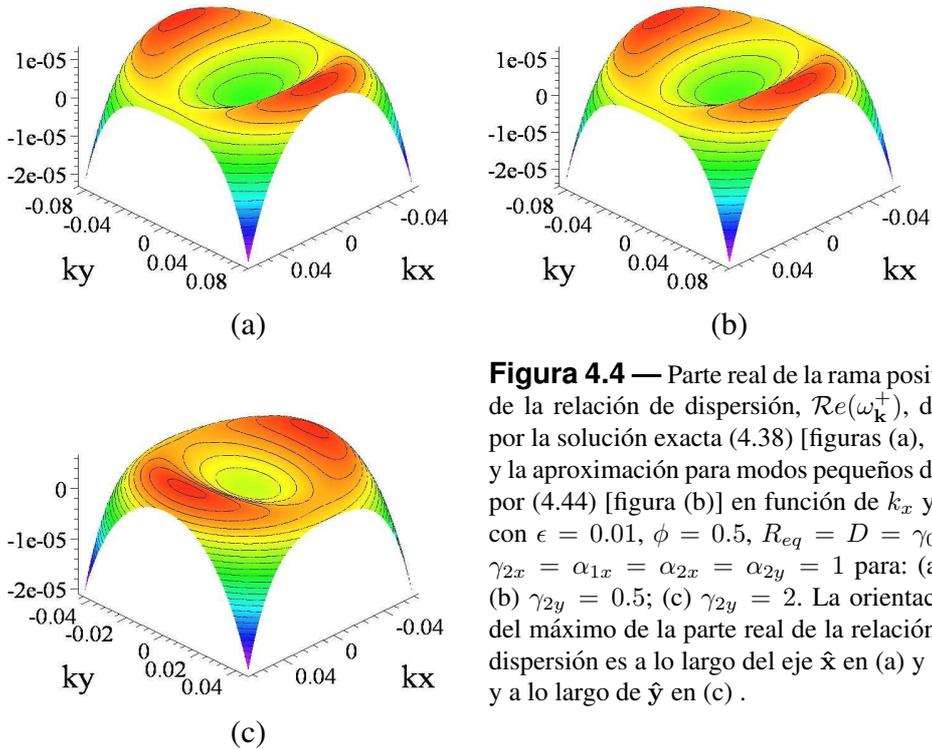
De forma análoga a como se hizo en la sección 3.3.2, a partir de (4.44) podemos obtener la orientación y magnitud del vector de onda asociado a la inestabilidad lineal en el caso de que el término difusivo de la relación de dispersión sea isótropo. En ese caso, el patrón se orienta a lo largo de la dirección  $\hat{x}$  si  $\alpha_{2x} > \alpha_{2y}$ , de la dirección  $\hat{y}$  si  $\alpha_{2x} < \alpha_{2y}$ , o es isótropo si  $\alpha_{2x} = \alpha_{2y}$ . En el caso de que la difusión superficial sea anisótropa ( $\gamma_{2x} \neq \gamma_{2y}$ ) el cálculo es algo más complica-

do (ver apéndice C), pero de nuevo se obtiene que el patrón no puede orientarse en cualquier dirección, sino sólo a lo largo del eje  $\hat{x}$ , del eje  $\hat{y}$  o en ambos ejes simultáneamente si  $\alpha_{2x}^2 \gamma_{2y} = \alpha_{2y}^2 \gamma_{2x}$ , con vectores de onda respectivos

$$k_{x,y}^l \approx \sqrt{\frac{\epsilon \phi \gamma_0 \alpha_{2x,y}}{2R_{eq} D \gamma_{2x,y}}}. \quad (4.45)$$

A diferencia del modelo propuesto por Aste y Valbusa donde las ondulaciones pueden orientarse en cualquier dirección [Aste y Valbusa 2004; Aste y Valbusa 2005], el hecho de que en el régimen lineal el patrón se oriente sólo en determinadas direcciones está de acuerdo con lo observado experimentalmente.

En la figura 4.4 se presenta la parte real de la relación de dispersión dada por la solución exacta (4.38) [Fig. 4.4 (a) y (c)] y la aproximación para modos y  $\epsilon$  pequeños dada por (4.44) [Fig. 4.4 (b)]. Se puede observar en las figuras 4.4 (a) y (b), que la solución exacta y la aproximación son muy similares, mientras que en las figuras 4.4 (a) y (c) se muestra el cambio de orientación en la dirección del máximo de  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+)$  cuando se modifica el parámetro  $\gamma_{2y}$ .



**Figura 4.4** — Parte real de la rama positiva de la relación de dispersión,  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+)$ , dada por la solución exacta (4.38) [figuras (a), (c)] y la aproximación para modos pequeños dada por (4.44) [figura (b)] en función de  $k_x$  y  $k_y$  con  $\epsilon = 0.01$ ,  $\phi = 0.5$ ,  $R_{eq} = D = \gamma_0 = \gamma_{2x} = \alpha_{1x} = \alpha_{2x} = \alpha_{2y} = 1$  para: (a) y (b)  $\gamma_{2y} = 0.5$ ; (c)  $\gamma_{2y} = 2$ . La orientación del máximo de la parte real de la relación de dispersión es a lo largo del eje  $\hat{x}$  en (a) y (b), y a lo largo de  $\hat{y}$  en (c).

Si recordamos las magnitudes de los parámetros físicos dadas en el apartado anterior, a partir de (4.45) podemos obtener una estimación para  $k_{x,y}^l$ . Suponiendo

que  $\alpha_{2x,y}$  y  $\gamma_{2x,y}$  son del mismo orden y considerando que el grosor de la capa de material móvil es del orden del nm, lo cual está de acuerdo con las medidas de la capa fluida amorfa en los experimentos (ver capítulo 3), se obtiene  $k^l \simeq 10^{-3} - 10^{-1} \text{nm}^{-1}$ . Esto implica que la longitud de onda del patrón en aproximación lineal es del orden de  $l_l \simeq 10 - 10^3 \text{ nm}$ , de nuevo en buen acuerdo con los resultados experimentales.

Con el fin de investigar el ritmo de desarrollo de la inestabilidad lineal y cuál es el efecto de los términos no lineales despreciados en esta sección, utilizaremos el parámetro  $\epsilon$ , relacionado con la anchura de la banda de modos inestables. Definimos  $\mathbf{k}^*$  tal que  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}^*}^+) = 0$ , de donde se deduce que en la dirección  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$  se verifica

$$k_{x,y}^* \approx \sqrt{\frac{\epsilon \phi \gamma_0 \alpha_{2x,y}}{R_{eq} D \gamma_{2x,y}}}. \quad (4.46)$$

Es fácil demostrar que en cualquier dirección para (4.44) se verifica que  $k^* \sim \epsilon^{1/2}$  (tal y como se observa en las figuras 4.3 y 4.4). Para una relación de dispersión de la forma (4.44) la banda de modos que hacen positiva  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+)$  se extiende desde  $k^*$  hasta  $k = 0$ . El hecho de que los modos inestables se extiendan hasta la región de longitud de onda infinita (el modo  $k = 0$  es conocido como modo de Goldstone) provoca que la dinámica del sistema dependa de forma crucial de los términos no lineales [Cross y Hohenberg 1993].

#### 4.2.2.3. Análisis no lineal y derivación de una ecuación efectiva para la altura

Una vez se desarrolla la inestabilidad lineal, los términos no lineales son relevantes en la evolución del sistema y no pueden ser despreciados. Como se ha visto en el apartado anterior, tanto el modo que hace que crezca más rápidamente la perturbación,  $\mathbf{k}^l$ , como la anchura de la banda de modos inestables  $k^*$  son proporcionales a  $\epsilon^{1/2}$ . Dejando a un lado las dimensiones, esto indica que existe una longitud característica de gran tamaño asociada a la inestabilidad lineal proporcional a  $\epsilon^{-1/2}$ . Por este motivo, podemos definir variables espaciales que denominaremos *lentas* y que son del orden de la unidad a escalas del orden de  $l^l$ , como  $X = \epsilon^{1/2}x$  y  $Y = \epsilon^{1/2}y$ . Además, en el análisis lineal del apartado anterior se obtuvo una relación de dispersión de la forma  $\omega_{\mathbf{k}}^+ \sim i\epsilon k + \epsilon k^2 + \dots$ , con la que podemos obtener una estimación de las escalas temporales asociadas con la traslación (parte imaginaria de  $\omega_{\mathbf{k}}^+$ ) y crecimiento (parte real de  $\omega_{\mathbf{k}}^+$ ) de la inestabilidad lineal. Si sustituimos el valor de  $\mathbf{k}^l$  en la anterior expresión se obtiene que la parte imaginaria escala como  $\epsilon^{3/2}$  y la parte real como  $\epsilon^2$ . De esta forma, análogamente a como se hizo en el caso de las variables espaciales, podemos definir dos nuevas variables temporales que serán del orden de la unidad a las escalas temporales típicas del movimiento y crecimiento del patrón como  $T_1 = \epsilon^{3/2}t$  y  $T_2 = \epsilon^2t$ , respectivamente. Estas variables nos permitirán reescribir las ecuaciones para la evolución del sistema en las escalas típicas de su evolución.

Como consecuencia de la diferencia de escala temporal entre los eventos de erosión y el proceso difusivo, el campo  $R$  apenas es perturbado de su valor de equilibrio en las escalas temporales consideradas y vamos a poder eliminarlo del sistema de ecuaciones (4.15)-(4.16), con lo que se va a obtener una ecuación cerrada para la evolución de la altura,  $h$ . Para ello, escribiremos las ecuaciones (4.15)-(4.16) en función de las variables lentas  $X, Y, T_1$  y  $T_2$ ; éstas verifican las siguientes relaciones

$$\partial_x = \epsilon^{1/2} \partial_X, \quad (4.47)$$

$$\partial_y = \epsilon^{1/2} \partial_Y, \quad (4.48)$$

$$\partial_t = \epsilon^{3/2} \partial_{T_1} + \epsilon^2 \partial_{T_2}, \quad (4.49)$$

con lo que es inmediato expresar las ecuaciones (4.15)-(4.16) en estas nuevas variables:

$$\epsilon^{3/2} \partial_{T_1} R + \epsilon^2 \partial_{T_2} R = \bar{\phi} \Gamma^{ex} - \Gamma^{ad} + \epsilon D \nabla^2 R, \quad (4.50)$$

$$\epsilon^{3/2} \partial_{T_1} h + \epsilon^2 \partial_{T_2} h = -\Gamma^{ex} + \Gamma^{ad}, \quad (4.51)$$

donde

$$\Gamma^{ad} = \gamma_0 [R - R_{eq}(1 - \epsilon \gamma_2 \nabla^2 h)], \quad (4.52)$$

$$\Gamma^{ex} = \gamma_0 \{ \epsilon + \epsilon^{3/2} \alpha_{1x} \partial_X h + \epsilon^2 [\alpha_2 \nabla^2 h + \alpha_3 (\nabla h)^2] + \epsilon^{5/2} \alpha_{4x} (\partial_X h) (\nabla^2 h) \}, \quad (4.53)$$

y por simplificar la notación hemos definido

$$\alpha_2 \nabla^2 h \equiv \alpha_{2x} \partial_X^2 h + \alpha_{2y} \partial_Y^2 h, \quad (4.54)$$

$$\gamma_2 \nabla^2 h \equiv \gamma_{2x} \partial_X^2 h + \gamma_{2y} \partial_Y^2 h, \quad (4.55)$$

$$\alpha_3 (\nabla h)^2 \equiv \alpha_{3x} (\partial_X h)^2 + \alpha_{3y} (\partial_Y h)^2. \quad (4.56)$$

Sumando las ecuaciones (4.50) y (4.51) se obtiene la siguiente relación, que será de gran utilidad más adelante

$$\epsilon^{3/2} \partial_{T_1} h + \epsilon^2 \partial_{T_2} h = -\phi \Gamma^{ex} + \epsilon D \nabla^2 R - \epsilon^{3/2} \partial_{T_1} R - \epsilon^2 \partial_{T_2} R. \quad (4.57)$$

La estrategia a seguir será la siguiente; desarrollaremos  $R$  y  $h$  en potencias de  $\epsilon$  de la siguiente forma

$$R = R_0 + \epsilon^{1/2} R_1 + \epsilon^1 R_2 + \epsilon^{3/2} R_3 + \epsilon^2 R_4 + \epsilon^{5/2} R_5 + \dots, \quad (4.58)$$

$$h = h_0 + \epsilon^{1/2} h_1 + \epsilon^1 h_2 + \epsilon^{3/2} h_3 + \epsilon^2 h_4 + \epsilon^{5/2} h_5 + \dots, \quad (4.59)$$

y sustituiremos este desarrollo en las ecuaciones (4.50)-(4.53) para deducir de forma sucesiva el valor de  $R$  y  $h$  en potencias de  $\epsilon$ . Utilizaremos la expresión (4.50) para obtener el valor de  $R$  a órdenes sucesivos en  $\epsilon$  en función de órdenes más bajos en  $h$ , y estos valores será sustituidos en (4.57) para obtener una ecuación cerrada para la altura.

**Orden  $\epsilon^0$ .** A orden cero, como dicta la ecuación (4.50), la única contribución es  $R_{eq}$ , con lo que se obtiene de forma trivial

$$R_0 = R_{eq}. \quad (4.60)$$

Es decir, la contribución más relevante al campo  $R$  (de orden cero en  $\epsilon$ ) es constante y, por tanto, éste sólo se verá ligeramente perturbado alrededor de su valor de equilibrio.

**Orden  $\epsilon^{1/2}$ .** A este orden no existe ninguna contribución y, por tanto, de la ecuación (4.50) se obtiene

$$R_1 = 0. \quad (4.61)$$

**Orden  $\epsilon^1$ .** Podemos obtener el valor de  $R$  a este orden a partir de la ecuación (4.50) para reproducir la solución plana [Ec. (4.24)] y un término adicional que depende de las derivadas espaciales de  $h_0$ ,

$$R_2 = \bar{\phi} - R_{eq}\gamma_2\nabla^2 h_0. \quad (4.62)$$

**Orden  $\epsilon^{3/2}$ .** A partir de la ecuación (4.50) a este orden, la cual queda

$$0 = \bar{\phi}\gamma_0\alpha_{1x}\partial_X h_0 - \gamma_0 (R_3 + R_{eq}\gamma_2\nabla^2 h_1), \quad (4.63)$$

es inmediato obtener el valor de  $R_3$ , que es

$$R_3 = \bar{\phi}\alpha_{1x}\partial_X h_0 - R_{eq}\gamma_2\nabla^2 h_1. \quad (4.64)$$

De la ecuación (4.57) se obtiene directamente una expresión cerrada para las derivadas temporales de  $h$  a este orden,

$$\partial_{T_1} h_0 = -\phi\gamma_0\alpha_{1x}\partial_X h_0, \quad (4.65)$$

donde observamos que la derivada temporal asociada al tiempo de propagación de la inestabilidad coincide con la parte imaginaria de la relación de dispersión [Ec. (4.42)]. En la expresión (4.65) se observa que no aparece el término de velocidad constante  $\partial_t h_0 = -\epsilon\phi\gamma_0$  que sí se tenía en el caso de la solución plana Ec. (4.25). Esto se debe a que la escala temporal asociada este movimiento es del orden de  $\epsilon t$ , que no se observa a las escalas temporales mucho mayores  $T_1 = \epsilon^{3/2}t$  y  $T_2 = \epsilon^2 t$  utilizadas para describir la evolución de  $h$ .

**Orden  $\epsilon^2$ .** Siguiendo con el esquema propuesto anteriormente, de la ecuación (4.50) se tiene

$$R_4 = \frac{\bar{\phi}}{\gamma_0}\Gamma^{ex}(\epsilon^2) - R_{eq}\gamma_2\nabla^2 h_2 + \frac{D}{\gamma_0}\nabla^2 R_2, \quad (4.66)$$

donde para expresar la contribución a orden  $\epsilon^2$  de  $\Gamma^{ex}$  dada por (4.53) hemos utilizado la siguiente notación

$$\Gamma_{ex}(\epsilon^2) = \gamma_0 [\alpha_{1x} \partial_X h_1 + \alpha_2 \nabla^2 h_0 + \alpha_3 (\nabla h_0)^2]. \quad (4.67)$$

A partir de (4.57) es inmediato obtener una ecuación de evolución cerrada para  $h$  a este orden, que queda

$$\partial_{T_1} h_1 + \partial_{T_2} h_0 = -\phi \Gamma_{ex}(\epsilon^2) + D \nabla^2 R_2. \quad (4.68)$$

Podemos observar que para obtener el valor de las derivadas de  $h$  a orden  $\epsilon^{n/2}$  en el desarrollo necesitamos conocer  $R$  hasta orden  $R_{n-2}$ . Como en este punto conocemos los valores de  $R_0$ ,  $R_2$ ,  $R_3$  y  $R_4$  dados por las ecuaciones (4.60), (4.61), (4.62), (4.64) y (4.66) respectivamente, estamos en disposición de deducir finalmente una ecuación cerrada para la evolución temporal de  $h$  hasta orden  $\epsilon^3$ .

**Orden  $\epsilon^{5/2}$ .** A partir de la ecuación (4.57) se sigue

$$\partial_{T_1} h_2 + \partial_{T_2} h_1 = -\phi \Gamma^{ex}(\epsilon^{5/2}) + D \nabla^2 R_3 - \partial_{T_1} R_2, \quad (4.69)$$

donde de nuevo hemos utilizado la notación  $\Gamma^{ex}(\epsilon^{5/2})$  para representar el valor de  $\Gamma^{ex}$  [Ec. (4.53)] a este orden en  $\epsilon$ . La derivada temporal de  $R_2$  se obtiene a partir de las ecuaciones (4.62) y (4.65),

$$\partial_{T_1} R_2 = -R_{eq} \gamma_2 \nabla^2 (\partial_{T_1} h_0) = R_{eq} \phi \gamma_0 \alpha_{1x} \gamma_2 \nabla^2 (\partial_X h_0). \quad (4.70)$$

**Orden  $\epsilon^3$ .** A orden  $\epsilon^3$  escribimos

$$\partial_{T_1} h_3 + \partial_{T_2} h_2 = -\phi \Gamma_{ex}(\epsilon^3) + D \nabla^2 R_4 - \partial_{T_1} R_3 - \partial_{T_2} R_2. \quad (4.71)$$

Como conocemos los valores de  $\Gamma_{ex}(\epsilon^3)$ ,  $R_2$ ,  $R_3$  y  $R_4$  en función de los diferentes términos en el desarrollo de  $h$  [Ec. (4.59)] podemos obtener una ecuación cerrada para la evolución de  $h$  a este orden.

Si recordamos el desarrollo de  $h$  en potencias de  $\epsilon$  (4.59) y la relación entre la derivada temporal total y las variables lentas (4.49), podemos escribir

$$\partial_t h = \epsilon^{3/2} \partial_{T_1} h_0 + \epsilon^2 (\partial_{T_2} h_0 + \partial_{T_1} h_1) + \epsilon^{5/2} (\partial_{T_2} h_1 + \partial_{T_1} h_2) + \epsilon^3 (\partial_{T_2} h_2 + \partial_{T_1} h_3), \quad (4.72)$$

donde hemos despreciado los términos de órdenes mayores que  $\epsilon^3$ . Si sustituimos los resultados alcanzados en las ecuaciones (4.65), (4.68), (4.69), y (4.71) en la expresión anterior se obtiene

$$\begin{aligned} \partial_t h = & \epsilon^{3/2} (-\phi \gamma_0 \alpha_{1x} \partial_X h) + \epsilon^2 \{ -\phi \gamma_0 [\alpha_2 \nabla^2 h + \alpha_3 (\nabla h)^2] - D R_{eq} \nabla^2 (\gamma_2 \nabla^2 h) \} \\ & + \epsilon^{5/2} \{ \phi \gamma_0 \alpha_{4x} (\partial_X h) (\nabla^2 h) + \alpha_{1x} (\bar{\phi} D - \phi \gamma_0 R_{eq} \gamma_2) \nabla^2 (\partial_X h) \} \\ & + \epsilon^3 \{ (D \bar{\phi} - \phi \gamma_0 R_{eq} \gamma_2) \nabla^2 [\alpha_2 \nabla^2 h + \alpha_3 (\nabla h)^2] + \bar{\phi} \phi \gamma_0 \alpha_{1x}^2 \partial_X^2 h \}, \quad (4.73) \end{aligned}$$

donde, de nuevo, se ha tenido en cuenta la relación (4.59) y se han despreciado derivadas de orden sexto.

La expresión (4.73) es la ecuación buscada para la evolución de  $h$ . Con el fin de comparar con la relación de dispersión lineal para el problema original dada en el apartado anterior, reescalaremos las variables espaciales para volver a las variables originales. Recordamos que  $X = \epsilon^{1/2}x$  e  $Y = \epsilon^{1/2}y$ , con lo que la ecuación (4.73) se escribe en la forma

$$\partial_t h = \gamma_x \partial_x h + \sum_{i=x,y} \left[ -\nu_i \partial_i^2 h + \lambda_i^{(1)} (\partial_i h)^2 + \Omega_i \partial_i^2 \partial_x h + \xi_i (\partial_x h) (\partial_i^2 h) \right] + \sum_{i,j=x,y} \left[ -\mathcal{K}_{ij} \partial_i^2 \partial_j^2 h + \lambda_{ij}^{(2)} \partial_i^2 (\partial_j h)^2 \right], \quad (4.74)$$

donde

$$\begin{aligned} \gamma_x &= -\epsilon \phi \gamma_0 \alpha_{1x}; & \nu_x &= \epsilon \phi \gamma_0 \alpha_{2x} - \epsilon^2 \bar{\phi} \phi \gamma_0 \alpha_{1x}^2; & \nu_y &= -\epsilon \phi \gamma_0 \alpha_{2y}; \\ \lambda_i^{(1)} &= -\epsilon \phi \gamma_0 \alpha_{3i}; & \Omega_i &= \epsilon (\bar{\phi} D - \phi R_{eq} \gamma_0 \gamma_{2i}) \alpha_{1x}; & \xi_i &= \epsilon \phi \gamma_0 \alpha_{4i}; \\ \mathcal{K}_{ij} &= DR_{eq} \gamma_{2i} + \epsilon (\phi R_{eq} \gamma_0 \gamma_{2i} - D \bar{\phi}) \alpha_{2j}; & \lambda_{ij}^{(2)} &= \epsilon (\bar{\phi} D - \phi R_{eq} \gamma_0 \gamma_{2i}) \alpha_{3j}. \end{aligned} \quad (4.75)$$

Debemos notar que la relación de dispersión lineal para la ecuación (4.74) coincide con la del sistema original [ecuaciones (4.43) y (4.42)] para la banda de modos inestables en el límite de  $k \ll 1$ . A diferencia de los resultados de Aste y Valbusa, donde en ausencia de redepósito ( $\phi = 1$ ) era inestable para las escalas más pequeñas, en nuestro caso, gracias a la existencia de una fracción no nula de material móvil,  $R_{eq}$ , nuestro modelo no tiene esta limitación.

La ecuación (4.74) es similar a (3.39), pero, a diferencia de ese caso, aquí los términos  $\Omega_i$  y  $\mathcal{K}_{ij}$  han aparecido sin que se hubiesen incluido en  $\Gamma_{ex}$ , donde se despreciaron las derivadas de orden superior ya que el acoplo de estos términos con otros del modelo sólo podía dar lugar a términos con derivadas de orden superior que no se han tenido en cuenta en nuestro análisis. Si estos términos se hubieran introducido en la expresión para la velocidad de excavación (4.20), sólo se obtendría una contribución aditiva a los correspondientes coeficientes de (4.74), donde aparecerían multiplicados por  $\epsilon \phi \gamma_0$ , como ocurre en el resto de coeficientes. Otra característica de la ecuación efectiva (4.74) es que no aparece un término constante en el desplazamiento de la altura. Esto se debe, como se vio anteriormente, a que a las escalas temporales consideradas sólo se observa la variación local de la morfología y no el término de velocidad constante de la superficie plana dado en (4.25).

Al igual que en las teorías continuas no lineales del capítulo anterior, en (4.74) se rompe la simetría de reflexión en el eje  $\hat{x}$ , aunque se conserva en el eje  $\hat{y}$ . La principal diferencia entre (3.39) y (4.74) es que en esta segunda aparecen términos adicionales de la forma  $\lambda_{ij}^{(2)}$  que, como se verá en los siguientes capítulos,

resultarán fundamentales en la evolución del patrón. Esta ecuación es por tanto novedosa y tiene un amplio espacio de parámetros que será estudiado en parte en los siguientes capítulos.

#### 4.2.2.4. Incidencia normal

En el caso en el que se bombardee la muestra perpendicularmente a la superficie desaparece la asimetría introducida en el bombardeo oblicuo y, para materiales que no presenten direcciones cristalográficas privilegiadas y tengan un comportamiento isótropo como ocurre en los materiales amorfos o amorfizables por bombardeo y policristalinos, se tiene que:  $\alpha_{1x} = \alpha_{4x} = \alpha_{4y} = 0$ ,  $\alpha_{2x} = \alpha_{2y} = \alpha_2$ ,  $\alpha_{3x} = \alpha_{3y} = \alpha_3$ ,  $\gamma_{2x} = \gamma_{2y} = \gamma_2$ , con lo que la ecuación (4.74) se reduce a

$$\partial_t h = -\nu \nabla^2 h - \mathcal{K} \nabla^4 h + \lambda^{(1)} (\nabla h)^2 + \lambda^{(2)} \nabla^2 (\nabla h)^2, \quad (4.76)$$

donde

$$\begin{aligned} \nu &= \epsilon \gamma_0 \phi \alpha_2; & \mathcal{K} &= DR_{eq} \gamma_2 + \epsilon (\phi R_{eq} \gamma_0 \gamma_2 - \bar{\phi} D) \alpha_2; \\ \lambda^{(1)} &= -\epsilon \gamma_0 \phi \alpha_3; & \lambda^{(2)} &= \epsilon (\bar{\phi} D - \phi R_{eq} \gamma_0 \gamma_2) \alpha_3. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Esta ecuación fue derivada por primera vez en [Castro *et al.* 2005], habiéndose propuesto una versión estocástica de la misma con anterioridad en el contexto de crecimiento de películas delgadas amorfas [Raible *et al.* 2000; Raible, Linz y Hänggi 2001] y en el de erosión iónica [Kim *et al.* 2004]. A su vez, (4.76) es similar a la obtenida en la sección 3.5.3 salvo por el término  $\nabla^2 (\nabla h)^2$ , cuya influencia en la evolución de la altura se estudiará en próximos capítulos. En este caso el término correspondiente a la difusión superficial aparece de forma natural si consideramos una densidad de material  $R_{eq}$  distinta de cero. Es por tanto  $\mathcal{K}_{ij}$ , el único coeficiente cuyo origen no es puramente erosivo. Si suponemos que este término está térmicamente activado, las dependencias de la longitud de onda de la inestabilidad lineal con respecto a los parámetros experimentales como la temperatura, energía o flujo son análogas a las de las teorías continuas estudiadas en el capítulo anterior.

Una propiedad importante de (4.76) es que, en el caso de que el redepósito sea despreciable ( $\phi \simeq 1$ ),  $\lambda^{(1)}$  y  $\lambda^{(2)}$  tienen el mismo signo, tal y como ocurre en el caso puramente erosivo [Kim *et al.* 2004] visto en la sección 3.5.5; esto provoca que el sistema sea no linealmente inestable [Raible, Linz y Hänggi 2001; Castro *et al.* 2005]. Parece, por tanto, que este es un problema intrínseco de la descripción con un sólo campo que se soluciona, si la fracción de material redepositado y la difusividad son altas, cuando se plantea el modelo “hidrodinámico” a dos campos.

#### 4.2.2.5. Incidencia rotante

En el caso de que se gire simultáneamente la muestra mientras se bombardea, vimos en el capítulo 2 que se obtenían patrones isótropos diferentes a los que se obtendrían si no existiese rotación. Al igual que se hizo en la sección 3.5.4, a partir

de la ecuación para  $h$  en el caso incidencia oblicua [Ec. (4.74)] es posible obtener una expresión para la evolución de la altura en el caso de sustrato rotante. Si el sistema se gira un ángulo azimutal  $\varphi$  respecto al sistema de laboratorio original, podemos introducir unas nuevas variables, que denotaremos por el subíndice  $r$ , relacionadas con las anteriores según

$$x_r = x \cos \varphi + y \sin \varphi, \quad (4.78)$$

$$y_r = -x \sin \varphi + y \cos \varphi, \quad (4.79)$$

$$z_r = z, \quad (4.80)$$

de forma que podemos relacionar las derivadas en uno y otro sistema según

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial x_r} + \sin(\varphi) \frac{\partial}{\partial y_r}, \quad (4.81)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = -\sin(\varphi) \frac{\partial}{\partial x_r} + \cos(\varphi) \frac{\partial}{\partial y_r}. \quad (4.82)$$

Podemos reescribir los términos de (4.74) en estas nuevas variables. Por ejemplo, para los términos  $\gamma_x$ ,  $\nu_x$  y  $\nu_y$  resulta

$$\gamma_x \frac{\partial h}{\partial x} = \gamma_x \left( \cos(\varphi) \frac{\partial h}{\partial x_r} + \sin(\varphi) \frac{\partial h}{\partial y_r} \right), \quad (4.83)$$

$$\begin{aligned} \nu_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \nu_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} &= [\nu_x \cos^2(\varphi) + \nu_y \sin^2(\varphi)] \frac{\partial^2 h}{\partial x_r^2} \\ &+ [\nu_y \cos^2(\varphi) + \nu_x \sin^2(\varphi)] \frac{\partial^2 h}{\partial y_r^2} + (\nu_x - \nu_y) \sin(2\varphi) \frac{\partial^2 h}{\partial x_r \partial y_r}. \end{aligned} \quad (4.84)$$

Si suponemos que la muestra gira con velocidad angular constante,  $\dot{\varphi}$ , lo suficientemente rápida como para que el valor efectivo de los coeficientes sea el promediado entre 0 y  $2\pi$ , se obtiene para (4.83)

$$\int_0^{2\pi} \gamma_x \frac{\partial h}{\partial x} d\varphi = \gamma_x \int_0^{2\pi} \left( \frac{\partial h}{\partial x_r} \cos(\varphi) + \frac{\partial h}{\partial y_r} \sin(\varphi) \right) d\varphi = 0, \quad (4.85)$$

mientras que los términos de (4.84) tras promediar sobre  $\varphi$  se reducen a

$$\int_0^{2\pi} \left( \nu_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \nu_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) d\varphi = \left( \frac{\nu_x + \nu_y}{2} \right) \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x_r^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y_r^2} \right) = \left( \frac{\nu_x + \nu_y}{2} \right) \nabla_r^2 h. \quad (4.86)$$

Es inmediato, aunque un poco farragoso, obtener el resto de términos de la ecuación (4.74) en el sistema de referencia rotado; aquí nos limitaremos a escribirlos una vez promediados. Hecho esto, la ecuación para la evolución de la altura de la superficie se reduce a

$$\partial_t h = -\nu_r \nabla_r^2 h - \mathcal{K}_r \nabla_r^4 h + \lambda_r^{(1)} (\nabla_r h)^2 + \lambda_r^{(2)} \nabla_r^2 (\nabla_r h)^2 + \lambda_r^{(3)} \nabla_r \cdot [(\nabla_r^2 h) \nabla_r h], \quad (4.87)$$

con

$$\begin{aligned} \nu_r &= \frac{\nu_x + \nu_y}{2}; \quad \mathcal{K}_r = \frac{3\mathcal{K}_{x,x} + 3\mathcal{K}_{y,y} + \mathcal{K}_{x,y} + \mathcal{K}_{y,x}}{8}, \quad \lambda_r^{(1)} = \frac{\lambda_x^{(1)} + \lambda_y^{(1)}}{2}; \\ \lambda_r^{(2)} &= \frac{\lambda_{x,x}^{(2)} + \lambda_{y,y}^{(2)} + \lambda_{x,y}^{(2)} + \lambda_{y,x}^{(2)}}{4}; \quad \lambda_r^{(3)} = \frac{\lambda_{x,x}^{(2)} + \lambda_{y,y}^{(2)} - \lambda_{x,y}^{(2)} - \lambda_{y,x}^{(2)}}{4}; \end{aligned} \quad (4.88)$$

donde, como es fácil demostrar, desaparecen las derivadas impares y el sistema presenta de nuevo simetría rotacional. Se debe notar que, a diferencia del capítulo anterior donde en la ecuación para incidencia normal y sustrato rotante tenían la misma forma, ahora aparece un término adicional de la forma  $\nabla_r \cdot [(\nabla_r^2 h) \nabla_r h]$  del mismo orden en potencias de  $h$  y de derivadas espaciales que  $\nabla_r^2 (\nabla_r h)^2$ . Ambos son, sin embargo, equivalentes en el caso unidimensional. En el capítulo 6, se integrarán numéricamente la ecuaciones (4.76) y (4.87), y se pondrá de manifiesto explícitamente la diferencia entre ambos términos para  $d = 2$ .

### 4.3. Conclusiones

Basándonos en los modelos fenomenológicos que describen la formación de ondulaciones en la arena, hemos propuesto un modelo de dos campos acoplados para describir la evolución de la morfología en el caso de bombardeo iónico. Las inestabilidades tienen origen diferentes en ambos casos. Mientras que para la erosión iónica se debe a que se erosionan más rápidamente los valles que las crestas (es la conocida inestabilidad de Sigmund, que se refleja en el signo positivo de  $\alpha_2$ ), para la arena se origina en la creación de una mayor cantidad granos reptadores en las pendientes opuestas a la dirección del viento (matemáticamente esto se refleja en el signo positivo de  $\alpha_1$ ) que, junto con la velocidad neta de arrastre, provoca un mayor depósito de material en las cercanías de los picos. Esta velocidad de arrastre es otra diferencia con el modelo de erosión iónica donde, debido a la escasa frecuencia de bombardeo en comparación con el resto de tiempos involucrados en la evolución, se desprecia la transferencia de momento de los iones a la capa de material móvil. Además, existe otra diferencia fundamental entre ambos modelos, y es que en el caso de la arena la cantidad de material se conserva.

A pesar de estas diferencias, es la primera vez que se generaliza el modelo hidrodinámico de erosión para un sustrato bidimensional donde la introducción de nuevos términos en las expresiones para las velocidades de excavación y adición en el caso iónico nos permiten predecir la interrupción del ensanchamiento de las estrías observado experimentalmente y aún no explicado en los estudios sobre medios arenosos como se verá en los siguientes capítulos.

En cuanto a las principales diferencias con los modelos teóricos de erosión anteriores, en estos no se permitía el redepósito y la difusión superficial se introducía *ad hoc*. En el modelo hidrodinámico se considera la evolución de un campo  $R$  que modela el flujo de material sobre la superficie, cuyo origen es debido al efecto del bombardeo o a la activación térmica. Es, por tanto, la primera vez que se estudia

explícitamente el efecto que puede tener una capa difusiva en la evolución de la superficie. También se formula, por vez primera, una descripción equivalente a la de Mullins para los regímenes de evaporación-condensación y difusión superficial teniendo en cuenta dos campos, uno fijo que representa la altura de la superficie y otro móvil. Todos estos mecanismos adicionales permiten generalizar el modelo de erosión actual e inducen una dinámica de patrones más rica y compleja, como se verá en los siguientes capítulos, que permiten explicar algunas de las observaciones experimentales no predichas hasta la fecha por las teorías actuales.

# 5

---

## Estudio analítico y numérico del modelo unidimensional

---

En este capítulo se deduce la ecuación efectiva de erosión unidimensional a partir del modelo hidrodinámico de dos campos equivalente al propuesto en el capítulo anterior. Se estudiará en detalle dicha ecuación y se comparará con la integración numérica del modelo completo. Esta ecuación presenta características novedosas que se analizarán dentro del contexto de las teorías actuales para la formación y evolución de patrones en procesos de crecimiento o erosión.

### 5.1. Reducción del modelo “hidrodinámico” de erosión al caso $1d$

Antes de estudiar en detalle la ecuación (4.74) vamos a analizar el modelo hidrodinámico de erosión propuesto en la sección (4.2.2) en el caso unidimensional. Esta simplificación es frecuente en el estudio de los modelos para la arena, en los que se considera que el sistema presenta invariancia traslacional en la dirección perpendicular a la del viento. Esta simplificación también es válida, por ejemplo, en el caso de erosión iónica si se considera un material amorfo, donde la difusión es isotrópica, cuando se bombardea la muestra en posición perpendicular. En ese caso, tal y como se señaló en la sección 3.5.1, los coeficientes de la ecuación (3.39) verifican:  $0 = \gamma_x = \xi_x = \xi_y$ ,  $\nu_x = \nu_y$  y  $\lambda_x = \lambda_y$ . Como en el modelo hidrodinámico

se cumple:  $\alpha_0 = v_0$ ,  $\alpha_{1x} = -\gamma_x/v_0$ ,  $\alpha_{2x,y} = -\nu_{x,y}/v_0$ ,  $\alpha_{3x,y} = -\lambda_{x,y}/v_0$  y  $\alpha_{4x,y} = -\xi_{x,y}/v_0$ , podemos escribir la versión unidimensional de las ecuaciones (4.15) y (4.16) de la siguiente manera:

$$\partial_t R = \bar{\phi} \Gamma_{ex} - \Gamma_{ad} + D \partial_x^2 R, \quad (5.1)$$

$$\partial_t h = -\Gamma_{ex} + \Gamma_{ad}, \quad (5.2)$$

donde las tasas de excavación y adición se reducen a

$$\Gamma_{ex} = \alpha_0 [1 + \alpha_2 \partial_x^2 h + \alpha_3 (\partial_x h)^2], \quad (5.3)$$

$$\Gamma_{ad} = \gamma_0 [R - R_{eq} (1 - \gamma_2 \partial_x^2 h)]. \quad (5.4)$$

Podemos repetir los cálculos del capítulo anterior para este caso particular y eliminar el campo  $R$  del sistema de ecuaciones acopladas (5.1)-(5.4) para obtener nuevamente una única ecuación efectiva que describa la evolución de la altura de la superficie. Esta ecuación es la versión unidimensional de (4.74), que toma la forma

$$\partial_t h(x, t) = v_0 - \nu \partial_x^2 h - \mathcal{K} \partial_x^4 h + \lambda_1 (\partial_x h)^2 + \lambda_2 \partial_x^2 (\partial_x h)^2. \quad (5.5)$$

En este caso hemos introducido el término de desplazamiento constante de la solución plana dado por (4.25) y el resto de parámetros de (5.5) se relacionan con los del modelo hidrodinámico [Ec. (5.1)-(5.4)] según

$$\begin{aligned} v_0 &= -\epsilon \phi \gamma_0; & \nu &= \epsilon \phi \gamma_0 \alpha_2; & \mathcal{K} &= D R_{eq} \gamma_2 - \epsilon (\bar{\phi} D - \phi R_{eq} \gamma_0 \gamma_2) \alpha_2; \\ \lambda_1 &= -\epsilon \phi \gamma_0 \alpha_3; & \lambda_2 &= \epsilon (\bar{\phi} D - \phi R_{eq} \gamma_0 \gamma_2) \alpha_3. \end{aligned} \quad (5.6)$$

Esta ecuación, restringiéndonos al caso unidimensional, generaliza la descripción obtenida en la sección 3.5 mediante la ecuación KS. Efectivamente, si no consideramos la existencia de una densidad de material móvil en equilibrio,  $R_{eq} = 0$ , y en ausencia de redepósito,  $\phi = 1$ , la ecuación (5.5) se reduce a la ecuación KS, donde los coeficientes de (5.5) coinciden con los de la teoría no lineal del capítulo 3. Tal y como se mencionó en el capítulo anterior, en nuestro modelo de partida hemos despreciado los términos de derivadas superiores en la expresión para la velocidad de excavación  $\Gamma_{ex}$ . En el caso de las derivadas cuartas, esto es equivalente a considerar el régimen de altas temperaturas donde se desprecia la difusión superficial activada por la erosión.

Por otro lado, en el caso de que se considere la existencia de un flujo de material móvil que difunde sobre la superficie, como se comentó en el capítulo anterior, se reformula la teoría de Mullins con dos campos acoplados y el término de difusión superficial que introducían Bradley y Harper para describir correctamente la superficie aparece de forma natural. Para completar el análisis, debemos notar que es necesario que exista redepósito  $\phi \neq 1$  para que nuestra descripción continua sea correcta, pues en caso contrario,  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  tendrían el mismo signo y, como se mostró en la sección 3.5.5, esto provoca que la ecuación de evolución sea no linealmente inestable para determinados modos.

### 5.1.1. Análisis preliminar y comparación de ambos sistemas

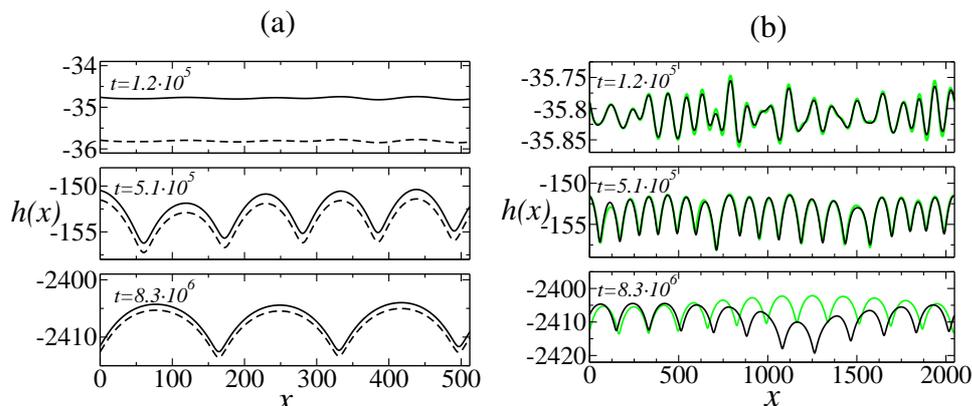
Con el fin de comprobar los cálculos y las aproximaciones con las que se llega a este resultado, hemos integrado numéricamente las ecuaciones [Ec. (5.1)-(5.4)] y (5.5) utilizando un esquema de Euler simple con condiciones de contorno periódicas y pasos espacial y temporal de  $\Delta x = 1.0$  y  $\Delta t = 0.01$ , respectivamente, a partir de una superficie inicial aleatoria distribuida uniformemente entre  $h = -0.05$  y  $h = 0.05$ , con condiciones de contorno periódicas. Se utilizó la discretización mejorada propuesta por Lam y Shin [Lam y Shin 1998] para los términos no lineales y se implementó el código de integración en C++. Tanto para el sistema de uno como para el de dos campos mostrados en la figuras 5.1 y 5.2 se tomaron las mismas condiciones iniciales y se utilizó (5.6) para relacionar el valor de los coeficientes de ambos sistemas.

En el caso de las figuras 5.1 (a) y 5.2 (a) se muestra la evolución de la altura de la superficie  $h$  y el grosor del campo  $R$  sobre el campo  $h$  para diferentes instantes de tiempo. Tal y como se dedujo en el capítulo anterior, el valor de  $R$  permanece aproximadamente constante e igual a  $R_{eq}$ .

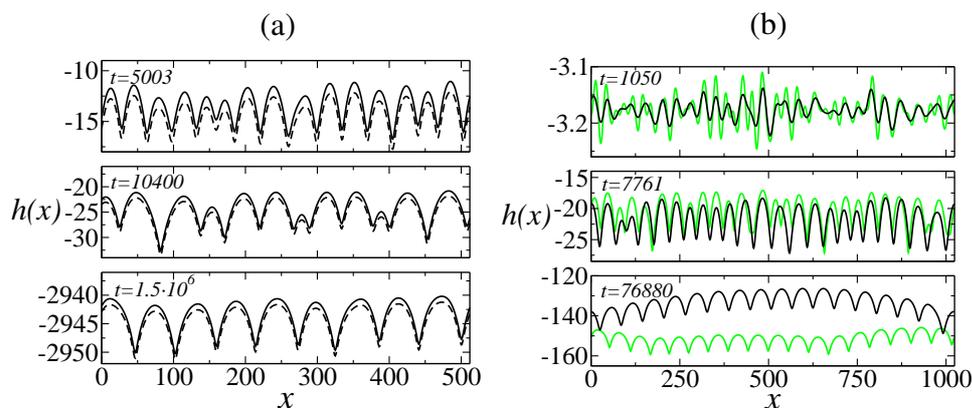
En las figuras 5.1 (b) y 5.2 (b) se compara la evolución de  $h$  para el modelo hidrodinámico de dos campos y la ecuación efectiva con la relación de parámetros dada por (5.6) en diferentes instantes. Se observa que para tiempos cortos, antes de que las pendientes sean grandes y los términos no lineales sean relevantes, los perfiles son muy parecidos. Una vez lejos del régimen lineal, si nos encontramos lejos del umbral de la inestabilidad los perfiles se diferencian, pero aún así la ecuación (5.5) captura las características esenciales del modelo hidrodinámico, como son la forma del patrón y su orden a corto alcance.

Habíamos visto en el capítulo anterior que las relaciones de dispersión para el modelo de dos campos y la ecuación efectiva son aproximadamente iguales en el caso de valores suficientemente pequeños de  $\epsilon$ . Para las figuras 5.1 (a) y (b) el máximo en la relación de dispersión lineal es  $k^l = 0.070$ , lo que implica que la longitud de onda lineal es  $l^l = 98$ , mientras que en las figuras 5.2 (a) y (b) se tiene  $k^l = 0.30$  y  $l^l = 42$ . Efectivamente, podemos comprobar en la figura 5.2 que la inestabilidad en el caso de (a) y (b) se desarrolla a tamaños más pequeños y tiempos más cortos que en el caso de las figuras 5.1 (a) y (b), y es del orden de estos valores de  $l^l$ . Tras esta etapa, se forma un patrón de parábolas ordenadas que crece hasta alcanzar una determinada longitud de onda, y que estudiaremos en detalle en las próximas secciones. Si recordamos del capítulo anterior, se tenía  $k^l \sim \epsilon^{1/2}$ ; así, el hecho de que  $k^l$  sea más pequeño en el caso de las figuras 5.1 (a) y (b) que para el caso de 5.2 (a) y (b) es el responsable de que la ecuación efectiva describa mejor la evolución de  $h$  para el primer caso, tal y como se observa al comparar las gráficas 5.1 (b) y 5.2 (b). Por otro lado, para valores aún menores de  $\epsilon$  los tamaños y los tiempos en los que se desarrolla la inestabilidad lineal son mayores y las simulaciones más costosas.

Como se verá más adelante, una magnitud relevante para entender el comportamiento de la evolución de la intercara es la relación entre los parámetros lineales y



**Figura 5.1** — (a) Evolución temporal del grosor de la capa móvil  $R$  sumada a  $h$  (línea continua) y la altura de la superficie (línea a trazos) para el sistema de ecuaciones (5.1)-(5.4) con  $\bar{\phi} = 0.99$ ,  $\epsilon = 0.03$ ,  $\alpha_2 = 30$ ,  $\alpha_3 = -3$ ,  $R_{eq} = \gamma_0 = \gamma_2 = 1$  y  $D = 10$ ; (b) evolución temporal de  $h$  en el modelo hidrodinámico de dos campos [Ecs. (5.1)-(5.4)] en las mismas condiciones que (a) (línea verde) y para la ecuación efectiva (5.5) con los parámetros correspondientes que se obtienen de la relación (5.6):  $v_0 = -0.0003$ ,  $\nu = 0.009$ ,  $\mathcal{K} = 1.099$ ,  $\lambda_1 = 0.0009$  y  $\lambda_2 = -0.8901$  (línea oscura).



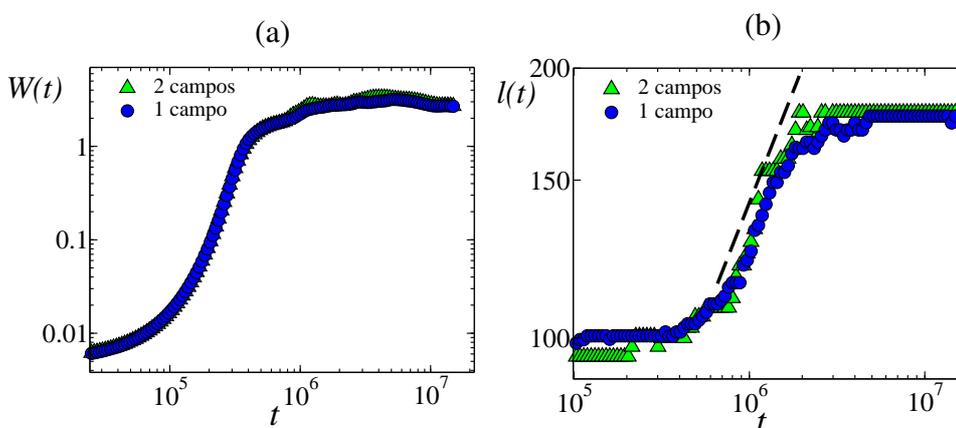
**Figura 5.2** — (a) Igual que la fig. 5.1 (a) con  $\bar{\phi} = 0.9$ ; (b) evolución temporal de  $h$  en el modelo hidrodinámico de dos campos [Ecs. (5.1)-(5.4)] en las mismas condiciones que (a) (línea verde) y para la ecuación efectiva (5.5) con los parámetros correspondientes que se obtienen de la relación (5.6):  $v_0 = -0.003$ ,  $\nu = 0.09$ ,  $\mathcal{K} = 1.99$ ,  $\lambda_1 = 0.009$  y  $\lambda_2 = -0.801$  (línea oscura).

no lineales que definiremos como:  $r = |\nu\lambda_2/(\mathcal{K}\lambda_1)|$ . En el caso de 5.1 (a) y (b) se tiene  $r = 8.1$ , y para 5.2 (a) y (b)  $r = 4.0$ . Antes de estudiar en detalle la ecuación unidimensional efectiva, adelantaremos que este parámetro nos da una medida del orden y el ensanchamiento de las estructuras. Cuanto mayor es  $r$ , más ordenado y

## 5.1 Reducción del modelo “hidrodinámico” de erosión al caso 1d 121

más aumenta el tamaño del patrón, tal y como se verá en la sección 5.3.

En la figura 5.3 se representan las evoluciones temporales de la rugosidad global y la longitud de onda del patrón, definida como la distancia lateral media entre un mínimo local y el siguiente mínimo consecutivo, para el modelo de dos campos y la ecuación efectiva unidimensional. El tamaño del sistema de integración fue  $L = 2048$  y, debido a que se necesitan tiempos de simulación muy largos para que el perfil sature completamente, se promedió sólo sobre cinco realizaciones para el modelo de un campo, y sobre dos realizaciones para el modelo de dos campos. Observamos, de nuevo, que tanto la rugosidad como la longitud del patrón se comportan de forma parecida en ambos modelos. Tras una etapa en la que  $W$  aumenta de forma exponencial debido al crecimiento en amplitud de la inestabilidad lineal (hasta  $t \simeq 3 \times 10^5$ ), le sigue un ensanchamiento en la longitud de onda del patrón en el que la amplitud del mismo también aumenta, pero considerablemente más despacio en la fase anterior. Este crecimiento puede ajustarse a una ley de potencias efectiva, la cual, para el modelo de dos campos de la figura 5.1, verifica  $l \sim t^{0.45}$ . Tras este proceso, el perfil satura ( $t \simeq 3 \times 10^6$ ) y tanto la rugosidad como  $l$  permanecen constantes. En la figura 5.3 (b) se pone de manifiesto el proceso de ensanchamiento de la longitud de onda del patrón, que varía desde su valor correspondiente a la inestabilidad lineal ( $l^l = 98$ ), hasta un valor de saturación cercano a  $l = 180$ .



**Figura 5.3** — Evolución temporal de la rugosidad global,  $W(t)$ , [figura (a)] y de la longitud de onda del patrón,  $l(t)$ , [figura (b)] en el modelo hidrodinámico de dos campos (triángulos) y para la ecuación efectiva (5.5) (círculos) en las mismas condiciones de la figura 5.1. La línea a trazos representa un ajuste a una ley de potencias del modelo de dos campos  $l \sim t^{0.45}$ , que se ha desplazado verticalmente para su mejor visualización.

Los resultados anteriores nos llevan a la conclusión de que, no solamente la ecuación efectiva obtenida captura el comportamiento esencial de la intercara propuesto en el modelo hidrodinámico, sino que la relación (5.5) entre los parámetros es la correcta. Este modelo permitirá explicar, como veremos más adelante y

como ya hemos adelantado en nuestro análisis, algunas características esenciales de la evolución de las superficies sometidas a bombardeo iónico. Entre ellas, el proceso de ensanchamiento interrumpido de las estrías y el orden a corto alcance del patrón.

En la figura 5.4 se muestra la evolución temporal de  $R$  en las mismas condiciones que la figura 5.2. Debemos destacar que los máximos y mínimos de  $R$  coinciden con los de  $h$ . Esto es natural si pensamos en el campo  $R$  como una densidad de material móvil que tiende a relajar el perfil. Debe existir mayor cantidad de material disponible en los máximos para que difunda hacia los mínimos, o dicho de otra forma, la cantidad de material móvil en los mínimos se incorpora más rápidamente al sustrato y desaparece antes. Por otro lado, en el estado estacionario las derivadas temporales se anulan y las ecuaciones (5.1) y (5.2) se reducen a

$$0 = \bar{\phi}\Gamma_{ex} - \Gamma_{ad} + D\partial_x^2 R_s, \quad (5.7)$$

$$0 = -\Gamma_{ex} + \Gamma_{ad}. \quad (5.8)$$

De (5.8) se deduce que  $\Gamma_{ex} = \Gamma_{ad}$ , es decir, en el estado estacionario la cantidad de materia por unidad de tiempo que se excava y la que se añade al sustrato es la misma. Sustituyendo este resultado en (5.7), se obtiene una ecuación para el grosor superficial de los átomos móviles  $R(x)$  en función del perfil estacionario de altura,  $h(x)$ :

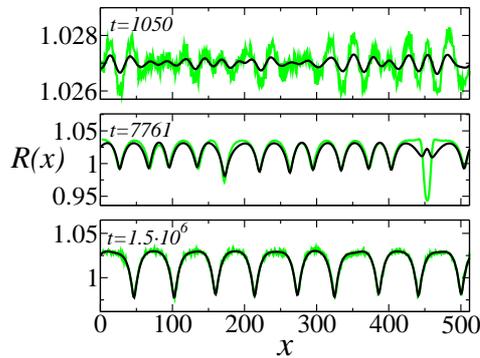
$$R(x) = R_{eq} [1 - \gamma_2 \partial_x^2 h(x)] + \frac{D}{\phi\gamma_0} \partial_x^2 R(x). \quad (5.9)$$

En la figura 5.4 se muestra el valor de  $R$  para diferentes tiempos dados por la expresión (5.9) a partir del valor numérico de las derivadas espaciales de  $R$  y  $h$  en esos instantes. Una forma de evaluar en qué momento se ha alcanzado un perfil estacionario que no evoluciona en el tiempo es comparar el valor de  $R$  obtenido mediante integración numérica del sistema (5.1)-(5.4) y el dado por la expresión (5.9). Podemos observar en la figura 5.4 que, mientras que se desarrolla la inestabilidad y continúa el proceso de ensanchamiento del patrón, ambos valores no coinciden. Lo cual sí ocurre para el instante  $t = 1.5 \times 10^6$ , en el que el sistema ya ha alcanzado el estado estacionario y muestra un perfil con un patrón fijo.

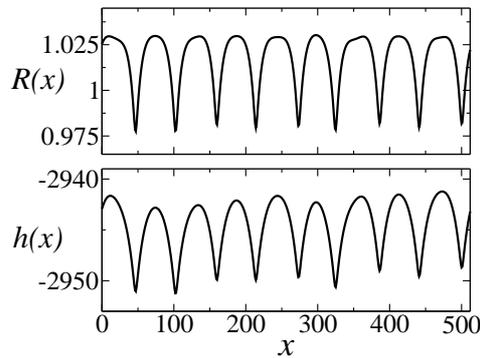
Como se puede comprobar en la figura 5.5, donde se representa el perfil de altura  $h$  y el grosor de la capa móvil  $R$  en  $t = 1.5 \times 10^6$ , las variaciones de  $R$  en torno a su valor de equilibrio  $R_{eq}$  son del orden de  $\epsilon$ , tal y como se dedujo en el capítulo anterior, y mucho más pequeñas que las variaciones en  $h$  [que son del orden de la decena, como también se pone de manifiesto en 5.5]. De esta forma, se puede aproximar la expresión (5.9) por

$$R(x) \approx R_{eq} [1 - \gamma_2 \partial_x^2 h(x)], \quad (5.10)$$

de donde se deduce efectivamente que la cantidad de material disponible para difundir es mayor en los picos (donde la segunda derivada de  $h$  es negativa) que en los valles (donde la segunda derivada es positiva). Este hecho se comprueba en 5.5, donde se observa que los máximos y mínimos locales de  $R$  coinciden con los de  $h$ .



**Figura 5.4** —  $R$  en función de  $x$  obtenido mediante integración numérica del sistema de ecuaciones (5.1)-(5.4) para los mismos parámetros y condiciones iniciales que la figura 5.2 (línea oscura), y valor de  $R$  dado por la expresión (5.9) a partir de las derivadas espaciales de  $R$  y  $h$  en ese instante (línea verde).



**Figura 5.5** —  $R$  y  $h$  en función de  $x$  obtenido mediante integración numérica del sistema de ecuaciones (5.1)-(5.4) para los mismos parámetros y condiciones iniciales que la figura 5.2 en  $t = 1.5 \times 10^6$ .

## 5.2. Estado actual de la teoría de evolución de patrones para ecuaciones interfaciales

Tal y como ya hemos adelantado en la sección anterior, la ecuación (5.5) presenta la formación de un patrón cuya longitud de onda y amplitud crecen en el transcurso del tiempo. Como se estudio en el capítulo 1, los procesos que dan lugar a que se formen patrones aparecen con asiduidad en la naturaleza y constituyen uno de los campos de investigación más activos en las últimas décadas. Con el fin de describir estos sistemas, y debido a que es una forma efectiva de describir analítica y numéricamente este tipo propiedades morfológicas, se suelen utilizar este tipo de ecuaciones que describen la evolución de la altura de la superficie y que presentan invariancia bajo traslación global en  $h$  ( $h(x, t) \rightarrow h(x, t) + cte.$ ). Las ecuaciones que presentan la formación de estas estructuras pueden clasificarse en diferentes tipos dependiendo de si la longitud de onda del patrón,  $l$ , y su amplitud,  $A$ , son estacionarias o evolucionan en el tiempo. En particular, sería interesante deducir algunos criterios que pudieran darnos información sobre el comportamiento temporal del patrón a partir de la ecuación de evolución considerada. Esto se hace en las referencias Politi y Misbah (2004) y Politi y Misbah (2006), donde se desarrolla un criterio general a partir del método de la ecuación de la fase [Cross y Hohenberg 1993] para clasificar la evolución no lineal de sistemas que presentan formación de patrones y que son descritos por ecuaciones para la altura de la intercara. Este método consiste en estudiar perturbativamente la modulación de la fase de un patrón periódico. Basándose en él, en estos trabajos se proponen cuatro

escenarios diferentes que dependen del comportamiento de la longitud de onda del patrón en función de su amplitud para una gran variedad de ecuaciones conservadas y no-conservadas. Se encuentra que, si  $l(A)$  es una función decreciente, el sistema desarrolla un perfil cuya amplitud y longitud de onda permanecen constantes en el transcurso del tiempo. Si  $l(A)$  es una función creciente, el patrón crece en amplitud y longitud de onda indefinidamente, igual que ocurriría si  $l(A)$  es una función decreciente para valores pequeños de  $A$ , pero crece para valores de  $A$  suficientemente grandes. Esto ocurre en los modelos estándar de Ginzburg-Landau y Cahn-Hilliard. En Politi y Misbah (2006) se utiliza esta técnica para obtener cómo crece el patrón en función del tiempo, y se deduce que en los dos casos anteriores  $l \sim \log(t)$ . En el caso de que  $l(A)$  comience a crecer y luego decrezca con  $A$ , el ensanchamiento del patrón se interrumpe, pero la amplitud crece indefinidamente. En cualquier caso, al igual que fue conjeturado por J. Krug para ecuaciones unidimensionales que describan de forma local la evolución de la altura en el contexto de crecimiento, no parece posible encontrar una ecuación que describa la aparición y evolución de un patrón que alcance una longitud de onda y amplitud constantes [Krug 2001]. Estas conclusiones parecen contradecir los resultados mostrados anteriormente, donde se dedujo una ecuación efectiva para la evolución de  $h$  que parece mostrar un patrón cuya longitud de onda y amplitud crecen hasta alcanzar un tamaño estacionario.

En la siguiente sección estudiaremos en detalle la ecuación (5.5) tanto numérica como analíticamente para llegar a la conclusión que, al menos para cortas distancias, efectivamente representa un ejemplo de ecuación unidimensional de evolución local que muestra la aparición y evolución de un patrón ordenado cuyo tamaño satura en el tiempo. Estos resultados nos ayudarán a entender qué mecanismos provocan que este ensanchamiento se interrumpa y qué tipo de no linealidades lo provocan.

### 5.3. Estudio de la ecuación efectiva de erosión unidimensional

En la sección 5.1 habíamos deducido la siguiente ecuación de evolución para la altura de la intercara

$$\partial_t h(x, t) = -\nu \partial_x^2 h - \mathcal{K} \partial_x^4 h + \lambda_1 (\partial_x h)^2 + \lambda_2 \partial_x^2 (\partial_x h)^2, \quad (5.11)$$

donde hemos eliminado el parámetro  $v_0$  sin más que considerar un sistema de referencia que se mueva con velocidad uniforme respecto al original según la transformación  $h \rightarrow h + v_0 t$ , y donde el resto de los parámetros están relacionados con los del sistema hidrodinámico de dos campos según (5.6), los cuales dependen de las condiciones experimentales.

La versión determinista de la ecuación (5.11) no ha sido aún estudiada. Aquí nos limitaremos a analizar su comportamiento para los valores de los coeficientes que son de interés en el contexto de la formación de patrones. Para que se produzca

una inestabilidad lineal para grandes longitudes de onda se debe verificar que  $\nu$  y  $\mathcal{K}$  sean positivos, tal y como ocurre en el contexto de la erosión iónica. Por otro lado, tal y como se mostró en la sección 3.5.5, para que los términos no lineales no se cancelen y la descripción continua sea adecuada, los coeficientes  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$  deben tener distinto signo. Si cambiamos simultáneamente los signos de  $\lambda_1$  y  $\lambda_2$ , la ecuación (5.11) permanece invariante bajo la transformación  $h \rightarrow -h$ . Esto nos permitirá poder considerar sólo el signo positivo para  $\lambda_1$  y el negativo para  $\lambda_2$ , pues el otro caso es equivalente a invertir el perfil. Para  $\lambda_2 = 0$  la ecuación (5.11) se reduce a la conocida Kuramoto-Sivashinsky (KS) que se presentó en la sección 1.5.4, la cual presenta un patrón de longitud de onda fija que se desordena en el transcurso del tiempo. Por otro lado, si  $\lambda_1 = 0$ , se tiene la ecuación conocida como ecuación de Kuramoto-Sivashinsky conservada que se presentó en la sección 1.5.6. Tal y como se mostró allí, esta ecuación presenta un patrón de parábolas yuxtapuestas cuyas longitud de onda y amplitud aumentan indefinidamente en el tiempo.

Con el fin de reducir el número de parámetros de la ecuación (5.11) y simplificar nuestro análisis, podemos reescalar  $x$ ,  $t$  y  $h$  según  $x \rightarrow (\mathcal{K}/\nu)^{1/2}x$ ,  $t \rightarrow (\mathcal{K}/\nu^2)t$  y  $h \rightarrow (\nu/\lambda_1)h$ , de forma que resulta la ecuación uniparamétrica

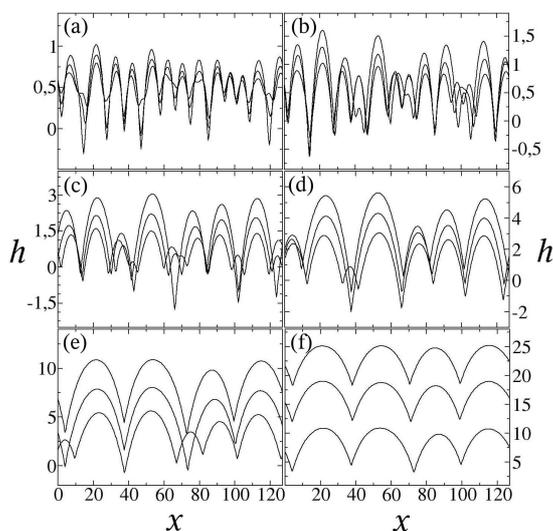
$$\partial_t h(t, x) = -\partial_x^2 h - \partial_x^4 h + (\partial_x h)^2 - r \partial_x^2 (\partial_x h)^2, \quad (5.12)$$

donde  $r = -(\nu\lambda_2)/(K\lambda_1)$  es un parámetro positivo (ver apartado 5.1.1) que mide la relación entre los parámetros lineales y los no lineales. De hecho,  $\sqrt{\mathcal{K}/\nu}$  y  $\sqrt{\lambda_2/\lambda_1}$  tienen dimensiones de longitud y representan medidas de las distancias de “crossover” entre los términos lineales y entre los no lineales. Podemos así estudiar todo el rango de parámetros de la ecuación (5.11) sin más que aplicar las transformaciones adecuadas y conocer el comportamiento de (5.12) para todo  $r$ .

Para llevar a cabo este análisis se ha implementado en C++ un código de integración de Runge-Kutta de cuarto orden utilizando la discretización mejorada propuesta por Lam y Shin [Lam y Shin 1998] para los términos no lineales. Se han utilizado condiciones de contorno periódicas y un espaciado de red constante con  $\Delta x = 0.5$  y  $\Delta t = 0.01$  tras comprobarse que los resultados no se modificaban apreciablemente si se reducían aún más estos valores. Los valores iniciales para la altura que se mostrarán en esta sección están uniformemente distribuidos entre 0 y 1, y los promedios estadísticos se han realizado sobre 250 condiciones iniciales diferentes. El tamaño típico de las simulaciones aquí presentadas es de  $L = 512$  (1024 nodos) salvo cuando se indique otra cosa, y los coeficientes se fijarán a  $\nu = 1$ ,  $\mathcal{K} = 1$ ,  $\lambda = 0.1$ , donde variaremos  $\lambda_2$  con el fin de modificar el valor de  $r$ . De esta forma se fijará el tamaño de la inestabilidad lineal a  $l^l = 2\pi\sqrt{2\mathcal{K}/\nu} = 8.9$ , lo que significa que nuestro espaciado de red es aproximadamente 18 veces más pequeño que esta distancia; esto permite una integración adecuada, y podremos analizar el proceso de ensanchamiento hasta un longitud unas 60 veces mayor que  $l^l$ .

Utilizando el esquema de integración anterior se ha obtenido la evolución del perfil de alturas mostrada en la figura 5.3 para  $r = 50$ . A partir de una condición

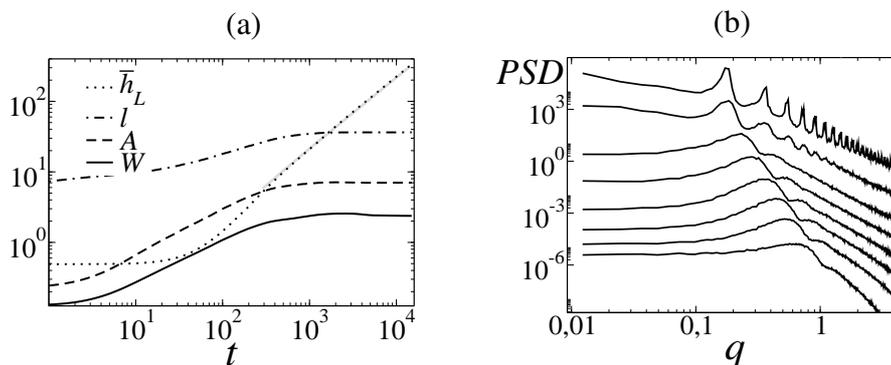
**Figura 5.6** — Perfil de alturas para la ecuación (5.12) con  $r = 50$  para un sistema de tamaño  $L = 128$  (256 nodos) en los tiempos (a)  $t = 2, 6, 11$ ; (b)  $t = 11, 24, 41$ ; (c)  $t = 41, 70, 103$ ; (d)  $t = 103, 153, 205$ ; (e)  $t = 205, 302, 425$ ; (f)  $t = 425, 764, 1024$ . El perfil evoluciona de forma que el valor máximo de  $h$  se alcanza para tiempos posteriores.



inicial aleatoria se forma una estructura periódica, cuya longitud de onda se corresponde con el máximo de la relación de dispersión lineal,  $l^l$ , y cuya amplitud crece de forma exponencial en el transcurso tiempo [figura 5.3 (a)]. Para tiempos posteriores, las pendientes aumentan y los términos no lineales se hacen relevantes con lo que se frena el crecimiento de la inestabilidad. En primer lugar interviene la no linealidad conservada,  $\partial_x^2(\partial_x h)^2$  (CKPZ), que como en la ecuación (1.39) provoca la aparición de una serie de celdas parabólicas ordenadas cuyos tamaños aumentan con el tiempo; por lo tanto, el número de éstas disminuye como consecuencia de que las más pequeñas son absorbidas por las vecinas mayores [figuras 5.3 (b)-(e)].

En la figura 5.7 (a) se muestra la evolución en el tiempo de la altura media de la superficie,  $\bar{h}(t)$ , definida en (1.2), la longitud de onda y amplitud del patrón,  $l(t)$  y  $A(t)$ , definidas como el valor medio de la distancia lateral entre dos mínimos locales consecutivos y la diferencia de altura entre un mínimo local y el siguiente máximo local, respectivamente, y la rugosidad global,  $W(t)$ , definida en (1.1). Como se observa en esta figura, la altura media de la superficie  $\bar{h}(t)$  comienza a crecer a partir de  $t \approx 70$ . Esto es debido a que el término no conservado,  $(\partial_x h)^2$  (KPZ), el cual es el único responsable de que la altura promedio no se conserve, comienza a ser relevante. Al mismo tiempo, el proceso de crecimiento de  $l$  y  $A$  se frena, hasta que se alcanza un estado estacionario con un patrón de longitud de onda y amplitud fijas, que se desplaza a velocidad constante en la dirección de  $h$  [figura 5.3 (f)].

Este comportamiento pone de manifiesto que el término CKPZ actúa a las escalas más pequeñas y es el responsable de que aparezca un patrón ordenado cuyo tamaño de las celdas aumenta en el tiempo, como en la ecuación (1.39). Una vez las pendientes son lo suficientemente grandes como para que el término KPZ deje

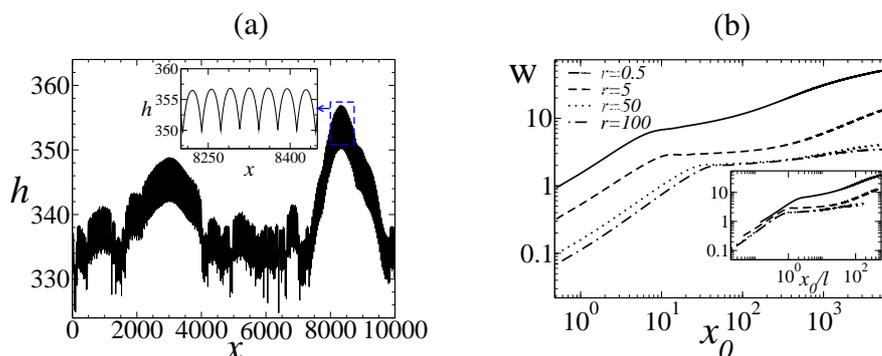


**Figura 5.7** — (a) Evolución temporal de la altura media  $\bar{h}(t)$ , de la longitud de onda  $l(t)$  y de la amplitud  $A(t)$  del patrón, y de la rugosidad global de la superficie  $W(t)$ , para  $r = 50$ ; (b) factor de estructura ( $PSD$ ) correspondiente en función del vector de onda  $q$  para  $t = 4, 15, 30, 60, 125, 250, 1129$ , y  $10653$  (de abajo arriba, respectivamente). Las curvas se han desplazado verticalmente para su mejor visualización.

de ser despreciable, éste provoca que se interrumpa el crecimiento de las celdas; de esta forma, la longitud de onda y amplitud finales del patrón dependen de la relación entre el término CKPZ y el KPZ. Una vez se ha alcanzado un estado estacionario para la longitud de onda y amplitud del patrón, la pendiente media de la superficie se hace independiente de  $t$  y la altura media de la superficie se deslaza con velocidad uniforme.

En la figura 5.7 (b) se muestra el factor de estructura, definido en (1.3), para diferentes tiempos. El primer máximo local indica la longitud de onda del patrón. Podemos ver cómo este pico se desplaza hacia valores más pequeños de  $q$ , lo cual pone de manifiesto el proceso de ensanchamiento de las celdas en el transcurso del tiempo, hasta alcanzar un valor fijo en torno a  $q_0 = 0.17$ , lo cual está de acuerdo con el valor estacionario de  $l = 36$  que se observa en la figura 5.7 (a). Además, la aparición de picos secundarios en la  $PSD$  pone de manifiesto la periodicidad y el mayor orden del sistema para tiempos largos. Estos picos aparecen cuando la periodicidad en la superficie es grande y el patrón se encuentra muy ordenado [Zhao, Wang y Lu 2001].

Aunque se mantiene el orden lateral del patrón para distancias intermedias (ver recuadro interior de la figura 5.8 (a); notar la diferencia de escalas entre el eje  $x$  y el eje  $y$ ), para sistemas de tamaño suficientemente grande y distancias varios órdenes de magnitud mayores que  $l$ , el perfil se desordena en altura como se muestra en la figura 5.8 (a). Este desorden se pone de manifiesto en el comportamiento del factor de estructura,  $PSD(q)$ , que sigue una ley de potencias para distancia menores que  $q_0$ , o de forma equivalente, en el de la rugosidad local,  $w$ , en función de la ventana considerada,  $x_0$ , para tiempos largos que se muestra en la figura 5.8 (b). Debido a que las celdas pueden describirse de forma aproximada por una función parabólica (tal y como se verá a continuación), para valores de  $x_0$  pequeños la rugosidad local



**Figura 5.8** — (a) Perfil de altura en  $t = 15000$  para  $r = 50$  y un sistema de tamaño  $L = 10000$ ; (b) anchura local  $w$ , frente al tamaño de la ventana  $x_0$ , en  $t = 15000$  para diferentes valores de  $r$  y  $L = 8192$ . Recuadro interior: los mismos datos que en la figura anterior pero frente a  $x_0/(2\sqrt{6r})$ .

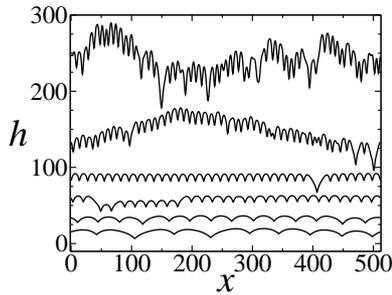
aumenta como:  $w \sim x_0^2$ . Para distancias intermedias (del orden de varias decenas el tamaño de las celdas) la rugosidad local permanece constante como consecuencia del orden del patrón, mientras que para distancias suficientemente grandes la rugosidad presenta rugosidad cinética. El exponente que caracteriza este comportamiento se aproxima más al valor de la clase de universalidad de las ecuaciones KS y KPZ ( $\alpha = 1/2$ ) a medida que disminuye el valor de  $r$ .

En la figura 5.9 se muestra el perfil de altura para tiempos suficientemente largos.<sup>1</sup> Se observa que, mientras que para valores grandes de  $r$  el patrón se encuentra muy ordenado (por ejemplo, para  $r = 10$  el orden lateral alcanza unas 30 celdas), cuanto menor es el valor de  $r$ , más desordenada se encuentra la superficie y más recuerda la forma de los perfiles obtenidos al integrar la ecuación KS [ver figura 1.6]. De hecho, para valores de  $r \approx 0.2$  ó menores, e independientemente de  $L$ , los picos secundarios en el factor de estructura desaparecen y sólo permanece un máximo muy poco pronunciado en torno a la longitud correspondiente a la inestabilidad lineal de forma similar a como ocurre en la ecuación KS.

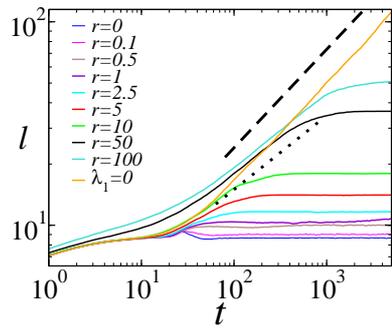
Por otro lado, cuando aumentamos  $r$ , la pendiente para la evolución temporal de  $l$  se hace más pronunciada, como se puede comprobar en la figura 5.10, donde se representa  $l$  frente a  $t$  para diferentes valores de  $r$ . Así, cuanto mayor es el valor de  $r$  el proceso de ensanchamiento dura más tiempo. Además, si ajustamos el comportamiento de  $l$  a una ley de potencias, el valor del exponente obtenido se acerca cada vez más al valor asintótico de  $1/2$  de la ecuación (1.39), tal y como se pone de manifiesto en la figura 5.10.

Como ya se ha indicado, para valores grandes de  $r$  y tiempos largos, el sistema muestra un perfil celular ordenado con una longitud lateral característica lo sufi-

<sup>1</sup>Cuando decimos que nos encontramos en tiempos suficientemente largos, estamos indicando que las características generales del patrón, como su rugosidad global, longitud de onda o amplitud han alcanzado la saturación.



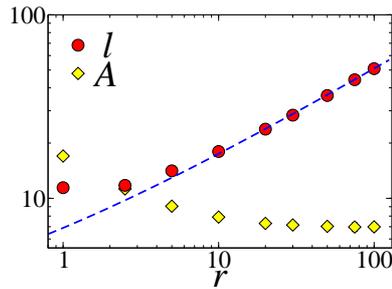
**Figura 5.9** — Perfiles de altura en  $t = 15000$  para  $r = 0.1, 0.5, 1, 5, 10, 50,$  y  $100$  (de abajo arriba, respectivamente)



**Figura 5.10** — Evolución temporal de  $l$  para diferentes valores de  $r$ . Las líneas a trazos y punteada representan el ajuste leyes de potencias para el caso de  $\lambda_1 = 0$  [Ec. (1.39)] y  $r = 100$ , donde se obtuvo  $l \sim t^{0.49}$  y  $l \sim t^{0.40}$ , respectivamente. Ambas están desplazadas verticalmente para su mejor visualización.

cientemente grande como para que podamos despreciar la derivada cuarta frente al resto de términos de (5.12). Si esto es así, podemos reescalar según  $x \rightarrow r^{1/2}x$ ,  $t \rightarrow rt$  y  $h \rightarrow h$  para obtener una ecuación efectiva sin ningún parámetro, de la forma

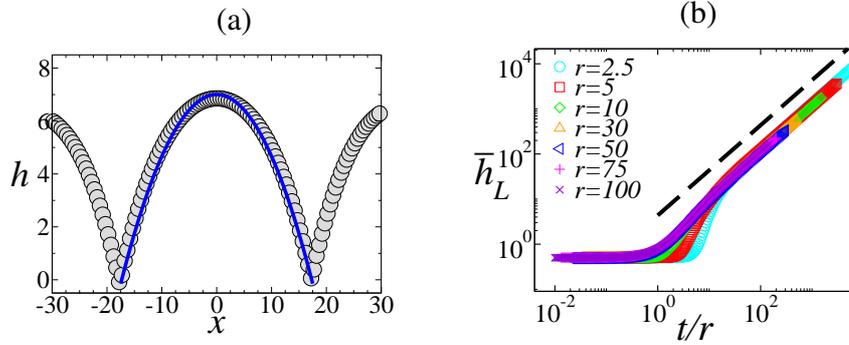
$$\partial_t h(t, x) = -\partial_x^2 h + (\partial_x h)^2 - \partial_x^2 (\partial_x h)^2. \quad (5.13)$$



**Figura 5.11** — Valores estacionarios de la longitud de onda,  $l$ , y amplitud,  $A$ , para diferentes valores de  $r$  (el valor de los errores estadísticos es menor que el tamaño de los puntos). La línea a trazos se corresponde con  $l = 2\sqrt{6r}$ .

Esto significa que para  $r$  suficientemente grandes y tiempos suficientemente largos, la solución de la ecuación (5.12) es la misma que la de la ecuación (5.13), sin más que reescalar las longitudes por  $r^{1/2}$  y los tiempos por  $r$ . Con el fin de comprobar esta suposición, en la figura 5.11 se muestra el valor de la amplitud y longitud de onda finales del patrón para diferentes valores de  $r$ . Efectivamente, para valores grandes de  $r$ , la amplitud estacionaria de las celdas no cambia de tamaño, mientras que  $l$  escala como  $r^{1/2}$ . Este comportamiento se reproduce también en

el recuadro interior de la figura 5.8 (b), donde se ha reescalado la longitud de la ventana por  $2\sqrt{6r}$  (más abajo se verá por qué escogemos este valor) y se observa que las curvas colapsan para  $r$  suficientemente grandes.



**Figura 5.12** — (a) Perfil de altura estacionario en  $t = 15000$  para  $r = 50$ . La línea continua representa la solución aproximada dada por (5.14) para  $l = 2\sqrt{6r}$  y  $A = 7$ ; (b) altura media de la superficie para diferentes valores de  $r$  en función de  $t/r$ . La línea a trazos viene dada por (5.17).

Podemos detallar más la descripción de la dinámica de la superficie si recordamos, como se señaló en la sección 1.5.6, que la solución de la ecuación (5.11) con  $\lambda_1 = 0$  es una serie de parábolas de la forma

$$h(x) = A - \frac{4A}{l^2} x^2. \quad (5.14)$$

Si consideramos esta función como una aproximación a la solución de (5.12) [ver figura 5.12 (a)] para valores de  $\lambda_1$  pequeños o, lo que es equivalente, de  $r$  grandes, podemos usar esta función para estimar la longitud de onda final del patrón. Si suponemos que en el estado estacionario las contribuciones para la ecuación (5.12) del término KPZ y del término CKPZ en un periodo son iguales, se tiene

$$\frac{1}{l} \int_{-l/2}^{l/2} [\partial_x h(x)]^2 dx = \frac{r}{l} \int_{-l/2}^{l/2} \partial_x^2 [\partial_x h(x)]^2 dx, \quad (5.15)$$

donde sustituyendo la expresión (5.14) para  $h(x)$  se llega a que

$$\int_{-l/2}^{l/2} x^2 dx = 2r \int_{-l/2}^{l/2} dx. \quad (5.16)$$

A partir de la integración de (5.16) se deduce el valor de la longitud de onda del patrón en el estado estacionario, este es  $l = 2\sqrt{6}$ . Esta función se representa en la figura 5.11, donde vemos que ajusta perfectamente los valores de la longitud de onda estacionaria obtenida numéricamente para valores grandes de  $r$ .

Otra forma de comprobar estas suposiciones es a partir de la velocidad neta de crecimiento. La velocidad de desplazamiento de  $\bar{h}$ , que denominaremos  $v$ , se debe

exclusivamente al término no conservado y se verifica que  $v = \left\langle \lambda_1 \overline{[\partial_x h(x)]^2} \right\rangle$ , donde como en (1.2) la línea superior indica el promedio espacial. Si tomamos (5.14) como aproximación a la solución de la ecuación, podemos integrar sobre un periodo y obtener dicha velocidad de desplazamiento. El resultado es

$$\bar{h}_L(t) = vt \approx \lambda_1 \left( \frac{1}{l} \int_{-l/2}^{l/2} [\partial_x h(x)]^2 dx \right) t = \lambda_1 \frac{11}{r} t, \quad (5.17)$$

donde hemos sustituido  $l = 2\sqrt{6r}$ , y  $A \approx 7$  se desprende de la figura 5.11.

En la figura 5.12 (b) se representa el valor de  $\bar{h}$  en función de  $t/r$  obtenido numéricamente para diferentes valores de  $r$ . Tal y como habíamos indicado, al reescalar  $t \rightarrow rt$ , la evolución de  $\bar{h}$  se hace independiente del valor de  $r$ . Además, el valor de la pendiente,  $v$ , de las curvas colapsadas, coincide con el dado por la expresión (5.17), que también se representa en la figura 5.12 (b) (línea a trazos).

## 5.4. Relación con los parámetros experimentales

Hemos visto en este capítulo que la evolución de la intercara descrita ya por la ecuación de erosión unidimensional (5.11) comparte muchas características cualitativas con las observaciones experimentales. Entre ellas, la aparición y evolución de un patrón ordenado cuyo tamaño puede saturar en el tiempo y que se desordena a distancias mucho mayores. Lo ideal, sin embargo, sería poder cuantificar el valor de los parámetros que aparecen en (5.5). A partir de las teorías continuas de erosión se pueden relacionar los coeficientes de  $\Gamma_{ex}$  con los parámetros experimentales, y en el caso de  $\Gamma_{ad}$ , hay estimaciones de la mayoría de los parámetros. No existe en la literatura, sin embargo, un estudio sistemático de cómo varía la densidad de material móvil dependiendo de las condiciones experimentales y de la posible relación de la velocidad de intercambio de material con la geometría local. Se pueden obtener, sin embargo, algunas conclusiones importantes si analizamos en detalle los coeficientes de la ecuación (5.5) a la luz de los resultados de la sección anterior.

Para estudiar (5.11), en la sección 5.3 se reescaló  $x$ ,  $t$  y  $h$  con el fin de obtener una ecuación uniparamétrica. Para aquellos valores de los parámetros que hacen  $r$  grande, la longitud de onda del patrón de la ecuación reescalada es  $l' \sim 2\sqrt{6r}$  que, volviendo a las variables originales, es  $l \sim 2\sqrt{6r}(\mathcal{K}/\nu)^{1/2} = 2\sqrt{6}\lambda_2/\lambda_1$ . Esta relación sólo se verifica si  $r$  es grande o, lo que es lo mismo,  $\mathcal{K}/\nu$  debe ser pequeño, lo cual no ocurre, en general, en nuestros sistemas, en los que la inestabilidad lineal es de gran longitud de onda. Por tanto, no podemos utilizar directamente la expresión anterior para estimar la anchura del patrón en la mayoría de los casos. Lo que sí podemos aventurar es que, si se observa un ensanchamiento pronunciado de las estrías, esto sólo puede deberse a que  $\lambda_2/\lambda_1 \gg 1$ , y como

$$\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = \left( \frac{\bar{\phi}D - \phi R_{eq} \gamma_0 \gamma_2}{\phi \gamma_0} \right)^{1/2}, \quad (5.18)$$

esto sólo ocurre si la mayor parte del material se redeposita en la superficie y la difusividad es alta. Es decir, se necesita una gran cantidad de material en difusión superficial para que  $\lambda_2$  sea más importante que  $\lambda_1$  y se tenga un patrón ordenado cuya longitud de onda crezca apreciablemente en el transcurso del tiempo.

Al igual que ocurría en las teorías continuas de erosión, en el régimen de altas temperaturas las dependencias de la longitud de onda asociada a la inestabilidad lineal son del mismo tipo que las obtenidas por Bradley y Harper, es decir,  $l_l \sim (1/T^{1/2}) \exp(-\Delta E/2k_B T)$ ,  $l_l \sim E^{-1/2}$  y  $l_l \sim \Phi_0^{-1/2}$ . Sin embargo, la longitud de onda del patrón una vez ha saturado no tiene por qué seguir este comportamiento. En el caso de que nos encontremos en el régimen en el que ocurre un ensanchamiento de las estructuras, habrá que estudiar en función de qué se altera la difusión superficial y la cantidad de material transferido desde la capa móvil a la inmóvil y viceversa, para determinar la dependencia con los parámetros experimentales.

## 5.5. Conclusiones

En el transcurso de este capítulo hemos derivado y estudiado el modelo hidrodinámico en el caso unidimensional. Se ha obtenido una ecuación efectiva que hemos comparado con el modelo hidrodinámico de dos campos. Hemos comprobado numéricamente que en el régimen de parámetros consistentes con nuestras aproximaciones ambos modelos se comportan de la misma forma y la evolución del perfil de altura en ambos casos es equivalente, sobre todo a tiempos cortos, es decir, cuando la inestabilidad lineal aún se está desarrollando y las aproximaciones efectuadas en el umbral de la inestabilidad lineal son más consistentes. Para tiempos más largos, cuando los términos no lineales son fundamentales en la evolución, la ecuación efectiva también captura las características esenciales del modelo a dos campos, a saber: presenta un patrón ordenado de forma parabólica cuya anchura y amplitud crece en el tiempo hasta saturar, y que se desordena a distancias mucho mayores.

Debido a que la longitud de onda de la inestabilidad lineal observada experimentalmente es grande (del orden de  $\sqrt{\mathcal{K}/\nu} \sim \epsilon^{-1/2}$ ) nuestras simulaciones necesitan sistemas grandes y tiempos muy largos para que se pueda observar la evolución completa de la morfología. Como la ecuación efectiva es más fácil de analizar, ya que puede reducirse a una ecuación con un único parámetro, y a que en su análisis podemos utilizar otros coeficientes equivalentes que aceleren las simulaciones tras reescalar apropiadamente, y debido a que presenta un comportamiento novedoso y de gran interés dentro de las teorías actuales de ensanchamiento de patrones, la hemos estudiado con cierto detalle analítica y numéricamente.

Hemos visto que (5.5) interpola entre la ecuación KS para  $r = 0$ , la cual presenta una solución caótica en la que el tamaño de las celdas no cambia en el tiempo, y la ecuación KS conservada para  $r = \infty$  (tras el reescalado apropiado  $h \rightarrow h/r$ ), en cuyo caso muestra un ensanchamiento ilimitado de un patrón parabólico. Este

comportamiento es similar al de la ecuación Cahn-Hilliard convectiva [para más detalles ver sección 1.5.6], en el que para un valor pequeño del parámetro de acoplamiento entre la ecuación Cahn-Hilliard y KS aparece un estiramiento logarítmico e ininterrumpido del patrón; pero, a diferencia de este caso, la estructura producida por (5.5) satura a un tamaño fijo y se ordena para distancias mayores que esta longitud lateral. Esta ecuación representa, por tanto, un contraejemplo a la conjetura de Krug (al menos hasta escalas intermedias uno o dos órdenes de magnitud mayores que el tamaño de una sola parábola) y un comportamiento novedoso no descrito en el escenario propuesto en Politi y Misbah (2004) y Politi y Misbah (2006) como se pone de manifiesto en Muñoz-García, Cuerno y Castro (2006).

Hubiera sido interesante poder establecer un parámetro de orden adecuado que nos permitiese estudiar qué tipo de transición existe entre el régimen caótico de la ecuación KS para  $r = 0$  y el régimen ordenado de la ecuación cKS con  $r = \infty$ . Quizá una buena medida hubiera sido una distancia lateral que midiese el tamaño de los dominios en el que las parábolas se encuentran ordenadas. Una medida similar, frecuentemente utilizada en la literatura, es la longitud de correlación  $\zeta$  definida en la sección 1.2. Ésta, sin embargo, no ha resultado de utilidad en nuestro caso donde incluso para valores muy pequeños de  $r$ , cuando la superficie parece tener un comportamiento caótico, se obtuvo un valor muy grande de  $\zeta$ . El criterio que hemos utilizado en la sección 5.3 para sugerir que la superficie aparece desordenada ha sido la desaparición de los picos secundarios en la *PSD*, según el cual se obtuvo que para aproximadamente valores menores que  $r = 0.2$  la ecuación presenta un comportamiento caótico. No pensamos, sin embargo, que éste sea un resultado definitivo y resultaría de interés estudiar en mayor detalle si es posible definir un mejor parámetro de orden que nos permita determinar si existe una transición para un valor finito de  $r$  distinto de cero en el que la ecuación (5.11) presente un comportamiento caótico similar al de la ecuación KS.

En cuanto a la relación con los experimentos, a pesar del avance que supone poder caracterizar una variedad tan amplia de comportamientos y que esta ecuación generaliza las teorías continuas de erosión, aún no estamos en condiciones de hacer una comparación cuantitativa de nuestro modelo con los resultados experimentales. Sin embargo, sí podemos estudiar de forma cualitativa, algunas de las predicciones de nuestro modelo. Esto tiene más interés en el caso bidimensional y en el siguiente capítulo nos dedicaremos a ello, aunque ya podemos adelantar que en el caso de incidencia normal el comportamiento de la morfología obtenido para  $d = 2$  es similar al mostrado en este capítulo.



# 6

---

## Estudio de las ecuaciones de erosión bidimensionales

---

En este capítulo integraremos las ecuaciones efectivas obtenidas en la sección 4.2 para las diferentes posibilidades de orientación de la muestra respecto al haz de iones. Veremos que éstas reproducen satisfactoriamente muchas de las características experimentales observadas en la evolución de la morfología.

### 6.1. Incidencia normal

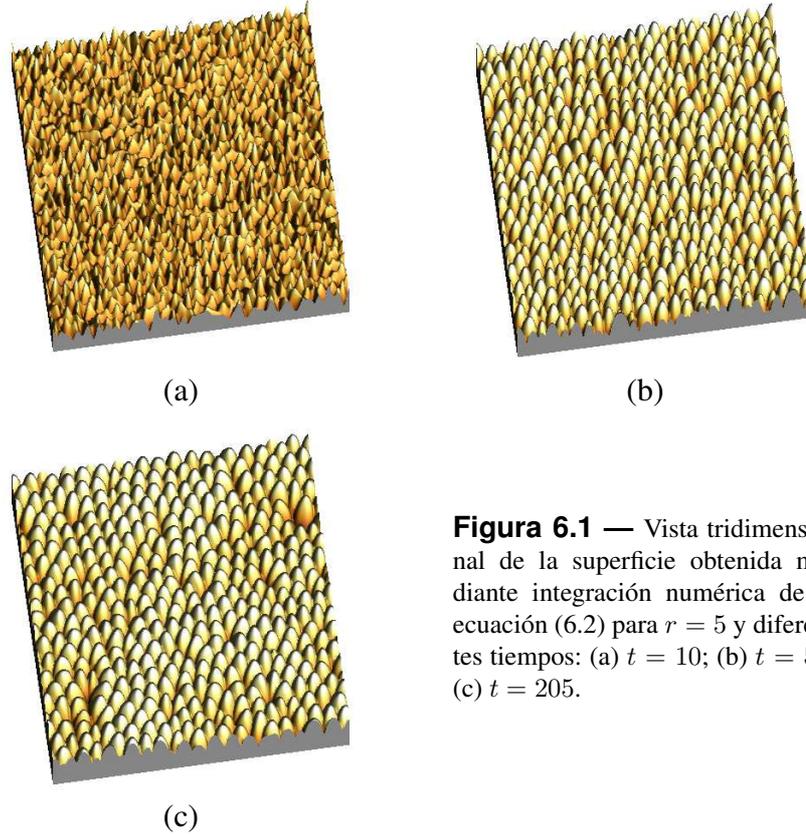
Habíamos visto en el apartado 4.2.2.4 que al bombardear una muestra perpendicularmente a su superficie, si las direcciones en el sustrato son equivalentes como ocurre en materiales amorfos, la ecuación efectiva para la evolución de la altura de la superficie se reducía a

$$\partial_t h = -\nu \nabla^2 h - \mathcal{K} \nabla^4 h + \lambda^{(1)} (\nabla h)^2 + \lambda^{(2)} \nabla^2 (\nabla h)^2, \quad (6.1)$$

donde estos parámetros están relacionados con los del modelo hidrodinámico según (4.77).

Para integrar numéricamente la ecuación (6.1), hemos utilizado un esquema de Euler simple con condiciones de contorno periódicas y un paso espacial y temporal de  $\Delta x = 1$  y  $\Delta t = 0.001$ , respectivamente. En nuestro esquema de integración se empleó la discretización mejorada propuesta por Lam y Shin [Lam y Shin 1998]

para los términos no lineales. Se consideró un sistema de tamaño  $L \times L = 256 \times 256$  y una superficie inicial aleatoria de amplitud de 0.1 con condiciones de contorno periódicas. Hemos comprobado que los resultados aquí mostrados no se ven cualitativamente alterados si se toman otras condiciones iniciales o se reduce el espaciado temporal o espacial en el esquema de integración.



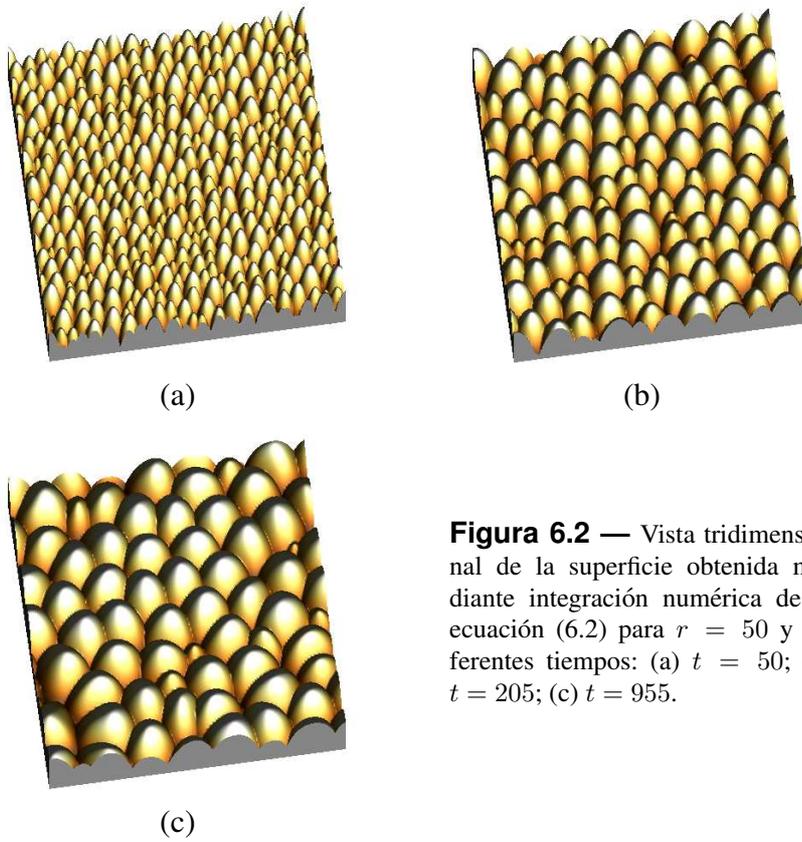
**Figura 6.1** — Vista tridimensional de la superficie obtenida mediante integración numérica de la ecuación (6.2) para  $r = 5$  y diferentes tiempos: (a)  $t = 10$ ; (b)  $t = 50$ ; (c)  $t = 205$ .

Con el fin de simplificar el análisis, al igual que hicimos en la sección 5.3, podemos reducir el número de parámetros de la ecuación (6.1) al reescalar  $x$ ,  $y$ ,  $t$  y  $h$  según  $x \rightarrow (\mathcal{K}/\nu)^{1/2}x$ ,  $y \rightarrow (\mathcal{K}/\nu)^{1/2}y$ ,  $t \rightarrow (\mathcal{K}/\nu^2)t$  y  $h \rightarrow (\nu/\lambda^{(1)})h$ , de forma que se obtiene la siguiente ecuación uniparamétrica

$$\partial_t h = -\nabla^2 h - \nabla^4 h + (\nabla h)^2 - r \nabla^2 (\nabla h)^2, \quad (6.2)$$

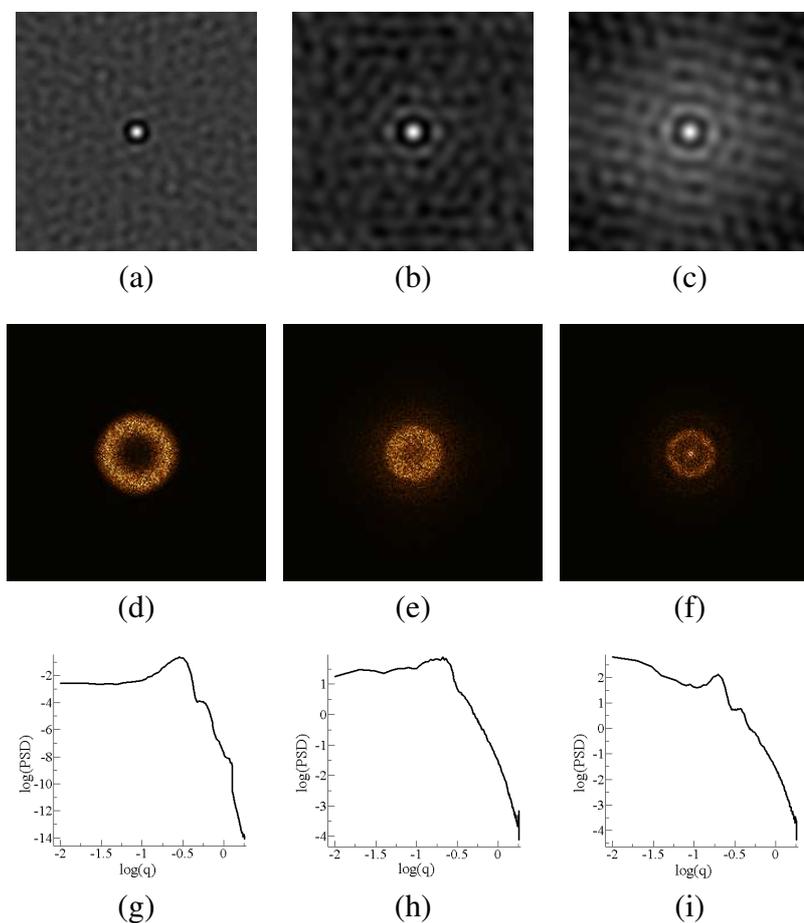
donde  $r = -(\nu\lambda^{(2)})/(K\lambda^{(1)})$  es, como en el capítulo anterior, un parámetro positivo que nos permite estudiar todo el rango de parámetros de la ecuación (6.1) sin más que aplicar las transformaciones adecuadas. De esta forma, fijamos de nuevo los valores de  $\nu = 1$ ,  $\mathcal{K} = 1$  y  $\lambda^{(1)} = 0.1$  y variamos el valor de  $\lambda^{(2)}$  con el fin de modificar el valor de  $r$ .

En la figuras 6.1 y 6.2 se muestran varias imágenes tridimensionales de la evolución morfológica descrita por (6.2) con  $r = 5$  y  $r = 50$  para diferentes tiempos,

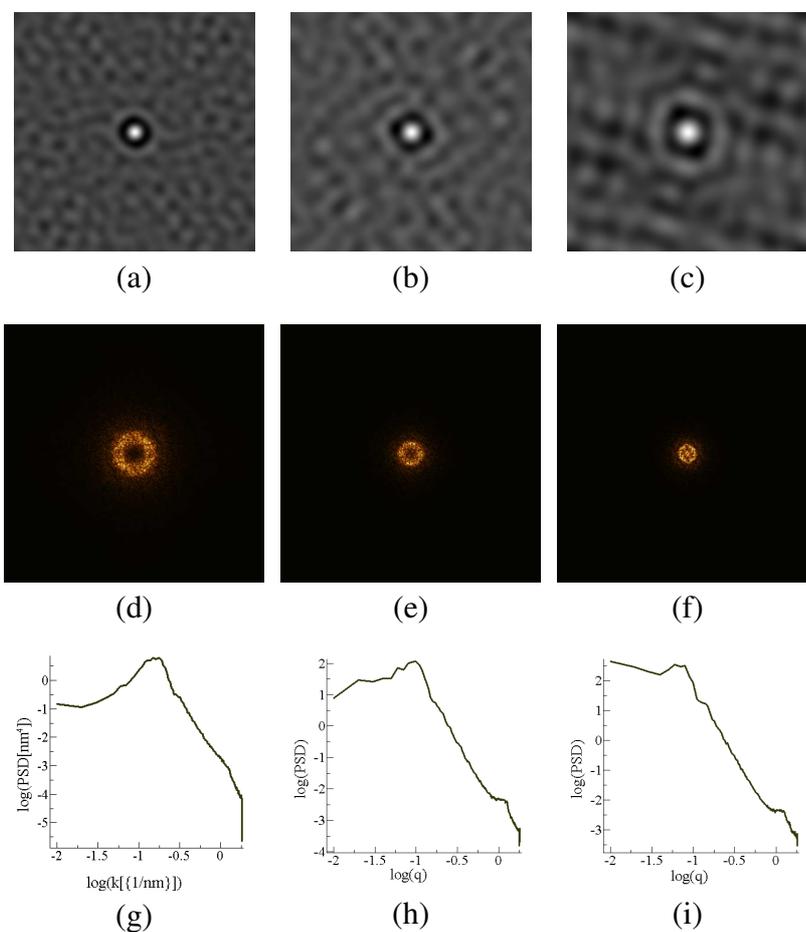


**Figura 6.2** — Vista tridimensional de la superficie obtenida mediante integración numérica de la ecuación (6.2) para  $r = 50$  y diferentes tiempos: (a)  $t = 50$ ; (b)  $t = 205$ ; (c)  $t = 955$ .

mientras que en las figuras 6.3 y 6.4 se presentan la función de autocorrelación y el factor de estructura definidos en la sección 1.2 correspondientes a esas morfologías. En ambos casos se observa un ensanchamiento del patrón parabólico en el transcurso del tiempo. Esto se pone de manifiesto en el máximo local del factor de estructura, que cada vez se sitúa en valores de  $q$  más pequeños [ver figuras 6.3 y 6.4 (d), (e), (f), (g), (h) e (i)]. Para tiempos suficientemente grandes se observa que la curva se inclina para los modos más bajos. Esto indica que la rugosidad del sistema aumenta [recordemos que ésta puede expresarse como la integral de la  $PSD$  tal y como se expresó en (1.6)]. Debido a las limitaciones de nuestras simulaciones, no hemos podido concretar si este comportamiento se ajusta a una ley de potencias, lo que indicaría que la superficie muestra invariancia de escala a distancias mucho mayores que la longitud de onda de las celdas.



**Figura 6.3** — Funciones de autocorrelación correspondientes a las morfologías mostradas en la figura 6.1 en: (a)  $t = 10$ ; (b)  $t = 50$ ; (c)  $t = 205$ . En la misma columna, factor de estructura bidimensional [figuras (d) (e) y (f)] y promedio radial [figuras (g), (h) e (i)] en cada instante frente al vector de onda.

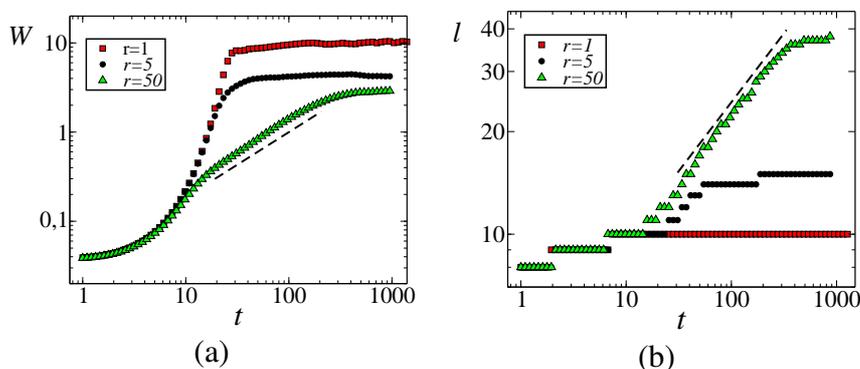


**Figura 6.4** — Funciones de autocorrelación correspondientes a las morfologías mostradas en la figura 6.2 en: (a)  $t = 50$ ; (b)  $t = 205$ ; (c)  $t = 955$ . En la misma columna, factor de estructura bidimensional [figuras (d) (e) y (f)] y promedio radial [figuras (g), (h) e (i)] en cada instante frente al vector de onda.

De la función de autocorrelación [figuras 6.3 y 6.4 (a), (b) y (c)] se deduce que las estructuras se agrupan hexagonalmente. Este orden hexagonal es mayor en el caso de  $r = 5$  que para  $r = 50$ , donde la simetría es más cuadrada para estos tamaños “pequeños”. Además de este orden a cortas distancias, se observa que las estructuras se desordenan a distancias mayores. Todas estas características se encuentran también con bastante frecuencia en los experimentos, tal y como se vio en el capítulo 2.

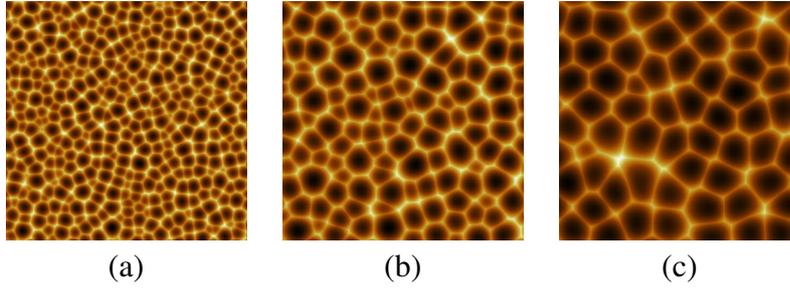
En la figura 6.5 se muestra la evolución temporal de la rugosidad global y la longitud de onda del patrón, calculada como la distancia media al primer máximo local de la función de autocorrelación en una dirección determinada, para diferentes valores de  $r$ . En ambos casos, el patrón satura tras alcanzar un determinado tamaño, pero para  $r = 50$ , el ensanchamiento es mayor y dura más tiempo. En

realidad, este comportamiento es análogo al estudiado para el caso unidimensional; de hecho, el comportamiento de  $l(t)$  coincide con el mostrado en la figura 5.10 para diferentes valores de  $r$ . Si comparamos la figura 6.5 (a) y (b) con la figura 5.7 (a), podemos observar que las evoluciones temporales para los sistemas unidimensional y bidimensional en el caso de  $r = 50$  son muy similares. Tal y como se mostró en la sección 5.3, para valores de  $r$  grandes podemos reescalar las distancias laterales y los tiempos por  $r^{1/2}$  y  $r$  respectivamente, de forma que la distancia lateral del patrón final y el tiempo en el que se alcanza son mayores en el caso de  $r = 50$  que en el de  $r = 5$  ó  $r = 1$ . Respecto a  $W$ , en la figura 6.5 (a) se observa que la rugosidad de saturación es mayor cuanto menor es el valor de  $r$ . Este resultado también es análogo al observado para  $d = 1$ . Para valores pequeños de  $r$ , la superficie se desordena en altura y muestra un perfil rugoso similar al mostrado en la figura 3.16 correspondiente a la ecuación de Kuramoto-Sivashinsky. Para mayores valores de  $r$ , el ensanchamiento de los puntos se produce durante un mayor intervalo de tiempo y la superficie se muestra más ordenada. Para valores grandes de  $r$ , el valor de los exponentes tras ajustar  $W$  y  $l$  a una ley de potencias se aproxima relativamente al comportamiento asintótico de la ecuación con  $r = \infty$  [Ec. (1.39)] para la que  $l \sim t^{1/2}$  y  $W \sim t$ , como ha sido demostrado analíticamente en Frisch y Verga (2006) y Politi y Misbah (2006) y comprobado numéricamente en Raible, Linz y Hänggi (2000). Es de esperar, aunque las simulaciones en el caso bidimensional aún no nos han permitido confirmarlo, que si el tamaño del sistema es varios órdenes de magnitud mayor que la distancia entre las celdas, la superficie muestre un perfil rugoso con invariancia de escala a estas distancias incluso para valores grandes de  $r$ , como ocurría en el caso unidimensional.



**Figura 6.5** — Evolución temporal de la rugosidad global,  $W$ , y de la longitud de onda del patrón,  $l$  en escala logarítmica para diferentes valores de  $r$  para la ecuación (6.1). La línea a trazos representa el ajuste a una ley de potencias para  $r = 50$  en el que se obtuvo  $W \sim t^{0.73}$  y  $l \sim t^{0.40}$ .

También hemos comprobado en nuestras simulaciones que al cambiar el signo de  $\alpha_3$  [lo cual implica hacerlo simultáneamente en  $\lambda^{(1)}$  y  $\lambda^{(2)}$  según la relación (4.77)] el perfil se invierte y se obtiene un patrón de hoyos en vez de un patrón



**Figura 6.6** — Vista cenital de la superficie obtenida mediante integración numérica de la ecuación (6.1) para  $\nu = 1$ ,  $\mathcal{K} = 1$  y  $\lambda^{(1)} = -0.1$  y  $\lambda^{(2)} = 5.0$  en diferentes tiempos: (a)  $t = 50$ ; (b)  $t = 205$ ; (c)  $t = 955$ .

ordenado de puntos, de forma análoga a como ocurría en el caso de la teoría no lineal de erosión iónica mostrado en la sección 3.5.3. En la figura 6.6 se muestran imágenes de la morfología descrita por (6.1) para  $\nu = 1$ ,  $\mathcal{K} = 1$  y  $\lambda^{(1)} = -0.1$  y  $\lambda^{(2)} = 5.0$  en diferentes instantes. En este caso, en vez de puntos con forma de paraboloides se tienen hoyos de la misma forma que crecen en el transcurso del tiempo. De hecho, la evolución de la superficie es equivalente a la de la figura 6.2 para  $r = 50$  si aplicamos la transformación  $h \rightarrow -h$ .

## 6.2. Sustrato rotante

En el caso de que se gire simultáneamente la muestra mientras se bombardea, vimos en la sección 4.2.2.5 que la ecuación que describe la evolución de la morfología es la siguiente

$$\partial_t h = -\nu_r \nabla^2 h - \mathcal{K}_r \nabla^4 h + \lambda_r^{(1)} (\nabla h)^2 + \lambda_r^{(2)} \nabla^2 (\nabla h)^2 + \lambda_r^{(3)} \nabla \cdot [(\nabla^2 h) \nabla h], \quad (6.3)$$

donde la relación entre estos coeficientes con los de la ecuación (4.74) está dada por (4.88).

Es interesante explicitar la forma de los términos correspondientes a  $\lambda_r^{(2)}$  y a  $\lambda_r^{(3)}$  en derivadas de  $h$  en  $x$  e  $y$ . Así, tenemos

$$\nabla^2 (\nabla h)^2 = 2 (h_{xx}^2 + h_x h_{xxx} + h_{xy}^2 + h_{yx}^2 + h_y h_{xxy} + h_x h_{yyx} + h_y h_{yyy} + h_{yy}^2), \quad (6.4)$$

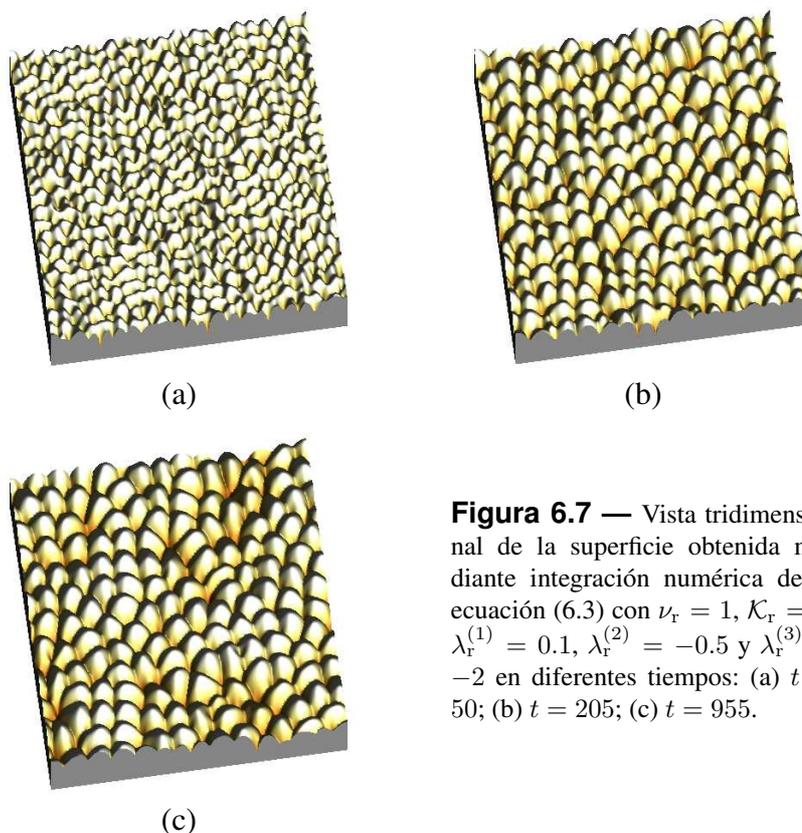
donde los subíndices  $x$  e  $y$  en  $h$  representan las respectivas derivadas. El término correspondiente a  $\lambda_r^{(3)}$  puede escribirse como

$$\nabla \cdot [(\nabla^2 h) \nabla h] = (\nabla h) \cdot \nabla (\nabla^2 h) + (\nabla^2 h)^2, \quad (6.5)$$

donde cada uno de estos términos es

$$(\nabla h) \cdot \nabla (\nabla^2 h) = h_x h_{xxx} + h_x h_{yyx} + h_y h_{yxx} + h_y h_{yyy}, \quad (6.6)$$

$$(\nabla^2 h)^2 = h_{xx}^2 + h_{yy}^2 + 2h_{xx} h_{yy}; \quad (6.7)$$

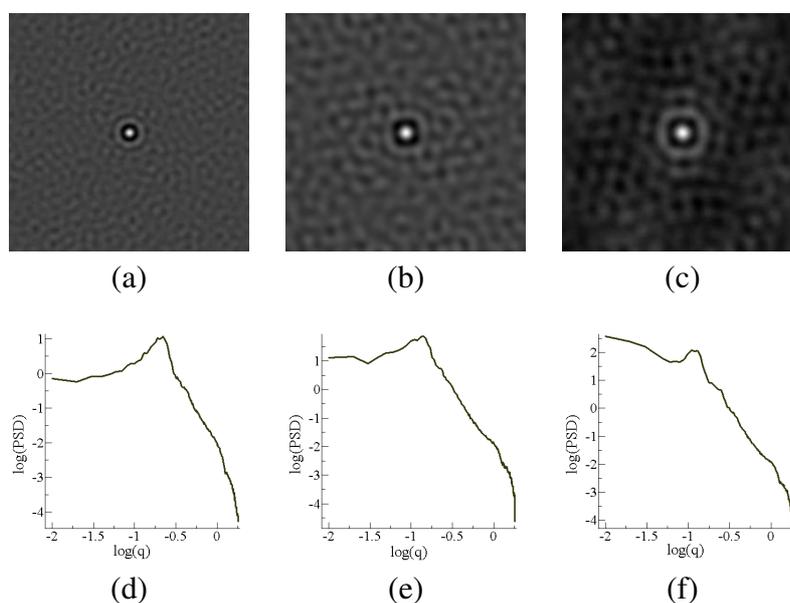


**Figura 6.7** — Vista tridimensional de la superficie obtenida mediante integración numérica de la ecuación (6.3) con  $\nu_r = 1$ ,  $\mathcal{K}_r = 1$ ,  $\lambda_r^{(1)} = 0.1$ ,  $\lambda_r^{(2)} = -0.5$  y  $\lambda_r^{(3)} = -2$  en diferentes tiempos: (a)  $t = 50$ ; (b)  $t = 205$ ; (c)  $t = 955$ .

Los términos  $\nabla^2(\nabla h)^2$ ,  $(\nabla h) \cdot \nabla(\nabla^2 h)$  y  $(\nabla^2 h)^2$  son así los únicos linealmente independientes, cuadráticos en  $h$  y de orden cuarto en derivadas espaciales, con simetría rotacional que mantienen la simetría bajo traslaciones en  $h$ :  $h \rightarrow h + cte$ . Tanto  $\nabla^2(\nabla h)^2$  como  $\nabla \cdot [(\nabla^2 h) \nabla h]$  se reducen al mismo término,  $\partial_x^2(\partial_x h)^2$ , en una dimensión. A continuación, compararemos cualitativamente el efecto de ambos en nuestras simulaciones numéricas.

Si aplicamos la mismas transformaciones que en la sección anterior:  $x \rightarrow (\mathcal{K}/\nu)^{1/2}x$ ,  $y \rightarrow (\mathcal{K}/\nu)^{1/2}y$ ,  $t \rightarrow (\mathcal{K}/\nu^2)t$  y  $h \rightarrow (\nu/\lambda^{(1)})h$ , podemos reducir el número de parámetros de (6.3) a sólo dos. En nuestro caso, se utilizó el mismo esquema de integración que en la sección 6.1, y se fijaron los coeficientes  $\nu_r = 1$ ,  $\mathcal{K}_r = 1$  y  $\lambda_r^{(1)} = 0.1$ , dejando libres  $\lambda_r^{(2)}$  y  $\lambda_r^{(3)}$  con el fin de barrer el espacio de parámetros. Un ejemplo de la evolución de la superficie descrita por (6.3) con  $\lambda_r^{(2)} = -0.5$  y  $\lambda_r^{(3)} = -2$ , de su respectiva función de autocorrelación bidimensional y del promedio radial del factor de estructura se muestra en las figuras 6.7 y 6.8.

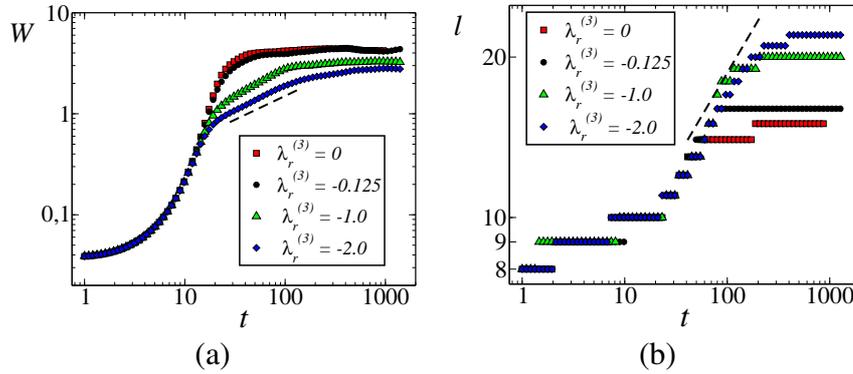
Una propiedad relevante y que sólo se ha observado por ahora en experimentos con sustrato rotante es la agrupación de los puntos en orden cuadrado. A pesar que



**Figura 6.8** — Funciones de autocorrelación correspondientes a las morfologías mostradas en la figura 6.7 en: (a)  $t = 50$ ; (b)  $t = 205$ ; (c)  $t = 955$ . En la misma columna, promedio radial del factor de estructura [figuras (d) (e) y (f)] en ese instante frente al vector de onda.

nuestro esquema de integración no soporta valores de  $\lambda_r^{(3)}$  muy diferentes del rango mostrado en la figura 6.9, sí parece observarse en la función de autocorrelación representada en las figuras 6.8 (a), (b) y (c), que el orden del patrón es menos hexagonal y algo más cuadrado que en el caso de la morfología de la sección anterior. El promedio radial del factor de estructura mostrado en las figuras 6.8 (c), (d) y (f) pone de manifiesto, como ocurría en la sección anterior, el ensanchamiento de la longitud lateral del patrón. Se comprueba que el máximo local se desplaza con el tiempo hacia los modos correspondientes a mayores longitudes de onda a la vez que la curva se inclina para los modos más bajos. Como vimos en la sección anterior, esto indica que la rugosidad del sistema aumenta, al igual que ocurría allí.

Hemos comprobado en nuestras simulaciones que el hecho de modificar el coeficiente  $\lambda_r^{(2)}$  tiene el mismo efecto que en la ecuación (6.1). Al aumentar  $\lambda_r^{(2)}$  crece el tamaño del patrón, disminuye la rugosidad total y el sistema satura más tarde. En el caso de que lo haga  $\lambda_r^{(3)}$ , el efecto es similar. Esto se pone de manifiesto en las figuras 6.9 (a) y (b), en las que se representa la evolución temporal de la rugosidad global y la longitud de onda del patrón. Observamos que, para mayores valores de  $\lambda_r^{(3)}$ , la longitud de onda de saturación del patrón es mayor, la rugosidad menor y el sistema satura más tarde. Otra característica que comparte este término con  $\lambda_r^{(2)}$  es que ambos coeficientes deben tener el signo opuesto a  $\lambda_r^{(1)}$  para que la ecuación sea no linealmente estable, tal y como se ha comprobado en nuestras



**Figura 6.9** — Evolución temporal de la rugosidad global,  $W$ , y de la longitud de onda del patrón,  $l$  para  $\lambda_r^{(2)} = -0.5$  y diferentes valores de  $\lambda_r^{(3)}$  para la ecuación de incidencia rotante (6.3). La línea a trazos representa el ajuste a una ley de potencias para el caso  $\lambda_r^{(3)} = -2.0$  en el que se obtuvo  $W \sim t^{0.47}$  y  $l \sim t^{0.33}$ .

simulaciones.

### 6.3. Incidencia oblicua

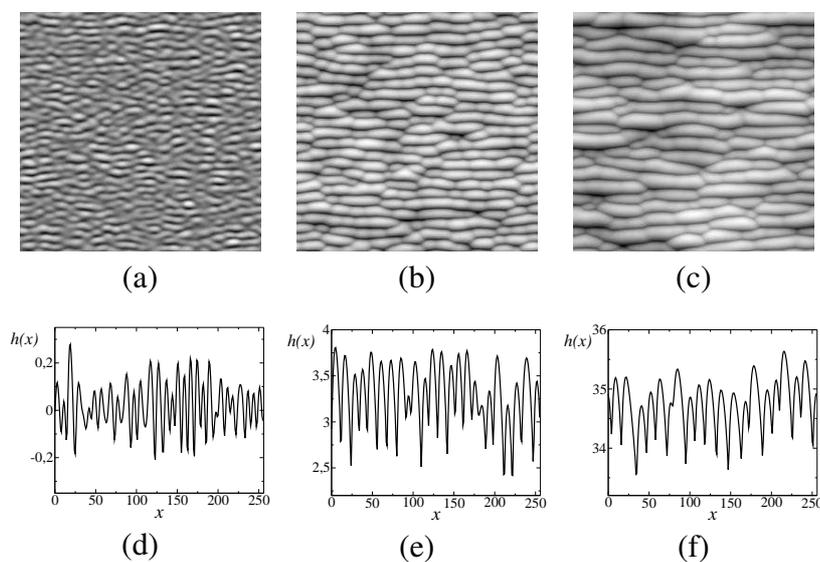
Habíamos visto en el capítulo 4 que cuando se bombardea la muestra con un ángulo arbitrario y se rompe la simetría  $xy$  aparecen nuevos términos en la ecuación que describe la evolución de la morfología. Reescribimos aquí la ecuación general obtenida en la sección 4.2.2.3:

$$\partial_t h = \gamma_x \partial_x h + \sum_{i=x,y} \left[ -\nu_i \partial_i^2 h + \lambda_i^{(1)} (\partial_i h)^2 + \Omega_i \partial_i^2 \partial_x h + \xi_i (\partial_x h) (\partial_i^2 h) \right] + \sum_{i,j=x,y} \left[ -\mathcal{K}_{ij} \partial_i^2 \partial_j^2 h + \lambda_{ij}^{(2)} \partial_i^2 (\partial_j h)^2 \right], \quad (6.8)$$

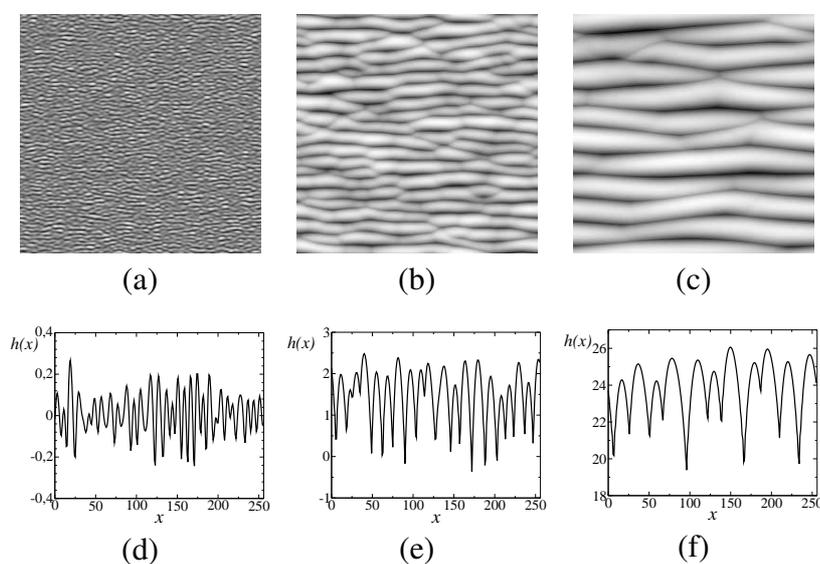
donde los coeficientes están relacionados con los parámetros fenomenológicos del modelo hidrodinámico a partir de (4.75).

Esta ecuación es novedosa y presenta un amplio espacio de parámetros para estudiar. Para integrarla numéricamente hemos utilizado el mismo esquema que en las secciones anteriores.

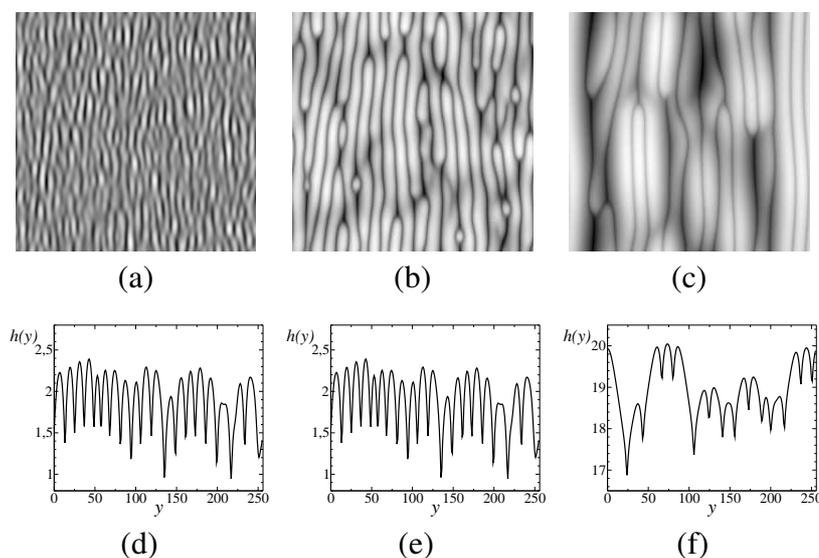
En las figuras 6.10, 6.11 y 6.12 se muestran vistas superiores de las morfologías descritas por la ecuación (6.8) en diferentes instantes de tiempo y sus correspondientes secciones transversales para diferentes valores de los parámetros. Se puede observar la similitud de estas morfologías con algunas de las mostradas en el capítulo 2. En estos tres ejemplos, las estrías aumentan su tamaño en el transcurso del tiempo a la vez que se desordenan en altura para largas distancias, mientras que la forma de las ondulaciones puede variar apreciablemente dependiendo del valor



**Figura 6.10** — Vista cenital de la evolución de la superficie dada por (6.8) para  $\gamma_x = -0.1$ ,  $\nu_x = 1$ ,  $\nu_y = 0.1$ ,  $\Omega_x = 1$ ,  $\Omega_y = 0.5$ ,  $\xi_i = 0.1$ ,  $\lambda_x^{(1)} = 1$ ,  $\lambda_y^{(1)} = 5$ ,  $\lambda_{i,j}^{(2)} = -5$ ,  $\mathcal{K}_{i,j} = 1$ , para diferentes tiempos: (a)  $t = 10$ ; (b)  $t = 106$ ; (c)  $t = 953$ . En la misma columna la sección transversal correspondiente en  $y = L/2$ .



**Figura 6.11** — Vista cenital de la evolución de la superficie dada por (6.8) para los mismos valores en que la figura 6.10 salvo  $\lambda_x^{(1)} = 0.1$  en diferentes tiempos: (a)  $t = 10$ ; (b)  $t = 106$ ; (c)  $t = 957$ . En la misma columna la sección transversal correspondiente en  $y = L/2$ .



**Figura 6.12** — Vista cenital de la evolución de la superficie dada por (6.8) para  $\gamma_x = 0.1$ ,  $\nu_x = 1$ ,  $\nu_y = -0.95$ ,  $\Omega_i = -0.5$ ,  $\xi_i = 0.1$ ,  $\lambda_x^{(1)} = 0.1$ ,  $\lambda_y^{(1)} = 1.0$ ,  $\lambda_{i,x}^{(2)} = -0.5$ ,  $\lambda_{i,y}^{(2)} = -5.0$  y  $\mathcal{K}_{i,j} = 1$ . para diferentes tiempos: (a)  $t = 10$ ; (b)  $t = 106$ ; (c)  $t = 953$ . En la misma columna la sección transversal correspondiente en  $x = L/2$ .

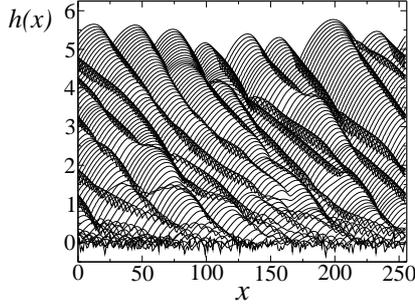
de los parámetros. En algunos casos, como ocurre en el de la figura 6.11, para tiempos suficientemente largos se obtienen estrías rectas que apenas se interrumpen, mientras que en el caso de la figura 6.10, éstas se desordenan longitudinalmente y se interrumpen con frecuencia. También se interrumpen frecuentemente en el caso de la figura 6.12 como se observa en 6.12 (c), pero éstas, además, están muy desordenadas en altura y tienden a agruparse en dominios que contienen aproximadamente tres estrías. Con estos tres ejemplos, podemos hacernos una idea de la variedad de morfologías a la que da lugar (6.8). Resulta muy complicado abarcar todo el rango de parámetros de (6.8). Más que describir sistemáticamente la multitud de morfologías que aparecen cuando modificamos sus valores, aquí nos limitaremos a analizar de forma cualitativa el efecto de los diferentes términos en la evolución de la superficie.

### 6.3.1. Régimen lineal

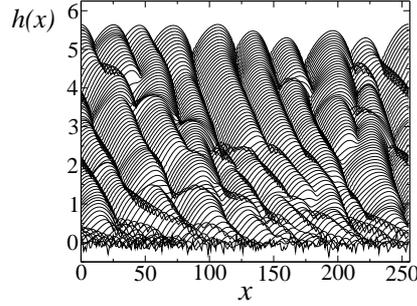
Nuestro análisis nos ha permitido comprobar que el régimen lineal de la ecuación (6.8) es equivalente al de la ecuación (3.39) de las anteriores teorías continuas de erosión. En esta etapa, debemos destacar que la orientación de las estrías viene dada por el término de tensión superficial más negativo (como se comprueba al comparar las figuras 6.10 y 6.11 con 6.12, en las que el eje  $\hat{x}$  se orienta en la dirección vertical de la figura y el eje  $\hat{y}$  en la dirección horizontal) y el tamaño lateral de la inestabilidad viene dado por la relación entre los términos de tensión y difusión

superficial y vale  $l^l = 2\pi(2\mathcal{K}_{ij}/\nu_i)^{1/2}$ .

Tras esta etapa inicial, la amplitud de la inestabilidad crece exponencialmente en el transcurso del tiempo [ver etapa inicial de crecimiento para la figura 6.15 (a)] hasta que las pendientes son tan grandes que los términos no lineales dejan de ser despreciables y afectan a la evolución de la morfología.



**Figura 6.13** — Secciones transversales en  $y = L/2$  temporalmente equiespaciadas con  $\Delta t = 20$  entre  $t = 0$  y  $t = 1500$  de la superficie descrita por la ecuación (6.8) para  $\gamma_x = 0.05$ ,  $\nu_x = 1$ ,  $\nu_y = 0.1$ ,  $\xi_i = 0$ ,  $\Omega_i = -2$ ,  $\lambda_x^{(1)} = 1$ ,  $\lambda_y^{(1)} = 5$ ,  $\lambda_{i,x}^{(2)} = -50$ ,  $\lambda_{i,y}^{(2)} = -5.0$  y  $\mathcal{K}_{i,j} = 1$ .



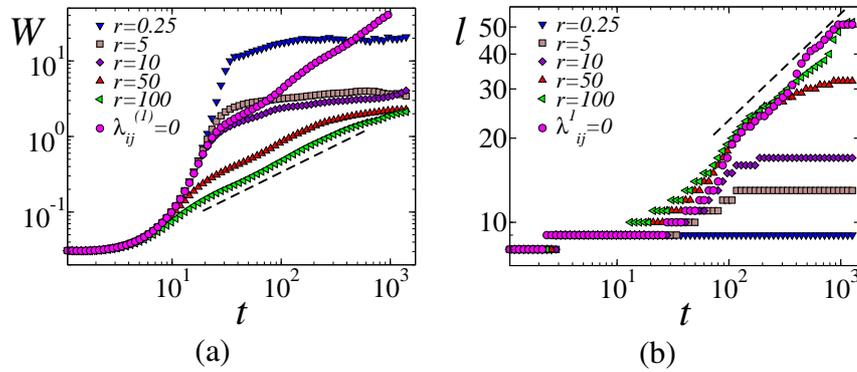
**Figura 6.14** — Secciones transversales en  $y = L/2$  temporalmente equiespaciadas con  $\Delta t = 20$  entre  $t = 0$  y  $t = 1500$  de la superficie descrita por la ecuación (6.8) para los mismos parámetros que la figura 6.13 salvo  $\gamma_x = 0$ .

También hemos estudiado el comportamiento que tienen los términos lineales con derivadas impares en la evolución de la morfología. Mientras que el término lineal correspondiente al coeficiente  $\gamma_x$  no altera la morfología y sólo es responsable del sentido y magnitud de la velocidad en el movimiento de las estrías (las cuales se mueven en el sentido de  $\hat{x}$  opuesto al signo de  $\gamma_x$  con velocidad constante), los términos correspondientes a los coeficientes  $\Omega_i$  provocan asimetrías en la morfología al romper la invariancia  $x \rightarrow -x$ , a la vez inducen que el patrón se desplace ligeramente en el eje  $\hat{x}$ . Así ocurría ya en la teoría de Bradley y Harper y en la ecuación de KdV modificada por dispersión en el caso unidimensional mostrada en la sección 1.5.5. El efecto de la asimetría inducida por  $\Omega_i$  puede observarse en la figuras 6.13 y 6.14, donde se representa la sección transversal en  $y = L/2$  de la superficie para diferentes tiempos. Para los valores de  $\Omega_i$  considerados, las estrías se inclinan en el sentido positivo del eje  $\hat{x}$ , el cual se corresponde con el sentido de la proyección del haz de iones sobre el sustrato plano (si recordamos nuestra definición original de los ejes). Tanto la inclinación como el sentido del movimiento es el opuesto del inducido por  $\Omega$  en la ecuación (1.34) unidimensional. Este tipo de asimetría en la dirección del haz es frecuente en los experimentos [un ejemplo de estrías asimétricas obtenidas experimentalmente se mostró en la figura 2.4 (d)]. Al comparar la figura 6.13 con la figura 6.14, donde en la segunda se ha he-

cho  $\gamma_x = 0$ , podemos observar la influencia de este término en el movimiento del patrón. En 6.13, éste se mueve a mayor velocidad que en 6.14 debido al efecto de dicho término.

### 6.3.2. Régimen no lineal

Una vez las pendientes son suficientemente grandes como para que los términos no lineales dejen de ser despreciables, resultan fundamentales para entender la evolución de la morfología. En este apartado separaremos el efecto de los términos con derivadas pares ( $\lambda_i^{(1)}$  y  $\lambda_{i,j}^{(2)}$ ) de los que tienen un término impar de derivadas ( $\xi_i$ ). Los primeros, como son simétricos bajo transformaciones  $x \rightarrow -x$ , no pueden ser responsables del movimiento o de la asimetría del perfil en esta dirección.



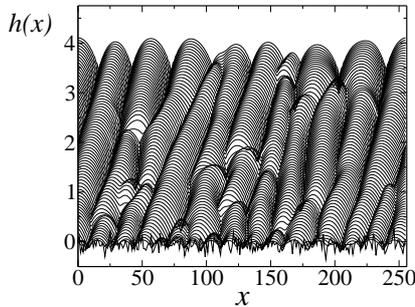
**Figura 6.15** — Evolución temporal de la rugosidad global,  $W$  [figura (a)] y de la longitud de onda del patrón,  $l$  [figura (b)] para la ecuación (6.8) con  $\gamma_x = \Omega_i = \xi_i = 0$ ,  $\nu_x = 1$ ,  $\nu_y = 0.1$ ,  $\mathcal{K}_{i,j} = 1$ ,  $\lambda_i^{(1)} = 0.1$  y  $\lambda_{i,j}^{(2)} = 0.1r$ . La línea a trazos representa el ajuste a una ley de potencias para el caso de  $r = 100$ , en el que se obtuvo  $W \sim t^{0.71}$  y  $l \sim t^{0.38}$ .

En la figura 6.15 se representa la evolución temporal de  $W$  y  $l$  para un sistema anisótropo donde no aparecen términos con derivadas impares. Hemos comprobado en nuestras simulaciones que el patrón no se desplaza espacialmente en estos sistemas. Al igual que ocurría en el caso de incidencia normal y sustrato rotante, las no linealidades  $\lambda_i^{(1)}$  son las responsables de que el patrón sature y alcance un valor de amplitud y longitud constantes, mientras que en ausencia de estos términos la longitud de onda de las estrías crece indefinidamente en el tiempo como  $l \sim t^{1/2}$ , hasta que se forma una única estría del tamaño de nuestro sistema. Al igual que ocurría en los casos anteriores, cuanto mayor es la relación entre las no linealidades de tipo  $\lambda_{i,j}^{(2)}$  y  $\lambda_i^{(1)}$ , el patrón satura más tarde y su tamaño es mayor. El efecto, por tanto, de este tipo de no linealidades es equivalente al estudiado en  $d = 1$ .

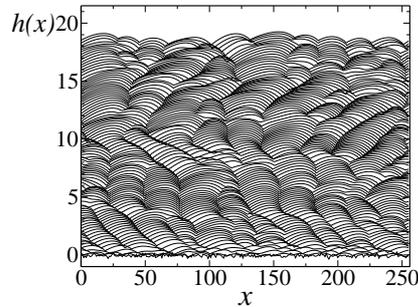
Hemos comprobado también en (6.8), como hicimos en la ecuación de incidencia normal, que el cambio de signo de los coeficientes  $\lambda_{i,j}^{(2)}$  y  $\lambda_i^{(1)}$  invierte la simetría  $h \rightarrow -h$ , y en vez de un patrón de estrías se obtiene uno de surcos.

Respecto al efecto de los términos no lineales correspondientes a los coeficientes  $\xi_i$ , nuestro estudio ha revelado que estos términos provocan un movimiento en el sentido de  $\hat{x}$  con una velocidad no uniforme. Esto puede observarse en la figura 6.16, donde este término es el único responsable de que el patrón se desplace en sentido positivo del eje  $\hat{x}$ . De hecho, si el movimiento inducido por los términos lineales y el provocado por esta no linealidad tienen sentidos opuestos, se observa que la superficie se mueve con una determinada velocidad que se va reduciendo a la vez que aumenta el tamaño de las estrías, y que incluso puede llegar a cambiar de sentido, como se pone de manifiesto en la figura 6.17. Aquí se muestra cómo, para tiempos cortos, los términos lineales  $\Omega_i$  provocan que el perfil se desplace a la izquierda, mientras ocurre el proceso de ensanchamiento del patrón. Para tiempos más largos, las no linealidades  $\xi_i$  se hacen más relevantes e inducen un movimiento neto del patrón en el sentido positivo del eje  $\hat{x}$ . Ambos términos rompen la simetría  $x \rightarrow -x$ , lo que provoca que en este caso el perfil se incline a la derecha.

A diferencia de lo predicho por las teorías continuas anteriores, el presente resultado de que las estrías se muevan con velocidad no uniforme coincide con lo observado en experimentos de erosión iónica [Habenicht *et al.* 2002; Alkemade 2006], mencionados en la sección 2.4.1.1. Los términos no lineales  $\xi_i$  podrían ser, por tanto, los responsables de este comportamiento experimental, en particular, de que el sentido del movimiento del patrón no coincida con el descrito en dichas teorías.



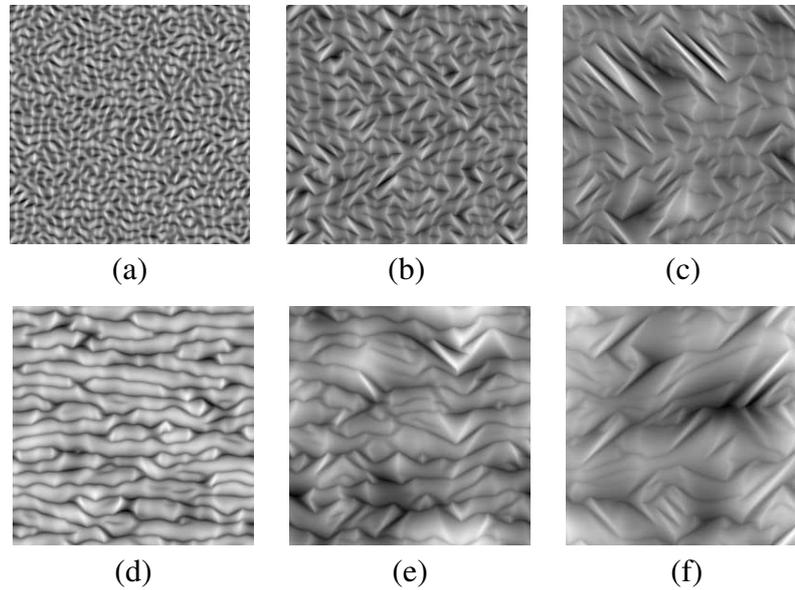
**Figura 6.16** — Secciones transversales en  $y = L/2$  temporalmente equiespaciadas con  $\Delta t = 20$  entre  $t = 0$  y  $t = 1500$  de la superficie descrita por la ecuación (6.8) para  $\gamma_x = \Omega_i = 0$ ,  $\nu_x = 1$ ,  $\nu_y = 0.1$ ,  $\xi_i = 3.5$ ,  $\lambda_x^{(1)} = 1$ ,  $\lambda_y^{(1)} = 5$ ,  $\lambda_{i,x}^{(2)} = -50$ ,  $\lambda_{i,y}^{(2)} = -5.0$  y  $\mathcal{K}_{i,j} = 1$ .



**Figura 6.17** — Secciones transversales en  $y = L/2$  temporalmente equiespaciadas con  $\Delta t = 50$  entre  $t = 0$  y  $t = 5000$  de la superficie descrita por la ecuación (6.8) para los mismos parámetros que 6.16 salvo  $\Omega_i = -2$  y  $\xi_i = 4.5$ .

### 6.3.3. Modos de cancelación

Al igual que en el trabajo de Rost y Krug (1995) sobre la ecuación KS anisótropa descrito en la sección 3.5.2.3, hemos comprobado que, si los términos de tensión superficial son negativos y  $\lambda_x^{(1)}\lambda_y^{(1)} < 0$  a la vez que  $\lambda_{ix}^{(2)}\lambda_{iy}^{(2)} < 0$ , aparecen los denominados modos de cancelación. Es decir, existen modos de la banda inestable orientados en una determinada dirección para los que los términos no lineales se cancelan y provocan que (6.8) sea inestable, con lo que aparecen patrones que crecen en el transcurso del tiempo y que experimentan un proceso de ensanchamiento de su longitud de onda. Estos modos de cancelación son diferentes de los descritos en la sección 3.5.5 cuando los coeficientes  $\lambda_i^{(1)}$  y  $\lambda_{ij}^{(2)}$  tienen el mismo signo que provocan que nuestras simulaciones numéricas exploten en tiempo finito.



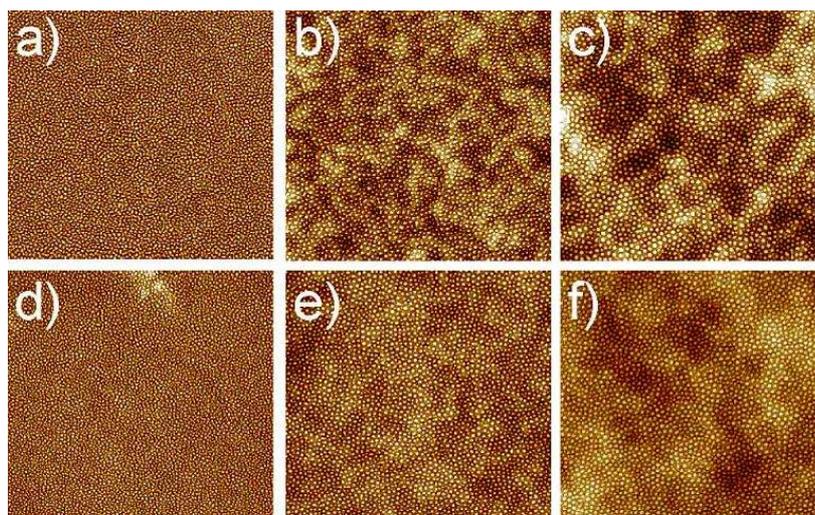
**Figura 6.18** — Vista cenital de la evolución de la superficie dada por (6.8) para: (fila superior)  $\gamma_x = \Omega_i = \xi_i = 0, \nu_x = 1.0, \nu_y = -1.0, \lambda_x^{(1)} = 0.1, \lambda_y^{(1)} = -0.1, \lambda_{i,x}^{(2)} = -0.5, \lambda_{i,y}^{(2)} = 0.5$  y  $\mathcal{K}_{i,j} = 1$  en (a)  $t = 25$ ; (b)  $t = 50$ ; (c)  $t = 185$ ; (fila inferior) con los mismos parámetros que (a), (b) y (c) excepto  $\nu_y = 0.1$  en (d)  $t = 105$ ; (e)  $t = 500$ ; (f)  $t = 1495$ .

En la figura 6.18 se muestra la evolución de la morfología en este caso para dos valores diferentes de la tensión superficial  $\nu_y$ . Se observa que, transcurrida la etapa lineal en la que la orientación del patrón viene determinada por los términos lineales, aparece un patrón cuya orientación viene dada por la relación entre las no linealidades.

Por el momento, no existen observaciones en los experimentos de erosión iónica en los que aparezcan estas ondulaciones oblicuas a la dirección de la proyección del haz.

## 6.4. Comparación cualitativa con los experimentos

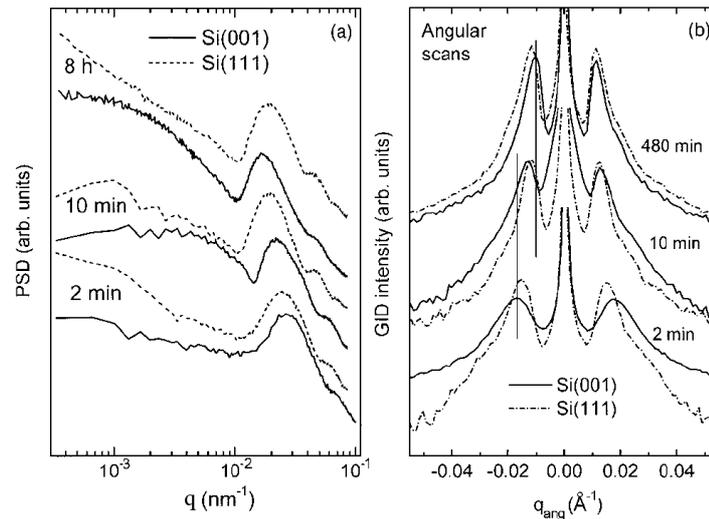
Como ejemplo de la comparación de nuestro modelo bidimensional con experimentos específicos, en esta sección mostraremos los resultados obtenidos en el reciente trabajo de Gago *et al.* (2006), en el que se estudian nanopuntos formados a partir del bombardeo de un sustrato de silicio. Se considera la evolución temporal de nanopuntos sobre Si(001) y Si(111) cuando se bombardea perpendicularmente con iones de  $\text{Ar}^+$  a 1.2 keV. Se observa que la tasa de erosión es aproximadamente un 10% mayor en el caso de Si(111) que para Si(001). En la figuras 6.19 se representan la imágenes obtenidas mediante AFM de superficies erosionadas de Si(001) y Si(111) en diferentes instantes. El patrón es similar en ambos experimentos: en los dos casos está formado por puntos de 5-7 nm de altura que se agrupan con orden hexagonal en dominios de 40-60 nm de anchura. Para tiempos mayores de 20 minutos, además de este orden a corto alcance, la superficie se desordena en altura para distancias mayores (del orden de 6 nm en altura para distancias de unos 500 nm). Este desorden aumenta en el transcurso del tiempo.



**Figura 6.19** — Imágenes obtenidas por AFM de  $3 \times 3 \mu\text{m}^2$  y puntos de tamaño 5-7 nm para Si(100) (fila superior) y Si(111) (fila inferior) en: (a) y (d)  $t = 2$  minutos; (b) y (e)  $t = 60$  minutos; (c) y (f)  $t = 960$  minutos.

La evolución del tamaño del patrón puede estudiarse a través del factor de estructura obtenido a partir de las morfologías medidas mediante AFM [figura 6.20 (a)] y la medida de la difracción a incidencia rasante con rayos-x (GID, de sus siglas en inglés “grazing incidence diffraction”) representada en la figura 6.20 (b). En estas figuras se observa como el máximo local del factor de estructura, asociado con la longitud de onda del nanopatrón, se desplaza hacia valores más pequeños del vector de onda (mayores longitudes de onda), lo que pone de manifiesto el

ensanchamiento en el tamaño del patrón con la fluencia para ambos sustratos. Una medida de la distancia a la cual se ordena el patrón viene dada, como se vio en el capítulo 1, por la longitud de correlación  $\zeta$ . En la figura 6.20 se observa cómo la anchura del pico en el factor de estructura se hace más pequeña (lo cual implica que  $\zeta$  aumenta), e incluso desarrolla picos secundarios en el transcurso del tiempo, lo que indica que el orden del patrón mejora con el tiempo. Para longitudes de onda mayores que el tamaño del patrón, este se desordena en alturas y aumenta su rugosidad, lo cual es compatible con la pendiente negativa de la *PSD* para  $q < 2\pi/l$ . Tras 8 horas de bombardeo, el factor de estructura correspondiente al Si(111) sigue una ley de potencias para  $q$  pequeños. Esto no ocurre para ese mismo instante en el caso de Si(001), lo que indica que aún no ha alcanzado la saturación y, por tanto, sugiere que la dinámica es más rápida en el caso de Si(111). En las medidas mediante GID representadas en la figura 6.20 (b) se corroboran estas observaciones.

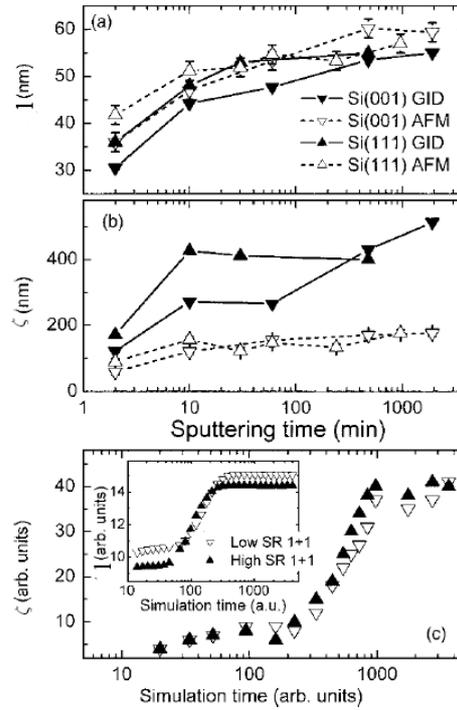


**Figura 6.20** — (a) Factor de estructura obtenido a partir de las imágenes de AFM y (b) GID para la superficies de Si(001) (línea continua) y Si(111) (línea a trazos) tras 2, 10 y 480 minutos de erosión. Los espectros han sido desplazados verticalmente para su mejor visualización. Las líneas verticales en (b) se muestran para indicar el desplazamiento del máximo local. Tomada de Gago *et al.* (2006).

En las figuras 6.21 (a) y (b) se compara la evolución de los valores de  $l$  y  $\zeta$  obtenidos por AFM y GID. Ambas medidas muestran una evolución similar para  $l$ . Se observa que  $l$  crece con el tiempo hasta que satura a un valor de  $l \sim 54 - 60$  nm para  $t > 30$  minutos, en ambos casos. En el caso de  $\zeta$ , en las medidas de AFM se obtienen valores más pequeños que en las de GID; esto se debe a que esta última técnica permite obtener una mejor medida al promediar en mayores regiones espaciales.

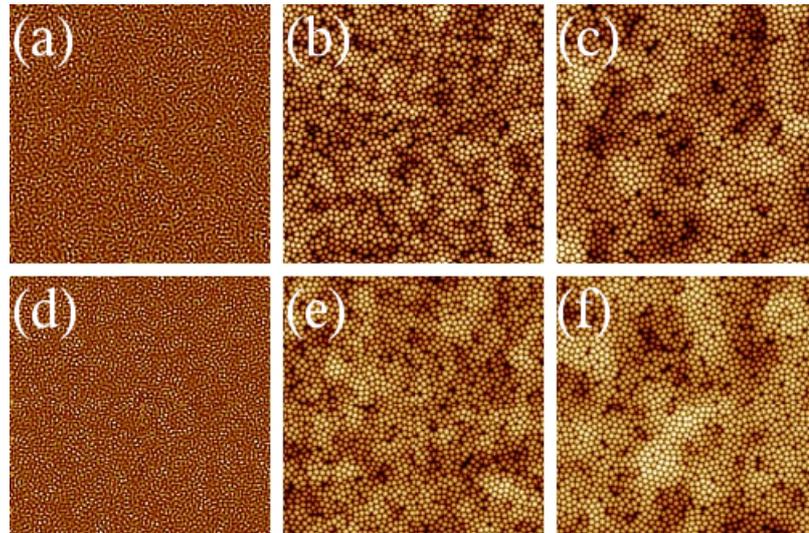
Habíamos indicado ya que, si bien las propiedades cualitativas del proceso son

**Figura 6.21** — Evolución temporal de la longitud de onda  $l$  [figura (a)] y longitud de correlación  $\zeta$  [figura (b)] durante el bombardeo de Si(001) y Si(111) obtenida a partir de los datos de AFM y GID. (c) Evolución temporal de  $\zeta$  (gráfico principal) y  $l$  (recuadro interior) obtenido a partir de las simulaciones numéricas de la ecuación (6.1) en  $1d$  para  $\nu = 0.68$ ,  $\mathcal{K} = 1$ ,  $\lambda^{(1)} = 0.028$  y  $\lambda^{(2)} = 0.136$  (alta tasa de erosión) y  $\nu = 0.748$ ,  $\mathcal{K} = 1$ ,  $\lambda^{(1)} = 0.031$  y  $\lambda^{(2)} = 0.15$  (baja tasa de erosión). Tomada de Gago *et al.* (2006).



las mismas en Si(001) y Si(111), la tasa de erosión observada en los experimentos sí depende de la orientación cristalina. La superficie que se erosiona más rápidamente es la de Si(111), y es, a su vez, la que tiene una dinámica más rápida y la que alcanza antes la saturación. Con el fin de entender este efecto, hemos integrado la ecuación (6.1) teniendo en cuenta que la velocidad de erosión promedio es un 10 % superior en esta orientación. La diferencia en la tasa de erosión se midió comparando el grosor de la capa erosionada en ambas muestras en las mismas condiciones experimentales. En nuestro modelo, esto implica que el  $\alpha_0$  correspondiente es un 10 % mayor y por tanto, según la relación (4.77), salvo, el coeficiente  $\mathcal{K}$  que permanece igual, tanto  $\nu$  como  $\lambda^{(1)}$  y  $\lambda^{(2)}$  deben aumentar en este porcentaje. En la figura 6.22 se muestra la evolución de la morfología descrita por la ecuación (4.77) para dos valores diferentes de los parámetros, teniendo en cuenta lo anterior. La fila de figuras superior representa la de menor tasa de erosión y se correspondería con el caso de Si(001), mientras que en la fila inferior  $\alpha_0$  es un 10 % mayor y, por tanto, se corresponde con el Si(111). En ambos casos se reproduce el proceso ensanchamiento de las estrías durante un cierto periodo de tiempo y la disposición hexagonal a cortas distancias que se desordena a distancias mucho mayores que el tamaño del patrón. Hemos analizado el factor de estructura correspondiente al caso unidimensional debido a la mejor estadística que presenta y a que, como hemos visto en este capítulo y el anterior, los comportamientos de las ecuaciones unidimensional y bidimensional isótropa son análogos. A partir de la *PSD*, hemos

medido la longitud de onda del patrón y la longitud de correlación que se representan en la figura 6.21 (c). Al igual que ocurría en los experimentos, se observa claramente que  $l$  satura primero para el caso de mayor tasa de erosión (representado en la figura por las siglas SR, del inglés “sputtering rate”), mientras que la de menor SR satura más tarde y la longitud de onda de saturación es mayor. Lo mismo ocurre con  $\zeta$ , que satura antes en el caso de la muestra con mayor SR. Debemos notar que, al igual que ocurría con las medidas de AFM, la longitud de correlación en saturación es del orden de  $\zeta \simeq 3l$ .



**Figura 6.22** — Imágenes obtenidas mediante integración numérica de la ecuación (6.1) de un sistema de tamaño  $L = 512$  para  $\nu = 0.68$ ,  $\mathcal{K} = 1$ ,  $\lambda^{(1)} = 0.028$  y  $\lambda^{(2)} = 0.136$  (fila superior) y  $\nu = 0.748$ ,  $\mathcal{K} = 1$ ,  $\lambda^{(1)} = 0.031$  y  $\lambda^{(2)} = 0.15$  (fila inferior), en diferentes tiempos: (a) y (d)  $t = 25$ ; (b) y (e)  $t = 200$ ; (c) y (f)  $t = 400$ .

## 6.5. Conclusiones

En este capítulo hemos analizado las ecuaciones efectivas de erosión para los casos de incidencia normal, sustrato rotante e incidencia oblicua, obtenidas en el capítulo 4 para el caso bidimensional. El hecho de que no sea relevante la comparación entre el modelo hidrodinámico de dos campos y la ecuación efectiva, como se hacía en el caso unidimensional, se debe a que para que ambas descripciones sean equivalentes es necesario que los modos inestables sean de gran longitud de onda (o, dicho de otra forma,  $\epsilon$  debe ser muy pequeño) y, por tanto, las escalas espaciales y temporales son demasiado grandes para ser abordadas en el caso bidimensional.

Mientras que las características experimentales reproducidas por los modelos previos son capturadas también por esta nueva descripción continua, hemos comprobado que, además, estas ecuaciones describen también algunas propiedades de

los experimentos que no eran descritas por las ecuaciones interfaciales previas. Entre ellas, el ensanchamiento y posterior saturación del patrón y el orden hasta distancias varias decenas de veces mayor que la longitud lateral del mismo. En los casos de incidencia normal y sustrato rotante se reproduce también el orden hexagonal, aunque éste tiende a ser más cuadrado cuando se aumenta  $r$  o se incluye el término correspondiente al coeficiente  $\lambda_r^{(3)}$ . A diferencia de lo que ocurría con el valor de  $\lambda_r^{(2)}$ , nuestro esquema de integración no es tan robusto cuando se estudia el comportamiento de  $\lambda_r^{(3)}$  y, por el momento, no hemos podido estudiar lo que ocurre para valores muy grandes de este parámetro. Quizá si se mejora el esquema y se estudia la evolución de la morfología para valores mayores de  $\lambda_r^{(3)}$ , se pueda reproducir el orden cuadrado de los puntos observada en los experimentos de blanco rotante. Este efecto, sin embargo, puede ser también debido a que el tamaño de nuestras simulaciones no es lo suficientemente grande. Sería interesante estudiar mediante técnicas analíticas si, efectivamente, la inclusión de estos nuevos términos en la ecuación de evolución tienen el efecto de cambiar el orden del patrón.

Otra característica relevante de los experimentos que ha sido observada por primera vez en nuestras simulaciones es el movimiento de las estrías con velocidad no uniforme. Hemos comprobado que este efecto se debe al término no lineal correspondiente a los coeficientes  $\xi_i$ , el cual provoca, además, que exista cierta asimetría en la dirección  $x$  en el perfil de la superficie.

En la última sección hemos puesto de manifiesto que a pesar de que la orientación cristalina del sustrato modifica la tasa de erosión, la forma del patrón y su evolución son análogas. La diferencia afecta al tamaño final de los puntos, que es mayor en el caso de menor SR, y al orden. Estos resultados son corroborados por nuestro modelo teórico, en el que la variación en la velocidad de erosión tiene el mismo efecto.

Aunque la comparación cuantitativa podría mejorarse si dispusiéramos de una relación entre todos los parámetros de la ecuación y los experimentales, el hecho de poder explicar ciertas tendencias como se ha hecho en la sección 6.4 es un resultado muy relevante.



---

# Conclusiones generales y trabajo futuro

---

## 6.6. Conclusiones generales

Hemos visto en este trabajo que la erosión iónica representa un ejemplo de fenómeno fuera del equilibrio con propiedades superficiales universales como la invariancia de escala y la formación de patrones. La evolución de la morfología comparte muchas características con la que se encuentra en otros procesos físicos de muy diversa índole. Un claro ejemplo de este tipo de procesos lo representa la formación de ondulaciones en la arena debido a la acción del viento o del agua. Aunque a escalas varios órdenes de magnitud mayores, también se forman patrones que crecen y se desplazan sobre la superficie. Por otro lado, la erosión iónica puede ser vista como un proceso de crecimiento inverso que da lugar a morfologías que presentan invariancia de escala y escalado cinético como ocurre en numerosas técnicas de crecimientos de capas delgadas como MBE, CVD o PVD. Así pues, a sus múltiples aplicaciones mostradas en la sección 2.1, hemos de añadirle otra no menos importante, y es que su comprensión y modelización podrían ser muy útiles si de ahí pudieran extenderse conceptos y herramientas a otros procesos distintos que, como la erosión iónica, también tengan interés científico y/o tecnológico.

Debido a este interés, se ha invertido un gran esfuerzo en lograr avances experimentales en esta técnica. Tal y como se observó en el capítulo 2, existe una gran variedad de resultados experimentales, difícilmente abarcables desde un único modelo teórico. A pesar de ello, el hecho de que este fenómeno presente muchas características comunes para condiciones experimentales muy diferentes ha permitido desarrollar una base teórica (presentada en el capítulo 3) en la que nos hemos apoyado para desarrollar nuestro modelo y cuyas principales conclusiones mostramos a continuación.

Hemos puesto de manifiesto que, para describir de forma completa muchas de las características del proceso de erosión iónica, resulta fundamental considerar los efectos del redepósito de material y el flujo de una capa delgada de material sobre la superficie. Aunque se tiene la certeza de que estos mecanismos ocurren

en la mayoría de los experimentos, aún no se han cuantificado en todo detalle. Éste puede ser un buen punto de partida para resaltar su importancia y fomentar su análisis.

Con el fin de incorporar estos mecanismos, hemos propuesto un modelo continuo para dos campos acoplados,  $R$  y  $h$ , que describen la densidad de material móvil y la altura del sustrato fijo respectivamente, que generaliza las descripciones previas. Este resulta un punto importante, puesto que a pesar de que nuestra propuesta puede parecer, en principio, muy diferente de las teorías anteriores, nuestro modelo incorpora sus predicciones para la mayoría de las características de la evolución de la superficie. También contiene parte de sus limitaciones; por ejemplo, debido al carácter local de la inestabilidad, la velocidad de erosión se obtuvo bajo la suposición de que las pendientes son pequeñas; además, no tiene en cuenta posibles efectos no locales como el sombreado.

Para simplificar la descripción y obtener una ecuación universal que capture las principales características del modelo y sea aplicable a otros procesos con propiedades similares, hemos utilizado un desarrollo de escalas múltiples en el umbral de la inestabilidad lineal que nos ha permitido eliminar el campo de evolución temporal más rápida y derivar una ecuación cerrada, novedosa, para la altura de la superficie. Hemos extendido esta ecuación para el caso de que se gire simultáneamente la muestra mientras se bombardea, y hemos analizado todas ellas numéricamente y, en determinadas condiciones, analíticamente. A pesar de que recientemente se ha propuesto un formalismo general basado en simetrías y leyes de conservación para el caso unidimensional o isótropo que nos permite derivar y clasificar este tipo de ecuaciones con inestabilidades morfológicas [Castro *et al.* 2007], la forma en la que hemos obtenido aquí la ecuación interfacial efectiva es bastante informativa, tanto por la técnica analítica en sí misma, como porque nos permite entender gran parte de la física y los mecanismos más relevantes en la evolución del sistema. En particular, permite relacionar los parámetros de la ecuación con los que caracterizar físicamente el sistema, relación que puede ser ambigua si nos limitamos a argumentos de simetría y de relevancia asintótica. Además, las ecuaciones resultantes parecen consistentes con la aproximación de pendientes pequeñas supuesta cuando se introdujo la dependencia de la velocidad de erosión con la geometría local; en concreto, a pesar de que términos como el KPZ conservado tienden a hacer que la pendiente media del sistema aumente, ésta es controlada finalmente por el término KPZ, que no permite que crezca indefinidamente y que interrumpe el proceso de crecimiento en amplitud del patrón. La dinámica de la superficie, por tanto, no parece generar pendientes grandes incompatibles con nuestras suposiciones.

Estas ecuaciones describen la evolución de una gran variedad de morfologías que presentan propiedades interesantes y que aparecen con frecuencia en otros fenómenos fuera del equilibrio, además de la erosión iónica, y resultan de gran importancia en el contexto de la formación de patrones. De hecho, a diferencia de lo conjeturado por algunos autores [Krug 2001], representan ejemplos de ecuaciones interfaciales que muestran un patrón que evoluciona en el tiempo hasta alcanzar una amplitud y una longitud de onda fijos y orden en distancias uno o dos órdenes

de magnitud mayores que el tamaño de una sola celda.

Tal y como hemos observado en el capítulo 6, existe una gran similitud entre el proceso erosivo experimental y los resultados obtenidos mediante la integración numérica de estas ecuaciones. A pesar de que resulta difícil hacer una comparación cuantitativa completamente detallada, nos hemos basado en la mayor tasa de erosión del silicio en una determinada dirección cristalina para comparar de forma semi-cuantitativa con los experimentos. Efectivamente, no sólo se reproducen la mayoría de las características experimentales, sino que, además, la mayor tasa de erosión provoca que la longitud del patrón estacionaria sea más pequeña y se alcance más rápidamente, a la vez que provoca que la superficie resulte más desordenada a largas distancias. Estos resultados son de un gran interés práctico, y nos animan a seguir considerando nuestro modelo como una descripción válida del proceso erosivo.

Además de la similitud entre las morfologías experimentales y las obtenidas en nuestras simulaciones, nuestras ecuaciones predicen otra gran variedad de estructuras que también podrían resultar de interés tecnológico si se pudieran ajustar los parámetros experimentales para que se produzcan éstas. Como ejemplo, podemos citar las ocurridas cuando se producen modos de cancelación debido a los términos no lineales mostradas en el apartado 6.3.3, donde mediante un posible bombardeo oblicuo pueden formarse patrones en direcciones diversas.

## 6.7. Trabajo futuro

A pesar de los avances realizados en este campo, aún resta mucho trabajo por hacer para entender completamente el proceso de erosión.

Dentro de nuestro modelo teórico, debido a la dificultad de relacionar algunos de los parámetros introducidos en nuestro modelo con sus valores experimentales, nos hemos tenido que limitar a una comparación cualitativa. Ésta es, sin duda, una de las principales direcciones de trabajo a seguir en el futuro.

Por otro lado, aunque hemos explorado la mayor parte del rango de parámetros en las ecuaciones de erosión unidimensional, y el caso de incidencia normal y sustrato rotante para dos dimensiones, no hemos podido explorar en su totalidad la ecuación bidimensional bajo incidencia oblicua. Esta ecuación tiene 17 coeficientes que, si reescalamos  $x$ ,  $y$ ,  $h$  y  $t$ , se reducen a 14 coeficientes independientes, lo cual hace que barrer todo su rango de parámetros sea una labor complicada. Nos hemos limitado, por tanto, a estudiar algunos términos de forma general, aunque un estudio más detallado y sistemático para revelar todas las características que presenta parece muy conveniente. Nuestro estudio numérico requiere complementarse con técnicas analíticas propias de la teoría general de formación de patrones, como estudios de la estabilidad de patrones (mediante aproximaciones de pocos modos) que permitan establecer diagramas morfológicos de bifurcación, etc.

Por otro lado, las ecuaciones derivadas presentan propiedades matemáticas (divergencia en tiempo finito o infinito en presencia de modos de cancelación, etc.)

que serían interesante caracterizar en mayor detalle.

A pesar de los esfuerzos que hemos realizado con el fin de avanzar en el estudio analítico de la ecuación de erosión unidimensional, no hemos obtenido más resultados que los mostrados en la sección 5.3. Ni tan si quiera la utilización de ciertas aproximaciones basadas en la ecuación de la fase para una supuesta solución periódica, tal como se ha hecho con considerable éxito para otras ecuaciones que presentan un determinado patrón periódico [Politi y Misbah 2004; Politi y Misbah 2006; Politi y Misbah 2007], nos han permitido obtener más información sobre el proceso de ensanchamiento de la estructura. De hecho, en estos mismos trabajos se menciona la dificultad de ampliar este método a ecuaciones del tipo de las deducidas en nuestro modelo. Esta línea de trabajo, aunque quizá más difícil conceptualmente, presenta también un gran interés.

Por último, otra línea de trabajo futuro que estamos considerando puede ser la formulación de un modelo propiamente hidrodinámico para describir la evolución de la capa de flujo viscoso sobre la superficie. En principio, este planteamiento podría ir más allá de varias de las aproximaciones realizadas y permitiría estudiar condiciones experimentales más amplias.

---

## Publicaciones

---

Parte de los resultados recogidos en esta memoria se pueden encontrar en las siguientes referencias:

- ***Influence of collision cascade statistics on pattern formation of ion-sputtered surfaces.***  
Physical Review B **71**, 125407 (2005).  
M. Feix, A. K. Hartman, R. Kree, J. Muñoz-García y R. Cuerno.
- ***Nonlinear ripple dynamics on amorphous surfaces patterned by ion beam sputtering.***  
Physical Review Letters **96**, 086101 (2006). Seleccionado para el número de 13 de marzo de Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology [<http://www.vjnano.org/>].  
J. Muñoz-García, M. Castro y R. Cuerno.
- ***Short-range stationary patterns and long-range disorder in an evolution equation for one-dimensional interfaces.***  
Physical Review E (Rapid Comm.) **74**, 050103(R) (2006).  
J. Muñoz-García, R. Cuerno y M. Castro.
- ***Order enhancement and coarsening of self-organized silicon nanodot patterns induced by ion-beam sputtering.***  
Applied Physics Letters **89**, 233101 (2006).  
R. Gago, L. Vázquez, O. Platevin, T. H. Metzger, J. Muñoz-García, R. Cuerno y M. Castro.
- ***Modelos de la dinámica de las ondulaciones en la “nanoarena”***  
Revista Española de Física de la Real Sociedad Española de Física (RSEF).  
Sección: Física y Computación. Volumen 21, Número 1 (2007).  
R. Cuerno, J. Muñoz-García, M. Castro, R. Gago y L. Vázquez.

Además de estas referencias, se encuentran en fase de preparación otros artículos que recogen los detalles matemáticos del capítulo 4, la sección 5.1.1 del capítulo 5, y parte de los resultados de integración numérica del capítulo 6.

Por otro lado, durante mi tesis doctoral he realizado otros trabajos no recogidos en la presente memoria, relacionados con las descripciones de los fenómenos superficiales en sistemas fuera del equilibrio (uno de ellos es un trabajo de revisión) y que actualmente se encuentran en proceso de publicación; estos son

- ***Universal nonequilibrium phenomena at submicrometric surfaces and interfaces.***

Aceptado para su publicación en European Physical Journal E: Special Topics (2007).

R. Cuerno, M. Castro, J. Muñoz-García, R. Gago y L. Vázquez.

- ***Generic equations for pattern formation in evolving interfaces.***

Enviado a New Journal of Physics (2006).

M. Castro, J. Muñoz-García, R. Cuerno, M. García-Hernández y L. Vázquez.

# A

---

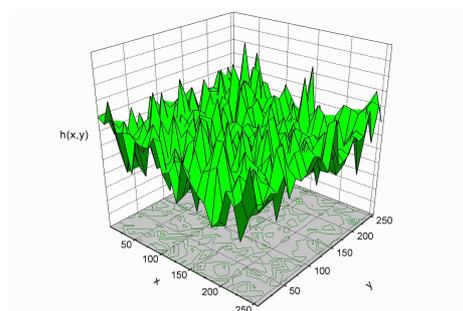
## Comportamiento de escala para cortes unidimensionales en superficies

---

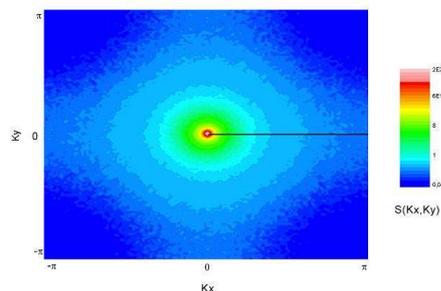
<sup>1</sup>A veces, el estudio del comportamiento de escala para superficies bidimensionales obtenidas experimentalmente se hace a través de cortes unidimensionales obtenidos a partir de imágenes de microscopía electrónica de barrido (SEM), microscopía de transmisión electrónica (TEM), etc. La información experimental obtenida de la morfología de dichos cortes unidimensionales suministra valiosa información sobre el comportamiento de la superficie y, aunque los exponentes obtenidos para la superficie completa y para el corte unidimensional están íntimamente relacionados, no siempre ha sido bien entendida su relación en la literatura científica. Por ejemplo, el resultado de integrar la ecuación de Edwards-Wilkinson [Ec. (1.22)] utilizando un esquema simple de Euler en diferencias finitas se muestra en la figura A.1. En la figura A.3 representamos el factor de estructura unidimensional, obtenido mediante una sección del espectro de potencias bidimensional (mostrado en la figura A.2) que representaremos por  $PSD(q_x)$ , y se compara con el factor de estructura de una sección transversal de la superficie real (mostrada en A.1) que denominaremos  $PSD_{1d}(q_x)$ . Se observa que ambas funciones no coinciden, ya que

---

<sup>1</sup>El trabajo recogido en esta sección fue presentado en un panel en Fises'03 titulado "Análisis unidimensional y efectos de anisotropía en superficies rugosas".



**Figura A.1** — Perfil de la ecuación de EW Ec. (1.22) con  $\nu = 1$ ,  $D = 1$ , con condición inicial plana en un sistema de tamaño  $256 \times 256$ , para un tiempo suficientemente largo donde la rugosidad total  $W$  ya ha saturado.



**Figura A.2** — Factor de estructura bidimensional  $PSD(\mathbf{q})$  obtenido para la morfología de la figura A.1. La línea oscura representa el valor de  $PSD(q_x, q_y = 0)$  mostrado en función de  $q_x$  en la figura A.3

están relacionadas según

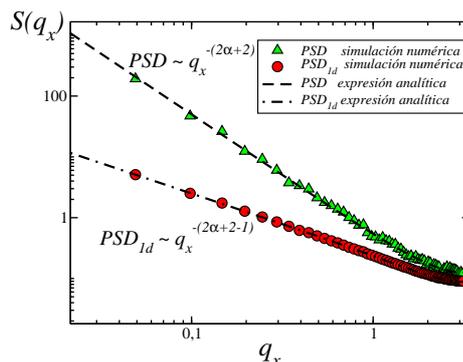
$$PSD_{1d}(q_x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} PSD(\mathbf{q}, t) dq_y. \quad (\text{A.1})$$

Si suponemos que la superficie considerada presenta rugosidad cinética, a partir de la relación anterior podemos trasladar la hipótesis de escala de Family-Viseck para la función  $PSD_{1d}(q_x)$ . Se obtiene entonces

$$PSD_{1d}(q_x, t) \sim q_x^{-(d+2\alpha-1)} g(tq_x^z), \quad (\text{A.2})$$

donde  $g(u) \sim cte.$  para  $u \gg 1$  y  $g(u) \sim u^{(d+2\alpha-1)/z}$  si  $u \ll 1$ .

**Figura A.3** — Factor de estructura bidimensional,  $PSD(q_x, q_y = 0)$ , y el obtenido a partir de un corte longitudinal de la morfología,  $PSD_{1d}(q_x)$ , en función de  $q_x$  para la ecuación de EW en las condiciones de la figura A.1. Los puntos representan el resultado obtenido mediante integración numérica de la ecuación. Las líneas muestran los resultados analíticos dados por (A.4) y (A.6) para este mismo caso ( $m = 2$ ).



Como mencionamos en las secciones anteriores, se puede obtener una solución exacta para las ecuaciones EW y LMBE, cuyas formas son casos particulares de la ecuación lineal

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\nu(-\nabla^2)^{m/2} h + \eta \quad (\text{A.3})$$

para  $m = 2$  y  $m = 4$ , respectivamente. El factor de estructura exacto para un sistema discreto de la forma anterior es

$$PSD(\mathbf{q}, t) = \frac{D(1 - e^{-2\nu\omega_m t})}{\nu\omega_m}; \quad \omega_m = [4(\sin^2(q_x/2) + \sin^2(q_y/2))]^{m/2}. \quad (\text{A.4})$$

Este resultado aparece representado en la figura A.3 con  $q_y = 0$ . Podemos observar cómo, debido a utilizar un esquema discreto de integración, el factor de estructura se “redondea” para valores de  $q$  grandes, apartándose así del comportamiento de escala ideal. Este efecto no aparece cuando utilizamos métodos de integración espectrales, como se tenía en la figura 1.4.

De forma análoga a la relación A.1, el factor de estructura obtenido tras realizar un corte unidimensional de la superficie bidimensional para el caso discreto es

$$PSD_{1d}(q_x, t) = \frac{1}{L} \sum_{q_y} S_{2d}(\mathbf{q}, t). \quad (\text{A.5})$$

En la figura 1.4, se representa el valor de  $PSD_{1d}(q_x)$  obtenido a partir de (A.4) y (A.5) para tiempos suficientemente largos y el caso particular de  $m = 2$  (ecuación de EW), que se expresa analíticamente como

$$PSD_{1d}(q_x, t \rightarrow \infty) \sim \frac{D {}_2F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{m}{2}; 1; -\sin^{-2} q_x/2\right)}{\nu 4^{m/2} \sin^2(q_x/2)}, \quad (\text{A.6})$$

donde  ${}_pF_q(n_1, \dots, n_i; m_1, \dots, m_j; u)$  es la función hipergeométrica generalizada de orden  $i, j$  y argumento  $u$ .

Hemos demostrado, por tanto, que el hecho de identificar directamente la clase de universalidad de una superficie a partir del espectro de potencias de un corte transversal de la morfología puede conducirnos a error si no tenemos en cuenta la relación (A.2). Esto no ocurre en el caso de los observables medidos en el espacio real, donde los exponentes obtenidos, por ejemplo para la rugosidad, de una sección transversal coinciden con los de la superficie bidimensional.



# B

---

## Expresiones analíticas para los coeficientes de la velocidad de erosión

---

En este apéndice se muestra la forma de la velocidad de erosión para las distribuciones de energías consideradas en la sección 3.4 en función de los diferentes parámetros fenomenológicos definidos en el capítulo 3, como el flujo de los iones,  $\Phi_0$ , su energía cinética,  $E$ , el ángulo local de incidencia,  $\gamma_0$ , las distancias características de las distribuciones de energía en las condiciones experimentales consideradas, etc. En la sección 3.4 pueden encontrarse también representaciones gráficas del valor de los diferentes coeficientes  $\Gamma$  normalizados por sus correspondientes valores absolutos a incidencia normal,  $\gamma_0 = 0$ , para el caso de los parámetros obtenidos en nuestras simulaciones bajo la aproximación de colisiones binarias (BCA).

En el apartado B.1 se muestra la forma de la velocidad de erosión para la distribución de energía unidimensional (3.29) considerada en 3.4.1. En B.2 para la distribución de energía (3.31) de la misma sección. En B.3 se muestra la forma de (3.33) de la sección 3.4.2 para la distribución de energía bidimensional (3.28).

### B.1. Distribución Gaussiana modificada 1d

$$V_O = N_g^{1d} \Lambda E \Phi_0 e^{-\frac{a^2}{2\sigma_z^2}} \left[ \Gamma_0^{g,1d} + \frac{\Gamma_x^{g,1d}}{R_x} \right]; \quad (\text{B.1})$$

$$\Gamma_0^{g,1d} = \frac{\sqrt{\pi} e^{\frac{A_g^2}{4B_g}} (A_g^2 + 2B_g)}{4B_g^{5/2}} \cos^3 \gamma_0;$$

$$\Gamma_x^{g,1d} = \frac{\sqrt{\pi} e^{\frac{A_g^2}{4B_g}}}{32B_g^{11/2}} \left[ 2A_g^3 B_g (A_g b_g - 10c_g) - A_g^5 c_g - 4A_g B_g^2 (A^2 a_g - 6A_g b_g + 15c_g) - 24B_g^3 (A_g a_g - b_g) \right];$$

$$A_g = \frac{a}{\sigma_z^2} \sin \gamma_0; \quad B_g = \frac{1}{2\sigma_z^2} \sin^2 \gamma_0 + \frac{1}{2\sigma_x^2} \cos^2 \gamma_0;$$

$$a_g = -2 \sin \gamma_0 \cos^2 \gamma_0; \quad b_g = -\frac{a}{2\sigma_z^2} \cos^4 \gamma_0;$$

$$c_g = \left( \frac{1}{2\sigma_x^2} - \frac{1}{2\sigma_z^2} \right) \cos^4 \gamma_0 \sin \gamma_0.$$

## B.2. Distribución exponencial 1d

$$V_0 = N_e^{1d} \Lambda E \Phi_0 e^{-\frac{a^2}{2\sigma_z^2}} \left[ \Gamma_0^{e,1d} + \frac{\Gamma_x^{e,1d}}{R_x} \right]; \quad (\text{B.2})$$

$$\begin{aligned} \Gamma_0^{e,1d} &= \frac{a_e}{B_e} + \frac{1}{8B_e^{5/2}} \sum_{i=1,2} \left\{ -2\sqrt{B_e} A_{e,i} b_e + \right. \\ &\left. [A_{e,i}^2 b_e - 2a_e A_{e,i} B_e + 2b_e B_e] \sqrt{\pi} e^{\frac{A_{e,i}^2}{4B_e}} \operatorname{erfc} \left( \frac{A_{e,i}}{2\sqrt{B_e}} \right) \right\}; \\ \Gamma_x^{e,1d} &= \frac{1}{64B_e^{11/2}} \sum_{i=1,2} \left\{ 2\sqrt{B_e} [(-1)^i A_{e,i}^4 f_e - 2A_{e,i}^3 B_e e_{e,i} + \right. \\ &+ (-1)^i 16B_e^3 d_{e,i} - 4B_e^2 (A_{e,i} (5e_{e,i} + (-1)^i 2B_e c_e)) + \\ &(-1)^i 18A_{e,i}^2 B_e f_e + (-1)^i 4A_{e,i} B_e^2 d_{e,i}] + \\ &[-(-1)^i A_{e,i}^5 f_e + 2A_{e,i}^3 B_e (A_{e,i} e_{e,i} - (-1)^i 10f_e) + \\ &- 4A_{e,i} B_e^2 ((-1)^i A_{e,i}^2 d_{e,i} - 6A_{e,i} e_{e,i} + (-1)^i 15f_e) + \\ &8B_e^3 ((-1)^i A_{e,i}^2 c_e - (-1)^i 3A_{e,i} d_{e,i} + 3e_{e,i})] \sqrt{\pi} e^{\frac{A_{e,i}^2}{4B_e}} \operatorname{erfc} \left( \frac{A_{e,i}}{2\sqrt{B_e}} \right) \right\}; \end{aligned}$$

$$A_{e,1} = \frac{\cos \gamma_0}{\sigma_x} - \frac{a \sin \gamma_0}{\sigma_z^2}; \quad A_{e,2} = \frac{\cos \gamma_0}{\sigma_x} + \frac{a \sin \gamma_0}{\sigma_z^2};$$

$$B_e = \frac{\sin^2 \gamma_0}{2\sigma_s^2}; \quad a_e = c \cos^2 \gamma_0; \quad b_e = \cos^3 \gamma_0;$$

$$c_e = -\frac{3}{2} c \cos \gamma_0 \sin \gamma_0;$$

$$d_{e,1} = \left( \frac{c}{2\sigma_x} - 2 \right) \cos^2 \gamma_0 \sin \gamma_0 + \frac{c a}{2\sigma_z^2} \cos^3 \gamma_0;$$

$$d_{e,2} = \left( \frac{c}{2\sigma_x} - 2 \right) \cos^2 \gamma_0 \sin \gamma_0 - \frac{c a}{2\sigma_z^2} \cos^3 \gamma_0;$$

$$e_{e,1} = \left( \frac{c}{2\sigma_z^2} - \frac{1}{2\sigma_x} \right) \cos^3 \gamma_0 \sin \gamma_0 - \frac{a}{2\sigma_z^2} \cos^4 \gamma_0;$$

$$e_{e,2} = -\left( \frac{c}{2\sigma_z^2} + \frac{1}{2\sigma_x} \right) \cos^3 \gamma_0 \sin \gamma_0 - \frac{a}{2\sigma_z^2} \cos^4 \gamma_0;$$

$$f_e = 2 \cos^5 \gamma_0 \sin \gamma_0.$$

### B.3. Distribución Gaussiana modificada 2d

$$V_O = N_g \Lambda E \Phi_0 e^{-\frac{a^2}{2\sigma_z^2}} \left[ \Gamma_0^g + \frac{\Gamma_x^g}{R_x} + \frac{\Gamma_y^g}{R_y} \right]; \quad (\text{B.3})$$

$$\Gamma_0^g = \frac{\pi e^{\frac{A_g^2}{4B_g}} (b_0 A_g^2 + 4a_0 B_g^2 + 2b_0 B_g)}{2\sqrt{2} B_g^{5/2}};$$

$$\Gamma_x^g = \frac{\pi e^{\frac{A_g^2}{4B_g}}}{16\sqrt{2} B_g^{11/2}} \left\{ 2B_g [4B_g^2 b_x (A_g^2 + 2B_g) - 8A_g B_g^3 a_x + \right. \\ \left. - 2A_g B_g c_x (A_g^2 + 6B_g) + d_x (A_g^4 + 12A_g^2 B_g + 12B_g^2)] + \right. \\ \left. - A_g e_x (A_g^4 + 20A_g^2 B_g + 60B_g^2) \right\};$$

$$\Gamma_y^g = \frac{\pi e^{\frac{A_g^2}{4B_g}}}{4\sqrt{2} B_g^{7/2}} [2B_g c_y (A_g^2 + 2B_g) - 4B_g^2 a_y (b_y - 2B_g) + \\ - A_g d_y (A_g^2 + 6B_g)];$$

$$A_g = \frac{a}{\sigma_z^2} \sin \gamma_0; \quad B_g = \frac{1}{2\sigma_z^2} \sin^2 \gamma_0 + \frac{1}{2\sigma_{xy}^2} \cos^2 \gamma_0;$$

$$a_0 = \sigma_{xy}^3 \cos \gamma_0; \quad b_0 = \sigma_{xy} \cos^3 \gamma_0;$$

$$a_x = -\sigma_{xy}^3 \sin \gamma_0; \quad b_x = -\frac{\sigma_{xy}^3}{2\sigma_z^2} a \cos^2 \gamma_0;$$

$$c_x = -\left( \frac{3}{2} \sigma_{xy} + \frac{\sigma_{xy}^3}{2\sigma_z^2} \right) \cos^2 \gamma_0 \sin \gamma_0;$$

$$d_x = -\frac{\sigma_{xy}}{2\sigma_z^2} a \cos^4 \gamma_0; \quad e_x = \left( \frac{1}{2\sigma_{xy}} - \frac{\sigma_{xy}}{2\sigma_z^2} \right) \sin \gamma_0 \cos^4 \gamma_0;$$

$$a_y = -\frac{3\sigma_{xy}^5}{2\sigma_z^2} a \cos^2 \gamma_0;$$

$$b_y = -\frac{3\sigma_{xy}^5}{2\sigma_z^2} \cos^2 \gamma_0 \sin \gamma_0 + \frac{\sigma_{xy}^3}{2} \cos^2 \gamma_0 \sin \gamma_0;$$

$$c_y = -\frac{\sigma_{xy}^3}{2\sigma_z^2} a \cos^4 \gamma_0; \quad d_y = \left( \frac{\sigma_{xy}}{2} - \frac{\sigma_{xy}^3}{2\sigma_z^2} \right) \cos^4 \gamma_0 \sin \gamma_0.$$

# C

---

## Orientación y longitud de onda lineal de las ondulaciones

---

En este apéndice mostraremos el método para calcular la longitud de onda lineal observada en los experimentos cuando la parte real de la relación de dispersión toma la siguiente forma

$$\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+) = -\nu_x k_x^2 - \nu_y k_y^2 - D_{xx} k_x^4 - D_{yy} k_y^4 - D_{xy} k_x^2 k_y^2. \quad (\text{C.1})$$

Para facilitar nuestro análisis será útil adelantar el signo de estos parámetros. Definimos  $\nu_x$  y  $\nu_y$  de forma que coincidan con los obtenidos en el modelo de BH. Como se demostró en el capítulo 3, el signo de  $\nu_x$  depende de las condiciones experimentales, mientras que  $\nu_y$  es siempre negativo, y para ángulos menores que un ángulo crítico se tenía que  $\nu_x < \nu_y$ . Por otro lado, consideraremos  $D_{xx}$ ,  $D_{yy}$  y  $D_{xy}$  positivas. Definimos el vector que maximiza (C.1) como  $\mathbf{k}^l = (k_x^l, k_y^l)$ . En consecuencia,  $\mathbf{k}^l$  debe cumplir la condición de máximo relativo, esta es

$$\frac{\partial \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+)}{\partial k_x}(\mathbf{k}^l) = \frac{\partial \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}}^+)}{\partial k_y}(\mathbf{k}^l) = 0. \quad (\text{C.2})$$

Esta condición es satisfecha por los siguientes vectores de onda, que se corresponden con las posibles direcciones en las que se puede orientar el patrón:

$$\begin{aligned} \mathbf{k}_0 &= (0, 0), \quad \mathbf{k}_1 = \left( \pm \sqrt{\frac{\nu_x}{-2D_{xx}}}, 0 \right), \quad \mathbf{k}_2 = \left( 0, \pm \sqrt{\frac{\nu_y}{-2D_{yy}}} \right), \\ \mathbf{k}_3 &= \left( \pm \sqrt{\frac{2\nu_x D_{yy} - \nu_y D_{xy}}{D_{xy}^2 - 4D_{xx}D_{yy}}}, \pm \sqrt{\frac{2\nu_y D_{xx} - \nu_x D_{xy}}{D_{xy}^2 - 4D_{xx}D_{yy}}} \right). \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

En (C.3), para aquellos ángulos en los cuales  $\nu_x$  es positivo,  $\mathbf{k}_1$  no estaría definido, mientras que en el caso de que  $D_{xy}^2 - 4D_{xx}D_{yy} = 0$  no existe la solución  $\mathbf{k}_3$  y las soluciones de (C.2) se limitan a las tres restantes. Para obtener el máximo absoluto debemos sustituir estos valores en la expresión (C.1); en ese caso resulta

$$\begin{aligned} \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_0}^+) &= 0, \quad \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_1}^+) = \frac{\nu_x^2}{4D_{xx}}, \quad \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_2}^+) = \frac{\nu_y^2}{4D_{yy}}, \\ \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_3}^+) &= \frac{\nu_x \nu_y D_{xy} - \nu_x^2 D_{yy} - \nu_y^2 D_{xx}}{D_{xy}^2 - 4D_{xx}D_{yy}}, \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

donde el mayor de estos valores nos dará la magnitud y orientación del patrón. Para estudiar cuál de estos términos es superior, escribimos a continuación  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_1}^+) - \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_3}^+)$  y  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_2}^+) - \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_3}^+)$  con el fin estudiar su signo.

$$\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_1}^+) - \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_3}^+) = \frac{(D_{xy}\nu_x - 2D_{xx}\nu_y)^2}{4D_{xx}(D_{xy}^2 - 4D_{xx}D_{yy})}, \quad (\text{C.5})$$

$$\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_2}^+) - \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_3}^+) = \frac{(D_{xy}\nu_y - 2D_{yy}\nu_x)^2}{4D_{yy}(D_{xy}^2 - 4D_{xx}D_{yy})}. \quad (\text{C.6})$$

El signo de  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_1}^+) - \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_3}^+)$  y  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_2}^+) - \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_3}^+)$  viene determinado por el signo de  $(D_{xy}^2 - 4D_{xx}D_{yy})$ . Para que  $\mathbf{k}_3$  maximice  $\mathcal{R}e(\omega^+)$  debe verificarse

$$D_{xy}^2 < 4D_{xx}D_{yy}. \quad (\text{C.7})$$

En el caso de que la parte real de la relación de dispersión sea de la forma (4.44), para la cual se verifica  $D_{xy} = D_{xx} + D_{yy}$ , es inmediato ver que no se cumple la condición (C.7), pues se tiene

$$D_{xy}^2 - 4D_{xx}D_{yy} = (D_{xx} - D_{yy})^2 > 0; \quad (\text{C.8})$$

por tanto, los únicos vectores de onda que maximizan (C.1) son  $\mathbf{k}_1$  o  $\mathbf{k}_2$  y el patrón se orienta en una de estas dos direcciones, salvo que

$$\nu_x^2 D_{yy} = \nu_y^2 D_{xx}, \quad (\text{C.9})$$

en cuyo caso se verifica  $\mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_1}^+) = \mathcal{R}e(\omega_{\mathbf{k}_2}^+)$  y se tiene un patrón rectangular cuyas longitudes de onda vienen dadas por (C.3). No es posible tener un patrón

---

cuadrado, pues en ese caso se debe verificar  $|\mathbf{k}_1| = |\mathbf{k}_2| \Rightarrow \nu_x D_{yy} = \nu_y D_{xx}$ , y para que se cumpla simultáneamente la condición (C.9) debe tenerse  $\nu_x = \nu_y$  y  $D_{xx} = D_{yy}$ , en cuyo caso el patrón no sería cuadrado sino isótropo.

En el caso de los términos difusivos inducidos por la erosión obtenidos en Makeev, Cuerno y Barabási (2002) para la ecuación (3.39) de la sección 3.5.1, se verifica que  $D_{xy}\nu_y = 2\nu_x D_{yy}$  y por tanto la solución  $\mathbf{k}_3$  de (C.3) se reduce a  $\mathbf{k}_2$ . Se obtiene de nuevo que el máximo de la parte real de la relación de dispersión no puede orientarse en cualquier dirección sino sólo en  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$ , o en ambas simultáneamente.



---

## Referencias

---

Los números entre llaves son las páginas en las que se cita la referencia.

- Ala-Nissila T., Hjelt T., Kosterlitz J. M. y Venäläinen O. (1993). Scaling exponents for kinetic roughening in higher dimensions. *J. Stat. Phys.* **72**, 207. {Pág. 18}
- Alkemade P. F. (2006). Propulsion of ripples on glass by ion bombardment. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 107602. {Págs. 39, 86–88, 149}
- Allen L.-N., Kleim R. E., Lewis T. S. y Ullom J. (1991). Surface error correction of a keck 10m telescope primary mirror segment by ion milling. *Proc. SPIE* **1531**, 195. {Pág. 27}
- Amar J. G. y Family F. (1990). Numerical solution of a continuum equation for interface growth in 2+1 dimensions. *Phys. Rev. A* **41**, 3399. {Pág. 18}
- Andreotti B., Claudin P. y Pouliquen O. (2006). Aeolian sand ripples: experimental study of fully developed states. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 028001. {Pág. 96}
- Aste T. y Valbusa U. (2004). Surface instabilities in granular matter and ion-sputtered surfaces. *Physica A* **332**, 548. {Págs. 97–99, 101, 107}
- Aste T. y Valbusa U. (2005). Ripples and ripples: from sandy deserts to ion-sputtered surfaces. *New J. Phys.* **7**, 122. {Págs. 97–99, 101, 107}
- Bagnold R. (1941). *The Physics of Blown Sand and Desert Dunes*. London: Chapman and Hall. {Pág. 92}
- Bar D. E. y Nepomnyashchy A. A. (1995). Stability of periodic waves governed by the modified kawahara equation. *Physica D* **86**, 586. {Pág. 20}
- Barabási A.-L. y Stanley H. E. (1995). *Fractal Concepts in Surface Growth*. Cambridge University Press. {Págs. 3, 8, 27, 34, 44, 84}
- Beccaria M. y Curci G. (1994). Numerical simulation of the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Phys. Rev. E* **50**, 4560. {Pág. 18}

- Behrisch R. (1981). *Sputtering by Particle Bombardment, Vol. I*. Heidelberg: Springer-Verlag. {Pág. 59}
- Benney D. J. (1966). Long waves on liquid films. *J. Math. Phys.* **45**, 150. {Pág. 20}
- Bobek T., Facsko S., Kurz H., Dekorsy T., Xu M. y Teichert C. (2003). Temporal evolution of dot patterns during ion sputtering. *Phys. Rev. B* **68**, 085324. {Págs. 40, 41, 88}
- Bouchaud J.-P., Cates M. E., Prakash J. R. y Edwards S. F. (1995). Hysteresis and metastability in a continuum sandpile model. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 1982. {Pág. 94}
- Bradley R. M. (1996). Dynamic scaling of ion-sputtered rotating surfaces. *Phys. Rev. E* **54**, 6149. {Pág. 83}
- Bradley R. M. y Cirlin E.-H. (1996). Theory of improved resolution in depth profiling with sample rotation. *Appl. Phys. Lett.* **68**, 3722. {Pág. 86}
- Bradley R. M. y Harper J. M. E. (1988). Theory of ripple topography induced by ion bombardment. *J. Vac. Sci. Technol. A* **6**, 2390. {Págs. 26, 61, 64}
- Bringa E. M., Nordlund K. y Keinonen J. (2001). Cratering-energy regimes: From linear collision cascades to heat spikes to macroscopic impacts. *Phys. Rev. B* **64**, 235426. {Págs. 30, 31, 88}
- Brown A.-D. y Erlebacher J. (2005). Temperature and fluence effects on the evolution of regular surface morphologies on ion-sputtered Si(111). *Phys. Rev. B* **72**, 075350. {Págs. 35, 36, 38, 87, 88}
- Brown A.-D., Erlebacher J., Chan W.-L. y Chason E. (2005). Transient topographies of ion patterned Si(111). *Phys. Rev. Lett.* **95**, 056101. {Pág. 35}
- Canuto C., Hussani M. Y., Quarteroni A. y Zang T. (1988). *Spectral methods in fluid dynamics*. New York: Springer Verlag. {Págs. 8, 11}
- Carter G. (2001). The physics and applications of ion beam erosion. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **34**, R1. {Pág. 28}
- Carter G. y Vishnyakov V. (1996). Roughening and ripple instabilities on ion-bombarded Si. *Phys. Rev. B* **54**, 17647. {Págs. 35, 36, 80, 87, 88}
- Castro M. y Cuerno R. (2005). Comment on kinetic roughening of ion-sputtered Pd(001) surface: Beyond the Kuramoto-Sivashinsky model. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 139601. {Pág. 85}
- Castro M., Cuerno R., Vázquez L. y Gago R. (2005). Self-organized ordering of nanostructures produced by ion-beam sputtering. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 016102. {Págs. 97, 99, 113}

- Castro M., Muñoz-García J., Cuerno R., García-Hernández M. y Vázquez L. (2007). Generic equations for pattern formation in evolving interfaces. *Enviado a New J. Phys.* {Págs. 3, 158}
- Chakrabarti A. y Toral R. (1989). Numerical study of a model for interface growth. *Phys. Rev. B* **40**, 11419. {Pág. 18}
- Chan A. C.-T. y Wang G.-C. (1998). Roughness evolution of Si(111) by low-energy ion bombardment. *Surf. Sci.* **414**, 17. {Págs. 45, 87}
- Chan W. L., Pavenayotin N. y Chason E. (2004). Kinetics of ion-induced ripple formation on cu(001) surfaces. *Phys. Rev. B* **69**, 245413. {Pág. 76}
- Chason E. y Chan W. L. (2006). Kinetic mechanisms in ion-induced ripple formation on Cu(001) surfaces. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **242**, 232. {Págs. 48, 50}
- Chason E., Chan W. L. y Bharathi M. S. (2006). Kinetic Monte Carlo simulations of ion-induced ripple formation: Dependence on flux, temperature, and defect concentration in the linear regime. *Phys. Rev. B* **74**, 224103. {Págs. 55, 56}
- Chason E., Erlebacher J., Aziz M. J., Floro J. A. y Sinclair M. B. (2001). Dynamics of pattern formation during low-energy ion bombardment of Si(001). *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **178**, 55. {Pág. 35}
- Chason E., Mayer T. M., Kellermann B. K., McIlroy D. E. y Howard A. J. (1994). Roughening instability and evolution of the Ge(001) surface during ion sputtering. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3040. {Págs. 35, 85, 86, 88}
- Chen H. H., Orquidez O. A., Ichim S., Rodriguez L. H., M-P-Brenner y Aziz J. (2005). Shocks in ion sputtering sharpen steep surface features. *Science* **310**, 294. {Pág. 27}
- Cheney K. B. y Pitkin E. T. (1965). *J. appl. phys. Sputtering at acute incidence* **36**, 3542. {Págs. 73, 74}
- Chey S. J., Nostrand J. E. V. y Cahill D. G. (1995). Surface morphology of Ge(001) during etching by low-energy ions. *Phys. Rev. B* **52**, 16696. {Págs. 44, 87}
- Chini T. K., Okuyama F., Tanemura M. y Nordlund K. (2003). Energy-dependent wavelength of the ion-induced nanoscale ripple. *Phys. Rev. B* **67**, 205403. {Págs. 33, 88}
- Cirlin E.-H., Vajo J. J., Doty R. E. y Hasenberg T. C. (1991). Ion-induced topography, depth resolution, and ion yield during secondary ion mass spectrometry depth profiling of GaAs/AlGaAs superlattice: effects of sample rotation. *J. Vac. Sci. Technol. A* **9**, 1395. {Págs. 35, 42, 44, 86–88}

- Costantini G., de Mongeot F. B., Boragno C. y Valbusa U. (2001). Is ion sputtering always a “negative homoepitaxial deposition” ? *Phys. Rev. Lett* **86**, 838. {Pág. 46}
- Cross M. C. y Hohenberg P. C. (1993). Pattern formation outside of equilibrium. *Rev. Mod. Phys.* **65**, 851. {Págs. 4, 108, 123}
- Csahók Z., Misbah C., Rioual F. y Valance A. (2000). Dynamics of aeolian sand ripples. *Eur. Phys. J. E* **3**, 71. {Págs. 23, 95, 96}
- Csahók Z., Misbah C. y Valance A. (1999). A class of nonlinear front evolution equations derived from geometry and conservation. *Physica D* **128**, 87. {Pág. 97}
- Cuerno R. y Barabási A.-L. (1995). Dynamic scaling of ion-sputtered surfaces. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4746. {Págs. 19, 20, 77}
- Cuerno R. y Lauritsen K. B. (1995). Renormalization-group analysis of a noisy Kuramoto-Sivashinsky equation. *Phys. Rev. E* **52**, 4853. {Pág. 19}
- Cuerno R., Makse H. A., Tomassone S., Harrington S. T. y Stanley H. E. (1995). Stochastic model for surface erosion via ion sputtering: Dynamical evolution from ripple morphology to rough morphology. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4464. {Págs. 19, 54}
- Das-Sarma S. y Tamborenea P. (1991). A new universality class for kinetic growth: One-dimensional molecular-beam epitaxy. *Phys. Rev. Lett.* **66**, 325. {Pág. 17}
- Ditchfield R. y Seebauer E. G. (1999). Direct measurement of ion-influenced surface diffusion. *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1185. {Pág. 32}
- Ditchfield R. y Seebauer E. G. (2001). Semiconductor surface diffusion: Effects of low-energy ion bombardment. *Phys. Rev. B* **63**, 125317. {Págs. 32, 89, 102}
- Drotar J. T., Zhao Y.-P., Lu T.-M. y Wang G.-C. (1999). Numerical analysis of the noisy Kuramoto-Sivashinsky equation in 2+1 dimensions. *Phys. Rev. E* **59**, 177. {Pág. 19}
- Edwards S. F. y Wilkinson D. R. (1982). The surface statistics of a granular aggregate. *Proc. R. Soc. London A* **381**, 17. {Pág. 15}
- Ehrlich G. y Hudda F. G. (1966). Atomic view of surface self-diffusion: tungsten on tungsten. *J. Chem. Phys.* **44**, 1039. {Pág. 46}
- Eklund E. A., Bruinsma R., Rudnick J. y Williams R. S. (1991). Submicron-scale surface roughening induced by ion bombardment. *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1759. {Págs. 45, 87}
- Elst K. y Vandervorst W. (1994). Influence of the composition of the altered layer on the ripple formation. *J. Vac. Sci. Technol. A* **12**, 3205. {Pág. 32}

- Elst K., Vandervorst W., Alay J., Snauwaert J. y Hallemans L. (1993). Influence of oxygen on the formation of ripples on Si. *J. Vac. Sci. Technol. B* **11**, 1968. {Pág. 32}
- Erlebacher J., Aziz A. J., Chason E., Sinclair M. B. y Floro J. A. (1999). Spontaneous pattern formation on ion bombarded Si(001). *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2330. {Págs. 35, 36, 87}
- Facsco S., Dekorsy T., Koerdts C., Trappe C., Kurz H., Vogt A. y Hartnagel H. L. (1999). Formation of ordered nanoscale semiconductor dots by ion sputtering. *Science* **285**, 1551. {Págs. 34, 40, 41, 88}
- Facsco S., Kurz H. y Dekorsy T. (2001). Energy dependence of quantum dot formation by ion sputtering. *Phys. Rev. B* **63**, 165329. {Págs. 40–42, 87, 88}
- Family F. y Vicsek T. (1985). Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model. *J. Phys. A* **18**, L75. {Pág. 7}
- Feix M., Hartmann A. K., Kree R., Muñoz-García J. y Cuerno R. (2005). Influence of collision cascade statistics on pattern formation of ion-sputtered surfaces. *Phys. Rev. B* **71**, 125407. {Págs. 29, 70, 71}
- Flamm D., Frost F. y Hirsch D. (2001). Evolution of surface topography of fused silica by ion beam sputtering. *Appl. Surf. Sci.* **179**, 95. {Págs. 35, 36, 38, 87, 88}
- Frisch T. y Verga A. (2006). Effect of step stiffness and diffusion anisotropy on the meandering of a growing vicinal surface. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 166104. {Págs. 23, 140}
- Frost F. (2002). The role of sample rotation and oblique ion incidence on quantum-dot formation by ion sputtering. *Appl. Phys. A, Mat. Sci. and Proc.* **74**, 131. {Pág. 84}
- Frost F., Schindler A. y Bigl F. (2000). Roughness evolution of ion sputtered rotating InP surfaces: Pattern formation and scaling laws. *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4116. {Págs. 40, 42–44, 88}
- Frost F., Ziberi B., Höche T. y Rauschenbach B. (2004). The shape and ordering of self-organized nanostructures by ion sputtering. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **216**, 9. {Págs. 27, 42–44, 84, 88}
- Gago R., Vázquez L., Cuerno R., Varela M., Ballesteros C. y Albella J. M. (2001). Production of ordered silicon nanocrystals by low-energy ion sputtering. *Appl. Phys. Lett.* **78**, 3316. {Págs. 40, 41, 88}
- Gago R., Vázquez L., Cuerno R., Varela M., Ballesteros C. y Albella J. M. (2002). Nanopatterning of silicon surfaces by low-energy ion-beam sputte-

- ring: dependence on the angle of ion incidence. *Nanotechnology* **13**, 304. {Págs. 40, 41, 88}
- Gago R., Vázquez L., Plantevin O., Metzger T. H., Muñoz-García J., Cuerno R. y Castro M. (2006). Order enhancement and coarsening of self-organized silicon nanodot patterns induced by ion-beam sputtering. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 233101. {Págs. 45, 46, 151, 152, 153}
- Gago R., Vázquez L., Plantevin O., Sánchez-García J. A., Varela M., Ballesteros M. C., Albella J. M. y Metzger T. H. (2006). Temperature influence on the production of nanodot patterns by ion beam sputtering of Si(001). *Phys. Rev. B* **73**, 155414. {Págs. 40, 42, 88}
- Garazo A.Ñ. y Velarde M. G. (1991). Dissipative Korteweg-de Vries description of Marangoni-Bénard oscillatory convection. *Phys. Fluids A* **3**, 2295. {Pág. 20}
- Giacometti A. y Rossi M. (2001). Pseudospectral approach to inverse problems in interface dynamics. *Phys. Rev. E* **63**, 046102. {Pág. 18}
- Giada L., Giacometti A. y Rossi M. (2002). Pseudospectral method for the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Phys. Rev. E* **65**, 036134. {Pág. 18}
- Golovin A. A., Nepomnyashchy A. A., Davis S. H. y Zaks M. A. (2001). Convective Cahn-Hilliard models: From coarsening to roughening. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1550. {Págs. 22, 23}
- Grove W. R. (1852). On the Electro-Chemical Polarity of Gases. *Phil. Trans. R. Soc. (London)* **142**, (I) 87. {Pág. 25}
- Habenicht S. (2001). Morphology of graphite surfaces after ion-beam erosion. *Phys. Rev. B* **63**, 125419. {Págs. 35, 38, 39, 87}
- Habenicht S., Bolse W., Lieb K. P., Reimann K. y Geyer U. (1999). Nanometer ripple formation and self-affine roughening of ion-beam-eroded graphite surfaces. *Phys. Rev. B* **60**, R2200. {Págs. 35, 87}
- Habenicht S., Lieb K. P., Koch J. y Wieck A. D. (2002). Ripple propagation and velocity dispersion on ion-beam-eroded silicon surfaces. *Phys. Rev. B* **65**, 115327. {Págs. 3, 35–37, 39, 87, 88, 149}
- Harrison D. R. (1988). Application of molecular dynamics simulations to the study of ion-bombarded metal surfaces. *Crit. Rev. Solid State Mater. Sci.* **14**, S1. {Pág. 30}
- Hu Y., Pesch W., Ahlers G., y Ecke R. E. (1998). Convection under rotation for Prandtl numbers near 1: Küppers-Lortz instability. *Phys. Rev. E* **71**, 2026. {Pág. 10}
- Huo S. y Schwarzacher W. (2001). Anomalous scaling of the surface width during Cu electrodeposition. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 256. {Pág. 9}

- Jeffries J. H., Zuo J. K. y Craig M. M. (1996). Instability of kinetic roughening in sputter-deposition growth of Pt on glass. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 4931. {Pág. 17}
- Kahng B., Jeong H. y Barabási A.-L. (2001). Quantum dot and hole formation in sputter erosion. *Appl. Phys. Lett.* **78**, 805. {Págs. 82, 83}
- Kardar M., Parisi G. y Zhang Y.-C. (1986). Dynamic scaling of growing interfaces. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 889. {Págs. 17, 18}
- Karen A., Nakagawa Y., Hatada M., Okuno K., Soeda F. y Ishitani A. (1995). Quantitative investigation of the  $O_2^+$  induced topography of GaAs and other III-V semiconductors: an STM study of the ripple formation and suppression of the secondary ion yield change by sample rotation. *Surf. Interf. Anal.* **23**, 506. {Págs. 32, 35, 38, 87}
- Karen A., Okuno K., Soeda F. y Ishitani A. (1991). A study of the secondary-ion yield change on the GaAs surface caused by the  $O_2^+$  ion-beam-induced rippling. *J. Vac. Sci. Technol. A* **9**, 2247. {Pág. 32}
- Karma A. y Misbah C. (1993). Competition between noise and determinism in step flow growth. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3810. {Pág. 19}
- Karmakar P. y Ghose D. (2004). Ion beam sputtering induced ripple formation in thin metal films. *Surf. Sci.* **554**, L101. {Pág. 35}
- Kawahara T. (1983). Formation of saturated solitons in a nonlinear dispersive system with instability and dissipation. *Phys. Rev. Lett.* **51**, 381. {Pág. 20}
- Kawahara T. y Takaoka M. (1989). Chaotic behavior of soliton lattice in an unstable Z. dissipative-dispersive nonlinear system. *Physica D* **39**, 43. {Pág. 20}
- Kim T. C., Ghim C.-M., Kim H. J., Kim D. H., Noh D. Y., Kim N. D., Chung J. W., Yang J. S., Chang Y. J., Noh T. W., Kahng B. y Kim J.-S. (2004). Kinetic roughening of ion-sputtered Pd(001) surface: Beyond the kuramoto-sivashinsky model. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 246104. {Págs. 85, 113}
- Kolasinski R. D. (2005). Oblique angle sputtering yield measurements for ion thruster grid materials. *41st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, Tucson, Arizona, July 10-13.* {Pág. 59}
- Koponen I., Hautala M. y Sievänen O.-P. (1996). Simulations of submicrometer-scale roughening on ion-bombarded solid surfaces. *I. Koponen and M. Hautala and O.-P. Sievänen* **54**, 13502. {Pág. 54}
- Koponen I., Hautala M. y Sievänen O.-P. (1997a). Simulations of ripple formation on ion-bombarded solid surfaces. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2612. {Pág. 54}

- Koponen I., Hautala M. y Sievänen O.-P. (1997b). Simulations of roughening of amorphous carbon surfaces bombarded by low-energy Ar-ions. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **127-128**, 230. {Pág. 54}
- Koponen I., Hautala M. y Sievänen O.-P. (1997c). Simulations of self-affine roughening and ripple formation on ion bombarded amorphous carbon surfaces. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **129**, 349. {Pág. 54}
- Koponen I., Sievänen O.-P., Hautala M. y Hakovirta M. (1997). Simulations of sputtering induced roughening and formation of surface topography in deposition of amorphous diamond films with mass separated kiloelectronvolt ion beams. *J. Appl. Phys.* **82**, 6047. {Págs. 54, 55}
- Krim J., Heyvaert I., Haesendonck C. V. y Bruynseraede Y. (1993). Scanning tunneling microscopy observation of self-affine fractal roughness in ion-bombarded film surfaces. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 57. {Pág. 48}
- Krug J. (2001). Coarsening of vortex ripples in sand. *Adv. Compl. Sys.* **4**, 353. {Págs. 124, 158}
- Kuramoto Y. y Tsuzuki T. (1976). Persistent propagation of concentration waves in dissipative media far from thermal equilibrium. *Prog. Theor. Phys.* **55**, 356. {Pág. 19}
- Lam C.-H. y Shin F. G. (1998). Improved discretization of the Kardar-Parisi-Zhang equation. *Phys. Rev. E* **58**, 5592. {Págs. 119, 125, 135}
- LaQuey R. E., Mahajan S. M., Rutherford P. H. y Tang W. M. (1975). Nonlinear saturation of the trapped-ion mode. *Phys. Rev. Lett.* **34**, 391. {Pág. 19}
- Leung K. (1990). Theory on morphological instability in driven systems. *J. Stat. Phys.* **61**, 345. {Pág. 22}
- Li J., Stein D., McMullan C., Branton D., Aziz M. J. y Golovchenko J. A. (2001). Ion-beam sculpting at nanometre length scales. *Nature* **412**, 166. {Pág. 27}
- López J. M. y Rodríguez M. A. (1996). Lack of self-affinity and anomalous roughening in growth processes. *Phys. Rev. E* **54**, R2189. {Pág. 9}
- López J. M., Rodríguez M. A. y Cuerno R. (1997). Superroughening versus intrinsic anomalous scaling of surfaces. *Phys. Rev. E* **56**, 3993. {Pág. 9}
- Makeev M. y Barabási A.-L. (1997). Ion-induced effective surface diffusion in ion sputtering. *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2800. {Pág. 77}
- Makeev M., Cuerno R. y Barabási A.-L. (2002). Morphology of ion-sputtered surfaces. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **197**, 185. {Págs. 20, 36, 58, 60, 77-80, 173}
- Makse H. A. (2000). Grain segregation mechanism in aeolian sand ripples. *Eur. Phys. J. E* **1**, 127. {Pág. 97}

- Marinari E., Pagnani A. y Parisi G. (2000). Critical exponents of the KPZ equation via multi-surface coding numerical simulations. *J. Phys. A* **33**, 8181. {Pág. 18}
- Mayer T. M., Chason E. y Howard A. J. (1994). Roughening instability and ion-induced viscous relaxation of SiO<sub>2</sub> surfaces. *J. Appl. Phys.* **76**, 1633. {Págs. 35, 85, 88}
- Michely T. y Comsa G. (1991). Temperature dependence of the sputtering morphology of Pt(111). *Surf. Sci.* **256**, 217. {Pág. 48}
- Misbah C. y Pierre-Louis O. (1996). Pulses and disorder in a continuum version of step-bunching dynamics. *Phys. Rev. E* **53**, R4318. {Págs. 20, 21}
- Misbah C. y Valance A. (2003). Sand ripple dynamics in the case of out-of-equilibrium aeolian regimes. *Eur. Phys. J. E* **12**, 523. {Págs. 20, 96}
- Mishra P. y Ghose D. (2006). Formation of nanoripples in Al films during O<sub>2</sub><sup>+</sup> sputtering. *Phys. Rev. B* **74**, 155427. {Pág. 35}
- Morel S., Schmittbuhl J., López J. M. y Valentin G. (1998). Anomalous roughening of wood fractured surfaces. *Phys. Rev. E* **58**, 6999. {Pág. 9}
- Moser K. y Wolf D. (1994). Vectorized and parallel simulations of the Kardar-Parisi-Zhang equation in 3+1 dimensions. *J. Phys. A* **27**, 4049. {Pág. 18}
- Mullins W. W. (1957). Theory of thermal grooving. *J. Appl. Phys.* **28**, 333. {Págs. 15, 16, 69, 101}
- Mullins W. W. (1959). Flattening of a nearly plane solid surface due to capillarity. *J. Appl. Phys.* **30**, 77. {Pág. 86}
- Mussi V., Granone F., Boragno C., de Mongeot F. B., Valbusa U., Marolo T. y Montekali R. M. (2006). Surface nanostructuring and optical activation of lithium fluoride crystals by ion beam irradiation. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 103116. {Pág. 27}
- Muñoz-García J., Castro M. y Cuerno R. (2006). Nonlinear ripple dynamics on amorphous surfaces patterned by ion beam sputtering. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 086101. {Págs. 97, 99, 100}
- Muñoz-García J., Cuerno R. y Castro M. (2006). Short-range stationary patterns and long-range disorder in an evolution equation for one-dimensional interfaces. *Phys. Rev. E* **74**, R050103. {Pág. 133}
- Nastasi M. A., Mayer J. W. y Hirvonen J. K. (1996). *Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications*. New York: Cambridge University Press. {Pág. 29}
- Navez M., Sella C. y Chaperot D. (1962). Étude de l'attaque du verre par bombardement ionique. *Comptes Rendus. Académie des Sciences* **254**, 240. {Págs. 25, 26, 34, 35, 87}

- Nepomnyashchy A. A. (1974). Stability of the wavy regimes in the film flowing down an inclined plane. *Fluid Dynamics* **9**, 354. {Pág. 19}
- Oechsner H. (1975). Sputtering, a review of some recent experimental and theoretical aspects. *Appl. Phys. A, Mat. Sci. and Proc.* **8**, 185. {Págs. 73, 74}
- Olivia-Florio A., Baragiola R. A., Jakas M. M., Alonso E. V. y Ferrón J. (1987). Noble-gas ion sputtering yield of gold and copper: dependence on the energy and angle of incidence of the projectiles. *Phys. Rev. B* **35**, 2198. {Págs. 73–75}
- Ozaydin G., Özcan A. S., Wang Y., Ludwig F., Zhou H., Headrick R. L. y Siddons D. P. (2005). Real-time x-ray studies of Mo-seeded Si nanodot formation during ion bombardment. *Appl. Phys. Lett.* **87**, 163104. {Págs. 40, 41, 88}
- Park S., Kahng B., Jeong H. y Barabási A.-L. (1999). Dynamics of ripple formation in sputter erosion: Nonlinear phenomena. *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3486. {Pág. 81}
- Politi P. y Misbah C. (2004). When does coarsening occur in the dynamics of one-dimensional fronts? *Phys. Rev. Lett.* **92**, 090601. {Págs. 123, 133, 160}
- Politi P. y Misbah C. (2006). Nonlinear dynamics in one dimension: A criterion for coarsening and its temporal law. *Phys. Rev. E* **73**, 036133. {Págs. 123, 124, 133, 140, 160}
- Politi P. y Misbah C. (2007). Modified Kuramoto-Sivashinsky equation: Stability of stationary solutions and the consequent dynamics. *Phys. Rev. E* **75**, 027202. {Págs. 23, 160}
- Prigozhin L. (1999). Nonlinear dynamics of aeolian sand ripples. *Phys. Rev. E* **60**, 729. {Pág. 93}
- Qi L.-J., Li W.-Q., Yang X.-J., Fang Y.-C. y Lu M. (2005). Nanostructuring of Si(100) by normal-incident Ar<sup>+</sup> ion sputtering at low ion flux. *Chin. Phys. Lett.* **22**, 431. {Pág. 40}
- Raible M., Linz S. J. y Hänggi P. (2000). Amorphous thin film growth: Minimal deposition equation. *Phys. Rev. E* **62**, 1691. {Págs. 23, 24, 140}
- Raible M., Linz S. J. y Hänggi P. (2001). Amorphous thin film growth: Effects of density inhomogeneities. *Phys. Rev. E* **64**, 031506. {Pág. 113}
- Raible M., Mayr S. G., Linz S. J., Moske M., Hänggi P. y Samwer K. (2000). Amorphous thin-film growth: Theory compared with experiment. *Europhys. Lett.* **50**, 61. {Págs. 23, 113}
- Ramasco J. J., López J. M. y Rodríguez M. A. (2000). Generic dynamic scaling in kinetic roughening. *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2199. {Pág. 9}

- Remoissenet M. (1994). *Waves Called Solitons*. Germany: Springer-Verlag. {Págs. 20, 21}
- Rost M. y Krug J. (1995). Anisotropic kuramoto-sivashinsky equation for surface growth and erosion. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3894. {Págs. 81, 150}
- Rusponi S., Boragno C. y Valbusa U. (1997). Ripple structure on Ag(110) surface induced by ion sputtering. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 2795. {Pág. 47}
- Rusponi S., Constantini G., Boragno C. y Valbusa U. (1998a). Ripple wave vector rotation in anisotropic crystal sputtering. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2735. {Pág. 49}
- Rusponi S., Constantini G., Boragno C. y Valbusa U. (1998b). Scaling laws of the ripple morphology on Cu(110). *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4184. {Pág. 76}
- Saito Y. y Uwaha M. (1996). Anisotropy effect on step morphology described by Kuramoto-Sivashinsky equation. *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 3576. {Pág. 22}
- Sato M., Uwaha M. y Saito Y. (1998). Control of chaotic wandering of an isolated step by the drift of adatoms. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4233. {Pág. 20}
- Schubert E., Razek N., Frost F., Schindler A. y Rauschenbach B. (2005). GaAs surface cleaning by low-energy hydrogen ion bombardment at moderate temperatures. *J. Appl. Phys.* **97**, 023511. {Pág. 26}
- Schwoebel R. L. (1968). Step motion on crystal surfaces II. *J. Appl. Phys.* **40**, 614. {Pág. 46}
- Schwoebel R. L. y Shipsey E. J. (1966). Step motion on crystal surfaces. *J. Appl. Phys.* **37**, 3682. {Pág. 46}
- Sigmund P. (1969). Theory of sputtering. I. sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets. *Phys. Rev.* **184**, 383. {Págs. 29, 32, 57, 58}
- Sigmund P. (1973). A mechanism of surface micro-roughening by ion bombardment. *J. Mat. Sci.* **8**, 1545. {Págs. 29, 57–60}
- Sigmund P. (1981). *Sputtering by ion bombardment. Theoretical concepts*. Springer, Berlin. {Pág. 29}
- Sivashinsky G. I. (1977). Nonlinear analysis of hydrodynamic instability in laminar flames - I. Derivation of basic equations. *Acta Astronautica* **4**, 1177. {Pág. 19}
- Smilgies D. M., Eng P. J., Landemark E. y Nielsen M. (1997). Sputtering of Ge(001): transition between dynamic scaling regimes. *Surf. Sci.* **377**, 1038. {Págs. 45, 87}
- Sneppen K., Krug J., Jensen M. H., Jayaprakash C. y Bohr T. (1992). Dynamic scaling and crossover analysis for the kuramoto-sivashinsky equation. *Phys. Rev. A* **46**, R7351. {Pág. 19}

- Stepanova M. y Dew S. K. (2004). Surface relaxation in ion-etch nanopatterning. *Appl. Phys. Lett.* **84**, 1374. {Pág. 55}
- Stepanova M., Dew S. K. y Soshnikov I. P. (2002). Sputtering from ion-beam-roughened Cu surfaces. *Phys. Rev. B* **66**, 125407. {Pág. 76}
- Tan S. K., Liu R., Sow C. H. y Wee A. T. S. (2006). Self-organized nanodot formation on InP(100) by oxygen ion sputtering. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **248**, 83. {Págs. 40, 42, 87}
- Terzidis O., Claudin P. y Bouchaud J.-P. (1998). A model for ripple instabilities in granular media. *Eur. Phys. J. B* **5**, 245. {Pág. 95}
- Toma A., de Mongeot F. B., Buzio R., Firpo G., Bhattacharyya S., Boragno C. y Valbusa U. (2005). Ion beam erosion of amorphous materials: evolution of surface morphology. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **230**, 551. {Págs. 35, 37, 38, 88}
- Umbach C. C., Headrick R. L. y Chan K.-C. (2001). Spontaneous nanoscale corrugation of ion-eroded SiO<sub>2</sub>: The role of ion-irradiation-enhanced viscous flow. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 246104. {Págs. 33, 88}
- Vajo J. J., Doty R. E. y Cirlin E. H. (1996). Influence of O<sub>2</sub><sup>+</sup> energy, flux, and fluence on the formation and growth of sputtering-induced ripple topography on silicon. *J. Vac. Sci. Technol. A* **14**, 2709. {Págs. 32, 35, 36, 38, 87}
- Valance A. y Rioual F. (1999). A nonlinear model for aeolian sand ripples. *Eur. Phys. J. B* **10**, 543. {Pág. 95}
- Valbusa U., Boragno C. y de Mongeot F. B. (2002). Nanostructuring surfaces by ion sputtering. *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 8153. {Págs. 26, 28, 46–48}
- Wang X.-S., Pechman R. J. y Weaver J. H. (1996). Trends in surface roughening: analysis of ion-sputtered GaAs(110). *Surf. Sci.* **364**, L511. {Págs. 45, 87}
- Witcomb M. J. (1974). Prediction of the apex angle of surface cones on ion-bombarded crystalline materials. *J. Mater. Sci.* **9**, 1227. {Pág. 59}
- Wittmaack K. (1990). Effect of surface roughening on secondary ion yields and erosion rates of silicon subject to oblique oxygen bombardment. *J. Vac. Sci. Technol. A* **8**, 2246. {Págs. 35, 87}
- Wolf D. E. y Villain J. (1990). Growth with surface diffusion. *Europhys. Lett.* **13**, 389. {Pág. 17}
- Xu M. y Teichert C. (2004). How do nanoislands induced by ion sputtering evolve during the early stage of growth? *J. Appl. Phys.* **96**, 2244. {Págs. 40–42, 88}

- Yang H.-N., Zhao Y.-P., Wang G. C. y M-Lu T. (1996). Noise-induced roughening evolution of amorphous Si films grown by thermal evaporation. *Phys. Rev. Lett* **76**, 3774. {Pág. 17}
- Yewande E. O., Hartmann A. K. y Kree R. (2006). Morphological regions and oblique-incidence dot formation in a model of surface sputtering. *Phys. Rev. B* **73**, 115434. {Págs. 55, 56}
- Yewande E. O., Kree R. y Hartmann A. K. (2005). Propagation of ripples in monte carlo models of sputter-induced surface morphology. *Phys. Rev. B* **71**, 195405. {Págs. 55, 56}
- Zhao Y. P., Fortin J. B., Bonvallet G., Wang G.-C. y Lu T. M. (2000). Kinetic roughening in polymer film growth by vapor deposition. *Phys. Rev. Lett* **85**, 3229. {Pág. 9}
- Zhao Y.-P., Wang G.-C. y Lu T.-M. (2001). *Characterization of Amorphous and Crystalline Rough Surfaces: Principles and Applications*. San Diego: Academic Press. {Págs. 6, 39, 127}
- Ziberi B., Frost F., Höche T. y Rauschenbach B. (2005). Ripple pattern formation on silicon surfaces by low-energy ion-beam erosion: Experiment and theory. *Phys. Rev. B* **72**, 235310. {Págs. 33, 35–39, 87, 88}
- Ziberi B., Frost F. y Rauschenbach B. (2006). Pattern transitions on Ge surfaces during low-energy ion beam erosion. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 173115. {Págs. 35, 36, 39, 40, 42, 45, 87, 88}
- Ziegler J. F., Biersack J. P. y Littmark U. (1985). *The Stopping and Range of Ions in Matter*. New York: Pergamon. {Págs. 30, 58, 73}