

ASPECTOS TEÓRICOS Y MODELADO COMPUTACIONAL DE LAS TRANSFORMACIONES MORFOLÓGICAS DE MICRO/NANO-ESTRUCTURAS SOMETIDAS A TRATAMIENTOS TÉRMICOS

Cecilia Sottile¹, Matías Rafti¹, Federico Castez^{1,2}

¹ Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), (CCT La Plata CONICET- UNLP), Diag. 113 y 64, 1900, La Plata, Argentina.

² Actualmente en YPF-Tecnología

ceciliasottile@inifta.unlp.edu.ar

RESUMEN: El proceso de transporte de materia por difusión superficial tomó gran importancia en los últimos años, ya que se pueden encontrar numerosas aplicaciones, tanto en estructuras de bajas como de altas razones de aspecto, siendo estas últimas de gran interés. En este trabajo estudiamos la Ecuación de Mullins que describe la evolución de la interfaz de una muestra sólida, tratada como un medio continuo, por corrientes de difusión superficial. Mediante simulaciones computacionales, integramos numéricamente dicha ecuación y comparamos los resultados obtenidos con los existentes en la literatura.

PALABRAS CLAVE: Difusión Superficial, Altas razones de aspecto.

Los procesos de difusión superficial inducidos por tratamientos térmicos de alta temperatura sobre sustratos de alta razón de aspecto tienen amplias aplicaciones, entre ellas la reducción de la rugosidad superficial [1], y la formación de huecos en el seno de una superficie de silicio [2].

La Ecuación de Mullins [3], da la evolución de la interfaz de una muestra sólida sólida de la siguiente manera:

$$v_n = -K \Delta_s C \quad (1)$$

en donde v_n es la velocidad normal en un punto dado de la interfaz, K es un parámetro que depende del material utilizado y de la temperatura a la que se somete el material y $\Delta_s C$ es el laplaciano intrínseco de la curvatura.

En el caso de interfaces unidimensionales para cada instante t se tiene una curva $y(x, t)$ que representa dicha interfaz. $\Delta_s C$ en este caso, es la derivada segunda de la curvatura respecto del parámetro longitud de arco.

$$\Delta_s C = \frac{\partial^2 C}{\partial s^2} \quad (2)$$

Notemos que se satisfacen las siguientes igualdades, para luego expresar la ecuación de Mullins en términos de $y(x, t)$, sustituyendo v_n , C y utilizando la relación $\frac{\partial}{\partial s} = \left(\frac{\partial x}{\partial s}\right) \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)$.

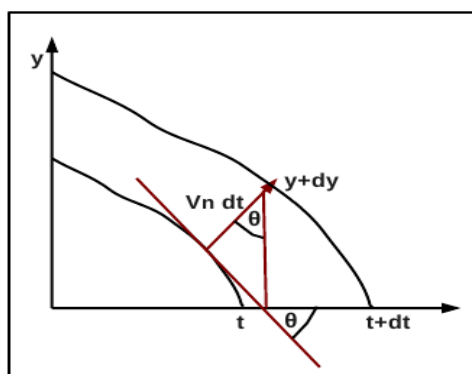


Figura 1. Relación geométrica.

Como se observa en la Figura 1, llamando θ al ángulo entre la tangente de

la curva y el eje x , resulta evidente que $\cos(\theta) = \frac{v_n dt}{dy}$. Además

como $\text{tg}(\theta) = \frac{dy}{dx} \text{tg}^2(\theta) + 1 = \frac{1}{\cos^2(\theta)}$, se tiene que

$$\cos(\theta) = \frac{1}{\left(1 + \left(\frac{dy}{dx}\right)^2\right)^{1/2}}$$

Igualando los resultados de $\cos(\theta)$, obtenemos la siguiente igualdad para v_n .

$$v_n = \left(1 + \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^2\right)^{-1/2} \frac{\partial y}{\partial t} \quad (3)$$

Reescribiendo la ecuación de Mullins, utilizando las igualdades (2) y (3), se tiene que

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -K \left(1 + (y')^2\right)^{1/2} \frac{\partial^2 C}{\partial s^2}$$

Además, como la curvatura de una función $y(x, t)$ es

$$C = \frac{y''}{\left(1 + (y')^2\right)^{3/2}}, \text{ donde } y' = \frac{\partial y}{\partial x}$$

se tiene que

$$\frac{\partial y}{\partial t} = -K \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(1 + (y')^2\right)^{-1/2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{y''}{\left(1 + (y')^2\right)^{3/2}} \right) \right]$$

Al ser ésta una ecuación en derivadas parciales de cuarto orden y no lineal, no se puede hallar una solución analítica en su caso general, pero sí

en su límite lineal, o sea cuando $\left|\frac{dy}{dx}\right| \ll 1$. En este caso la ecuación se reduce a

$$\frac{\partial y(x, t)}{\partial t} = -K \frac{\partial^4 y}{\partial x^4} \quad (4)$$

la cual es una ecuación en derivadas parciales lineal, para la cual se pueden encontrar soluciones utilizando el método de separación de variables.

Se puede ver que, partiendo de una condición inicial que consiste en un

único modo de Fourier dado por $y(x, 0) = A \text{sen}\left(\frac{2n\pi}{\lambda} x\right)$ evoluciona a tiempo t en

$$y(x, t) = A e^{-\left(\frac{2n\pi}{\lambda}\right)^4 K t} \text{sen}\left(\frac{2n\pi}{\lambda} x\right), n = 1, 2, \dots \quad (5)$$

Donde $A(t) = A e^{-\left(\frac{2n\pi}{\lambda}\right)^4 K t}$ da la evolución de la amplitud en

función del tiempo, y $-\left(\frac{2n\pi}{\lambda}\right)^4 K$ es la constante de decaimiento, la cual depende del parámetro longitud de onda λ elevado a la cuarta potencia.

La solución general se obtiene, con diferentes valores de n , como combinación lineal de éstos armónicos.

A lo largo de este trabajo se realizaron simulaciones, que consistieron en integrar numéricamente la ecuación de Mullins.

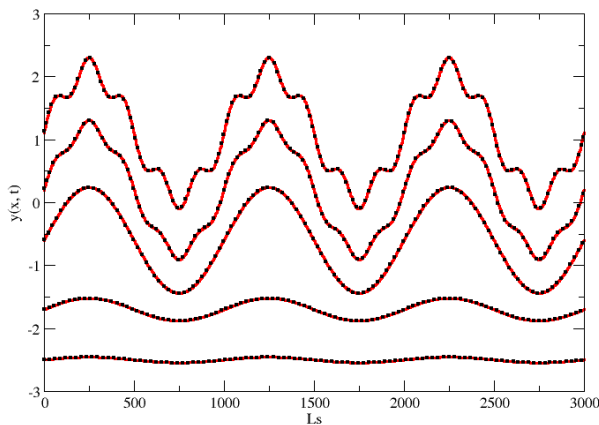


Figura 2. En esta figura se puede observar la evolución de una interfaz inicial sinusoidal con dos armónicos. Las curvas fueron desplazadas para una mejor apreciación.

En la Figura 2, se observan 5 estadios de una de las simulaciones realizadas, a diferentes tiempos, la cual se inicio con una condición inicial sinusoidal con dos armónicos ($n=1$ y $n=20$), quedando la constante de decaimiento del segundo armónico multiplicada por un factor 20^4 , que como se observó anteriormente, la constante de decaimiento tienen una fuerte dependencia con el parámetro longitud de onda, lo cual hace que este término decaiga más rápidamente, y el primer armónico necesite más tiempo para decaer totalmente. Se observa el buen acuerdo entre la simulación (curvas rojas continuas) y la aproximación lineal de bajas pendientes (curva de línea punteada negra). Este acuerdo se establece siempre y cuando estemos dentro de la aproximación lineal, en donde la relación entre la amplitud y la longitud de onda (razón de aspecto (AR)) se mantiene por debajo de un valor específico.

En diferentes simulaciones efectuadas se validó que acorde nos acercamos a una razón de aspecto del orden de 0,1 la aproximación de bajas pendientes deja de tener un buen acuerdo con la simulación. Esto nos lleva naturalmente a estudiar la Ecuación de Mullins fuera del límite lineal y así poder obtener mejor concordancia con la simulación.

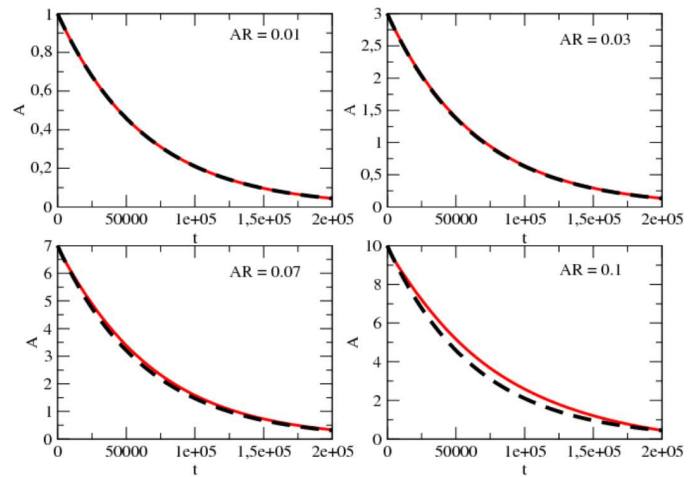


Figura 3. En esta figura podemos observar que a medida que nos alejamos de la aproximación de bajas pendientes, la simulación ya no tiene un buen acuerdo con la aproximación lineal.

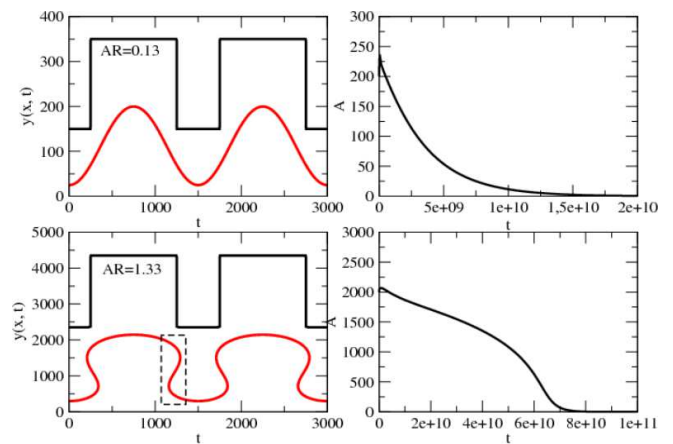


Figura 4. En esta figura notamos el desigual comportamiento de la evolución con bajas y altas razones de aspecto.

Observamos en la Figura 4 que dentro de la aproximación lineal las curvas de la evolución de la interfaz son gráficos de funciones, y la amplitud en función del tiempo mantiene un comportamiento exponencial. En cambio en altas razones de aspecto observamos que las curvas a medida que progresa la evolución presentan regiones multivaluadas, dejando de ser gráficos de funciones. Además la evolución de la amplitud en función del tiempo deja de tener un comportamiento exponencial [4 – 5].

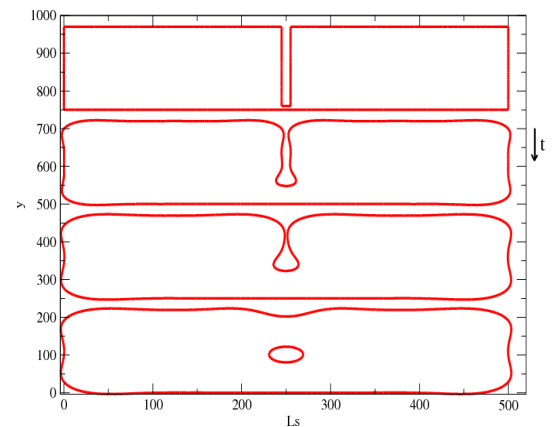


Figura 5. Si hacemos evolucionar un perfil con una condición inicial de alta razón de aspecto, al cabo de un determinado tiempo, se observa la formación de huecos en el seno del sustrato. Las curvas fueron desplazadas para una mejor apreciación.

A medida que aumentamos la razón de aspecto, luego de un determinado tiempo, observamos que la interfaz evoluciona (Figura 5) de modo tal que comienzan a formarse cuellos y huecos.

En este trabajo hemos realizado un detallado análisis computacional de la evolución de perfiles, de bajas razones de aspecto, por difusión superficial y hemos comenzado el estudio de perfiles de altas razones de aspecto.

Dentro de la aproximación de bajas pendientes (límite lineal) los resultados obtenidos mediante simulaciones numéricas reprodujeron con muy buena aproximación los resultados analíticos.

REFERENCIAS

[1] M. Lee, C. Wu. "Thermal Annealing in Hydrogen for 3-D Profile

Transformation on Silicon-on-Insulator and Sidewall Roughness Reduction". *J. Microelectromechanical Syst.* 15, **2006**, 15., 338-343.

[2] I. Mizushima, T. Sato, S. Taniguchi, Y. Tsunashima. "Empty-space-in-silicon technique for fabricating a silicon-on-nothing structure". *Appl. Phys. Lett.* 77, **2000**. 3290-3292.

[3] W. W. Mullins, "Theory of Thermal Grooving", *J. Appl. Phys.*, 28, **1956**, 333-339.

[4] M. F. Castez. "Surface-diffusion-driven decay of patterns: beyond the small slopes approximation". *J. Phys.: Condens. Matter*, 22, **2010**, 345007.

[5] M. A. Madrid, R. C. Salvarezza, M. F. Castez. "Surface-diffusion-driven decay of high-aspect-ratio gratings: Existence of morphologically related classes". *Phys. Rev.*, 87, **2013**, 062407