

EVOLUCIÓN DE INTERFACES CON SIMETRÍA ROTACIONAL DISCRETA POR PROCESOS DE DIFUSIÓN SUPERFICIAL

Cecilia Sottile¹, Matías Rafti¹, Victoria Vampa², Federico Castez^{1,3}

¹Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA, CCT La Plata-CONICET), Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Química, Universidad Nacional de La Plata (UNLP), calle 64 y Diag. 113 s/n, 1900, La Plata, Buenos Aires, Argentina.

²Departamento de Ciencias Básicas - Facultad de Ingeniería - UNLP.

³YPF-Tecnología.

ceciliasottile@inifta.unlp.edu.ar

RESUMEN: La evolución de interfaces por Difusión Superficial ha tenido numerosas aplicaciones en los últimos años. En este trabajo estudiamos la teoría continua de Difusión Superficial para medios isotrópicos la cual se basa en la ecuación de Mullins que relaciona la velocidad normal de una dada interfaz con los gradientes de curvatura. Hemos integrado numéricamente dicha ecuación para una amplia variedad de interfaces bidimensionales y estudiamos el mismo tipo de sistema físico mediante un modelo discreto. Partiendo de condiciones iniciales equivalentes, se realizó un estudio comparativo de la evolución de las interfaces en los sistemas continuo y discreto, tanto en los aspectos cinéticos como en los morfológicos.

PALABRAS CLAVE: Difusión Superficial, Alta razón de aspecto, Método de Monte Carlo Cinético

Los procesos de difusión superficial inducidos por tratamientos térmicos de alta temperatura han tenido amplias aplicaciones en los últimos años, entre ellas la reducción de la rugosidad superficial [1], la formación de huecos en el seno de una superficie de silicio [2] y la obtención de estructuras topológicamente particulares en el campo de la microelectrónica [3].

Para modelar la teoría continua de Difusión Superficial para medios isotrópicos frecuentemente se utiliza la ecuación de Mullins [4]

$$v_n = -K \Delta_s c$$

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 con respecto al parámetro longitud de arco.

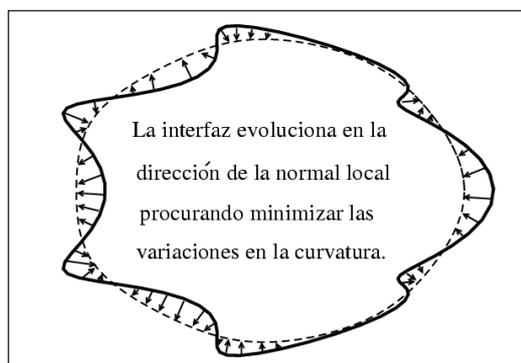


Figura 1: Representación gráfica de la evolución de una interfaz cerrada.

En este trabajo estudiaremos diferentes clases de estructuras bidimensionales que evolucionan por procesos de difusión superficial cuyas condiciones iniciales son curvas cerradas con simetría rotacional discreta, como por ejemplo interfaces del tipo estrella o engranaje con alta razón de aspecto y mostraremos la existencia de una familia de soluciones en función de parámetros dependientes del tiempo.

Consideremos una curva cerrada plana $L(t)$ que evoluciona por difusión superficial, y sea $L_c(t) = n\lambda_c$ la longitud total de dicha curva a tiempo t , donde λ_c es la distancia entre crestas sucesivas, mientras que n es el orden de la simetría discreta. A partir de la ecuación de Mullins se puede verificar la siguiente propiedad general

$$\frac{dL_c}{dt} = -K \int_{L(t)} c_s^2 ds$$

de lo cual se deduce que el flujo de difusión superficial acorta las longitudes de las curvas.

Además, como el flujo de difusión superficial conserva el número total de partículas, en todo instante debe verificarse que

$$\int_{L(t)} v_n(s,t) ds = 0$$

Lo cual indica que se mantiene constante el área encerrada por la interfaz a lo largo de la evolución.

A medida que la curva evoluciona se generan curvas multivaluadas y para poder describirlas utilizamos la ecuación de César. Debido a que la curvatura en un dado tiempo es periódica de período L_c podemos expandirla mediante una serie de Fourier de la siguiente manera

$$c(s) = c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cos \left[n \left(\frac{2\pi}{L_c} s + \delta_n \right) \right],$$

donde c_n son los coeficientes de Fourier y δ_n es el desplazamiento de fase. Luego integrando $C(s)$, podemos obtener una descripción alternativa de la curva a través de la ecuación de Whewell:

$$\vartheta(s) = c_0 s + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{L_c}{2n\pi} \right) c_n s \sin \left[n \left(\frac{2\pi}{L_c} s + \delta_n \right) \right],$$

Luego de un período transitorio la curvatura como función del parámetro longitud de arco adquiere un comportamiento sinusoidal, en donde la interfaz tiene las contribuciones de orden más bajo en la ecuación de Whewell de la siguiente manera:

$$\vartheta(s) = \frac{2\pi}{L_c} s + A \sin [k_c s],$$

las cuales son curvas cerradas, simétricas de orden n, en donde

$$A = \frac{L_c c_n}{2n\pi} k_s = \frac{2n\pi}{L_c}$$

Combinando las ecuaciones anteriores con las propiedades generales de la ecuación de Mullins puede obtenerse una expresión analítica aproximada para la evolución de A(t) y $\lambda_s(t)$ [5]:

$$\frac{d\lambda_s}{dt} = -\frac{8KA^2\pi^4}{\lambda_s^3}$$

$$dA/dt = (16KA^2\pi^4) / [R_{\text{lim}}]^2 ((C_3(A, \pi)) / (C_1(A, \pi)))$$

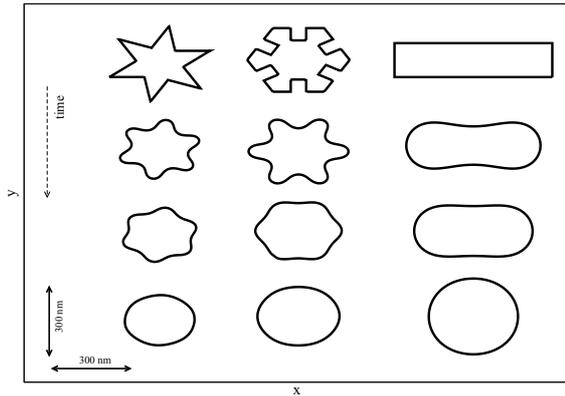


Figura 2: Evolución de diferentes condiciones iniciales obtenidas integrando numéricamente la ecuación de Mullins.

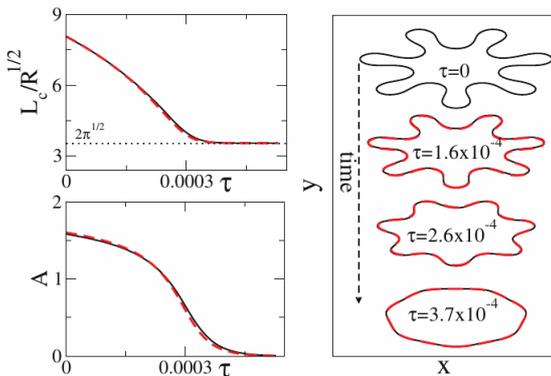


Figura 3: Comparación de los resultados numéricos con las predicciones teóricas. Se observa un muy buen acuerdo entre la teoría y la simulación. Las interfaces evolucionan a una circunferencia ya que se procura minimizar las variaciones en la curvatura.

Mediante simulaciones computacionales utilizando el Modelo de Monte Carlo Cinético para procesos de difusión superficial en nanoestructuras bidimensionales con simetría rotacional discreta se pudo realizar una comparación con los resultados presentados en este trabajo sobre la teoría continua de difusión superficial. Se observó una muy buena concordancia con la teoría continua en donde las interfaces evolucionan de manera tal que las partículas migren a sitios energéticamente favorables.

Hemos realizado una comparación cualitativa y cuantitativa entre ambos modelos. El modelo continuo de difusión superficial, que nos da la evolución de interfaces por procesos de difusión superficial mediante la ecuación de Mullins y el modelo discreto de Monte Carlo Cinético, en

donde las partículas difunden a un lugar vacío dependiendo de una cierta probabilidad. Se han podido determinar similitudes entre ambos pudiendo aplicar los resultados de la teoría continua al sistema discreto, observando un muy buen acuerdo entre ambas teorías.

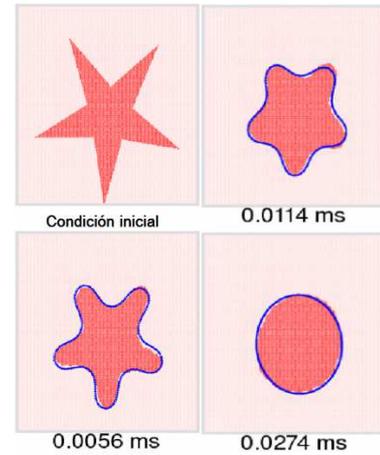


Figura 4: Evolución de una condición inicial del tipo estrella mediante el modelo discreto de Monte Carlo Cinético a una temperatura de 300K comparando dicha evolución con los resultados de la teoría continua (curva azul).

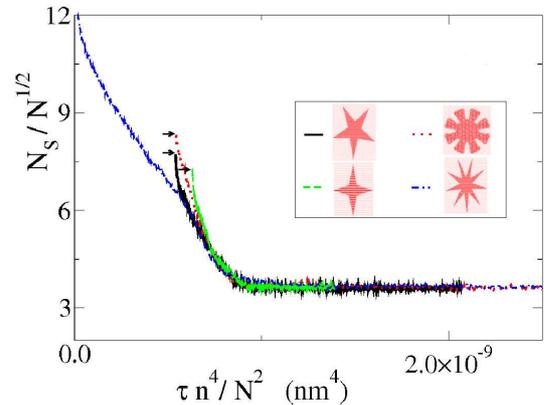


Figura 5: Evolución de diferentes condiciones iniciales a una temperatura de 300K. N es la cantidad total de partículas.

REFERENCIAS

[1] M. Lee, C. Wu. "Thermal Annealing in Hydrogen for 3-D Profile Transformation on Silicon-on-Insulator and Sidewall Roughness Reduction". *J Mem. Journal of Microelectromechanical Systems*. **2006**. Vol. 15, NO. 2. 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.* **2000**. Vol 77, NO. 20. 3290-3292.

[3] Ming-Chang M. Lee and Wei-Chao Chiu and Tse-Ming Yang and Chin-Hung Chen, "Monolithically integrated low-loss silicon photonic wires and three-dimensional tapered couplers fabricated by self-pro le transformation", *Applied Physics Letters*, vol. 91, num. 19, pp. 191114, **2007**.

[4] W. W. Mullins, "Theory of Thermal Grooving", *J. Appl. Phys.*, **1956**. Vol. 28, NO 3. 333-339.

[5] Marcos F. Castez, "n-fold symmetric two-dimensional shapes evolving by surface diffusion", *EPL (Europhysics Letters)*, **2013**, Vol. 104, NO 3. 36003.