На правах рукописи

МЕТЛИЦКАЯ Алена Владимировна

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ НАНОСТРУКТУР ПРИ ИОННОМ РАСПЫЛЕНИИ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

05.13.18 - Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Ярославль – 2014

Работа выполнена на кафедре микроэлектроники федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Ярославский государственный университет им. П.Г.Демидова»

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

Официальные оппоненты:
Юшканов Александр Алексеевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Московского государственного областного университета

Черныш Владимир Савельевич, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник кафедры физической электроники Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова

Ведущая организация:
Обнинский институт атомной энергетики – филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»»

Защита состоится 26 декабря 2014 г. в ___________ на заседании диссертационного совета Д 212.002.05 при федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова» по адресу: г. Ярославль, Советская, 14.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Ярославского государственного университета им. П.Г. Демидова и на официальном сайте организации:
http://www.rd.uniyar.ac.ru/upload/iblock/59f/dissertatsiya-05.13.18_metlitskaya-a.v..pdf

Автореферат разослан «___» _____________ 2014 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 212.002.05 доктор физико-математических наук Глызин С.Д.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

Начиная с 2012 г. корпорация Intel Corporation - ведущий мировой производитель электронных компонент перешла на проектные нормы 22 нм. До этого времени массовое производство ультрабольших интегральных схем (УБИС) по топологическим нормам 32 нм обеспечивала коротковолновая UV-литография (UV - ultraviolet). Причем, для достижения разрешения в 45 нм и менее, потребовалось существенное усложнение литографического процесса. С переходом на EUV-литографию (EUV - xtreme ultraviolet) современное промышленное литографическое оборудование стало самой дорогостоящей частью (порядка 100 млн. долл.) комплекса технологического оборудования для производства УБИС.

Альтернативным вариантом технологий формирования суб-100 нм структур является электронно-лучевая (ЭЛ) литографии [1], использующаяся в производстве шаблонов для оптической литографии, а также технология наноимпринта (нанопечатная литография) [2]. Физические принципы электронно-лучевой литографии заключаются в модификации свойств пленки электронно-чувствительного резиста сфокусированным электронным пучком и последующем химическом проявлении (удалении) экспонированного участка резиста.

В последнее время исследования в области электронно-литографических методов интенсифицировались, в том числе и в связи с относительно медленным решением проблем в EUV-литографии. В лабораторных условиях при формировании отдельных нанообъектов было достигнуто разрешение электронно-литографических методов вплоть до 5 нм [3]. Параллельно с упомянутыми выше работами велись исследования по расширению возможностей ЭЛ-литографии для использования, если не в массовом, то в мелкосерийном производстве изделий наноэлектроники. Успехи здесь были достигнуты рядом компаний-разработчиков, предложивших и создавших метод многолучевой ЭЛ-литографии [4,5], что на порядок и более повысило производительность таких машин, по сравнению с литографами с единственным пучком.

Однако проблемы связанные с использованием ЭЛ-литографии для формирования суб-100 нм элементов нельзя считать всецело решенными. Основным недостатком ЭЛ-литографии является ее низкая производительность, и, как следствие, низкая эффективность методов ЭЛ-литографии для крупносерийного промышленного производства. Таким образом, разработка альтернативной существующим технологиям микро- и наноэлектроники, и в то же время, легко в них интегрируемой технологии формирования на поверхности полупроводника рисунка нанометрового масштаба является актуальной задачей.

Альтернативой UV- и EUV-литографии может служить технология самоорганизации наноструктур [6,7], позволяющая формировать упорядоченные и хаотические наноструктуры непосредственно на поверхности кремниевой пластины, либо создавать наномаски для последующего легирования, как, например, в работе [6]. Данная технология является безмасочной и безрезистной разновидностью литографии. В основе альтернативной технологии лежит явление самоорганизации наноструктур при распылении поверхности ионной бомбардировкой, в частности волнообразного нанорельефа (ВНР).

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

В виду большого числа параметров, определяющих процесс формирования наноструктур при ионном распылении поверхности, их экспериментальный подбор для получения нанорельефа, а тем более нанорельефа требуемого типа является трудоемкой задачей, требующей длительных усилий большого коллектива исследователей. В то же время ряд математический моделей, адекватно описывающих процессы развития мезоскопической топографии (уравнение Вандервоста-Элст [8]) и формирования рельефа микроскопического (уравнение Бредли-Харпера [9]) и нанометрового масштаба (нелокальное уравнение эрозии [10]) при распылении, позволяет решить эту задачу без дорогостоящего эксперимента.

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

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

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

Степень разработанности темы исследования

В настоящее время процесс самоорганизации наноструктур при эрозии поверхности полупроводников ионной бомбардировкой недостаточно изучен. Практическим применением явления самоорганизации наноструктур занимается сравнительно узкий круг исследователей, из которых практических значимых результатов добилась группа В.К. Смирнова [6]. Группой разработаны экспериментальные основы технологии формирования описанных выше наноструктур.

В научной литературе развитие поверхностной топографии при ионном распылении, в частности образование волнообразного нанорельефа, описывается с использованием двух подходов. Первый – стохастический подход -

предполагает включение случайных флуктуаций в среднюю плотность потока ионов. Второй подход основан на изучении соответствующих эволюционных краевых задач, например, для нелокального уравнения эрозии или уравнения, которое было предложено в работе М. Бредли и Дж. Харпера. Следует отметить, что в рамках стохастического подхода обычно рассматриваются те же самые уравнения, но в их коэффициенты включаются «случайные» функции. В настоящей работе избран детерминистический подход к задаче и показано, что он вполне удовлетворительно объясняет феномен образования нанорельефа. Более того, он позволяет получить асимптотические формулы, описывающие такой рельеф, провести сравнение теоретических результатов с экспериментальными данными. При стохастическом подходе такое сравнение весьма затруднительно.

Особенностью одной из используемых в работе моделей является учет пространственной нелокальности процесса распыления. Нелокальность, как характерная особенность распыления, впервые была теоретически обоснована Петером Зигмундом в работе [11]. Под нелокальностью в данном случае понимается пространственная удаленность точки выхода вторичного иона b от точки внедрения первичного иона i. Таким образом, коэффициент распыления зависит от высоты нанорельефа в точке внедрения первичного иона и в точке вылета вторичного атома. Параметр нелокальности (отрезок ib) зависит от угла бомбардировки, что в свою очередь определяет угловую зависимость коэффициента распыления.

Вторая модель, используемая в настоящей работе, основана на уравнении, предложенном М. Бредли и Дж. Харпером, которые показали, что коэффициент распыления зависит не только от угла бомбардировки, но и от радиуса кривизны распыляемой поверхности [9]. Ими рассматривался случай, когда средняя длина пробега первичного иона a (глубина центра энерговыделения при нормальной бомбардировке) была много меньше радиуса кривизны $a \ll R$. В работе [9] было получено уравнение эрозии поверхности ионной бомбардировкой, учитывающее радиус кривизны поверхности.

Уравнение Бредли-Харпера предназначалось, в первую очередь, для объяснения развития ВНР, который, согласно существовавшей на тот момент модели эрозии в виде уравнения Вандервоста-Элст, вообще не должен был бы развиваться. В работе [9] рассматривалась трехмерная модель эрозии, которая позволяла объяснить образование, как перпендикулярных направлению бомбардировки, так и параллельных ему волн, наблюдаемых при угле бомбардировки $\Theta_0 \geq 70^\circ$. Поскольку практически важным является процесс образование ВНР при $\Theta_0 \in [40^\circ, 65^\circ]$, достаточно исследовать двумерный случай, в котором уравнение Бредли-Харпера имеет вид

$$\frac{\partial z}{\partial t} = -v_0(\Theta_0) + v_0'(\Theta_0)\frac{\partial z}{\partial x} + \frac{Ja}{\rho}Y(\Theta_0)\Gamma(\Theta_0)\frac{\partial^2 z}{\partial x^2}, \tag{1}$$

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

Это уравнение интересно тем, что параметр $\Gamma(\Theta_0)$ - величина положительная только при скользящих углах бомбардировки [9]. Для параболических уравнений с отрицательным коэффициентом диффузии (коэффициентом при производной второго порядка) существует так называемый пример Жака Адамара, показывающий, что в этом случае нет непрерывной зависимости решения от начальных условий, т.е. не выполняется один из трех критериев корректности. Таким образом, задача Коши для уравнения (1) относится к числу некорректно поставленных задач. Для исправления ситуации в уравнение (1) в работе [9] вводится производная четвертого порядка с отрицательным коэффициентом, учитывающая «поверхностную диффузию» атомов мишени.

Учет влияния кривизны поверхности позволил найти качественное объяснение развития волнообразного рельефа. Так в работе [9] было показано, что уравнению (1) удовлетворяют экспоненциально растущие волнообразные возмущения вида $z(x,t) = A_0 \exp(\lambda t)\exp[i(\omega t - kx)]$ и утверждалось, что экспериментально наблюдаемым волнам соответствуют решения с максимальным значением инкремента λ. Заметим, что известные краевые задачи для уравнения (1) корректны только благодаря учету производной четвертого порядка, которая согласно Дж. Картеру [12] дает крайне незначительный вклад в скорость изменения рельефа поверхности, но зато с математической точки зрения задача Коши становится корректной. Следует отметить, что анализ в работе [9] проведен в рамках линейного приближения, что не позволяет в принципе оценить амплитуду сформированного рельефа.

Поскольку процесс распыления, как следует из приведенных выше рассуждений, является нелокальным, для адекватного описания эрозии поверхности необходимо учитывать нелокальность процесса распыления. Нелокальное уравнение эрозии было предложено в работах [13, 10]. В работе [13] на физическом уровне строгости было показано существование решений в виде бегущих волн и определена область существования ВНР.

Цели и задачи исследования

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

Поставленная цель достигается путем решения следующих задач:

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

Научная новизна

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

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

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

Таким образом, результаты диссертационной работы являются новыми.

Теоретическая и практическая значимость работы

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

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

Одним из перспективных направлений использования технологии наноструктурирования поверхности ионным распылением является повышение шероховатости поверхности имплантов для увеличения скорости пролиферации клеток и приживляемости.

Методология и методы исследования

С точки зрения логической структуры деятельности, методология исследования основана на систематизации имеющихся данных по моделированию распыления твердых тел ионной бомбардировкой, проверке и анализе полученных результатов и определении спектра краевых задач, необходимых для понимания процессов формирования нанорельефа при ионном распылении поверхности. В работе исследованы краевые задачи, моделирующие процессы ионного распыления поверхности на основе двух уравнений эрозии поверхности ионной бомбардировкой: уравнения Бредли и Харпера и нелокального уравнения эрозии.

Новым, с точки зрения подхода к теории распыления, является учет эффекта нелокальности процесса распыления, играющего существенную роль при формировании рельефа нанометрового масштаба. Как уже отмечалось, модель

Бредли-Харпера является локальной, т.е. координаты точек падения первичного иона и выхода вторичного иона в ней совпадают, тогда как процесс распыления нелокален, что впервые было теоретически обосновано Петером Зигмундом. Для решения ряда краевых задач, там, где необходим учет эффекта нелокальности распыления, будет использована нелокальная модель эрозии, основанная на последовательном применении теории распыления П. Зигмунда.

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

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

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

Положения, выносимые на защиту

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

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

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

Для соответствующих решений краевой задачи приведены асимптотические формулы.

Приведены условия устойчивости соответствующих решений.

Степень достоверности и апробация результатов

Все полученные результаты строго обоснованы и сформулированы утверждения в виде лемм и теорем, для которых приведены математические доказательства. Методики, примененные в данной работе, аргументированы и основаны на известных результатах качественной теории дифференциальных уравнений.

В работе использованы современные методы анализа динамических систем:

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

что позволило получить выносимые на защиту результаты. Результаты работы апробированы на научном семинаре «Нелинейной динамики и синергетики» ЯрГУ, представлены на расширенном заседании кафедры микроэлектроники ЯрГУ и на международных научных конференциях:

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

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

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

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

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

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

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

Публикации

По теме диссертации опубликовано 9 работ, из них 4 – статьи в рецензируемых журналах, входящих в список изданий, рекомендованных ВАК при Министерстве образования и науки Российской Федерации. Список работ приведен в конце автореферата.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы и содержит 104 страницы, 18 рисунков, 1 таблицы, 116 формул. Список использованных источников включает 42 наименования.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цель и основные задачи работы, основные положения, выносимые на защиту, научная новизна и научно-практическая значимость результатов работы.

Первая глава посвящена обзору главных направлений исследований в области ионно-пучковых методов самоорганизации наноструктур на поверхности полупроводников. В разделе 1.1 рассмотрены основные этапы развития теории распыления поверхности ионной бомбардировкой, история которой насчитывает более 160 лет. Рассмотрены три основные модели эрозии поверхности ионной бомбардировкой. Первая модель представляет собой уравнение баланса распыляемого вещества, в которой скорость понижения поверхности образца $\partial z/\partial t$ выражается через объем, распыляемый в единицу времени $JY(\Theta-\Theta_0)/\rho$ с единицы поверхности

$$\frac{\partial z}{\partial t}=-\frac{JY(\Theta-\Theta_0)(\cos\Theta_0+\sin\Theta_0\ tg\Theta)}{\rho}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial z}{\partial x}=tg\Theta,$$

где J - плотность потока первичных ионов, $Y(\Theta-\Theta_0)$ - коэффициент распыления при бомбардировке элемента поверхности под углом $\Theta-\Theta_0$, Θ - угол между локальной нормалью к поверхности и осью z, Θ_0 - угол между направлением бомбардировки и осью z, ρ – плотность атомов в мишени. Эта система уравнений может быть сведена к квазилинейному уравнению первого порядка

$$\frac{\partial\Theta}{\partial t}=-\frac{J}{\rho}cos^2\Theta\frac{\partial}{\partial\Theta}[Y(\Theta_0-\Theta)cos(\Theta_0-\Theta)]\frac{\partial\Theta}{\partial x}, \tag{3}$$

Получившего название уравнения Вандервоста-Элст.

Решение уравнение (3) полностью определяется видом начальных условий. В смысле приложения к рассматриваемой физической задаче последнее утверждение означает, что рельеф поверхности определяется ее начальным профилем, что противоречит экспериментальным результатам, где неоднократно наблюдалось формирование волнового нанорельефа на исходной гладкой поверхности. Тем не менее, уравнение Вандервоста-Элст адекватно описывает процесс развития всех поверхностных неоднородностей микроскопического масштаба. В этих случаях [14] задача Коши, как это и принято, интегрируется методом характеристик.

В разделе 1.2. рассмотрены модели, учитывающие стохастические и релаксационные эффекты высшего порядка. Учет механизмов формирования нанорельефа, связанных с диффузией атомов по поверхности и со случайным характером падения первичных и выбивания вторичных ионов приводит к уравнению вида

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

Уравнение (4) не может быть решено аналитическими методами и пока что численные методы также не применялись для решения уравнения в общем виде. Тем не менее, эти методы использовались для анализа и решения упрощенного варианта уравнения, являющегося его аппроксимацией для некоторых частных случаев

$$\begin{aligned}\frac{\partial h}{\partial t} &= -g - \beta_x \left|\frac{\partial h}{\partial x}\right| + \beta_y \left|\frac{\partial h}{\partial y}\right| + \delta_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \delta_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + \\ &+ k_x \frac{\partial^4 h}{\partial x^4} + k_y \frac{\partial^4 h}{\partial y^4} + \frac{\nabla j_x}{N},\end{aligned} \tag{5}$$

где g – правая часть первого из уравнений системы (2), а коэффициенты β, δ и k вычисляются методами, описанными в обзоре Дж. Картера [12].

М. Бредли и Дж. Харпер (1988) [9] рассмотрели случай однородного ионного потока, падающего параллельно xOz плоскостям под углом Θ к оси Oz на поверхность, лежащую в плоскости Oy, полагая, что имеют место только распыление, зависящее от кривизны поверхности, и изотропная тепловая поверхностная диффузия. При этих обстоятельствах, уравнение (5) упрощается до линейного уравнения вида

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{JY(\Theta)}{N} + \frac{J}{N}\frac{\partial[Y(\Theta)\cos\Theta]}{\partial\Theta}\frac{\partial h}{\partial x} + \delta_x\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \delta_y\frac{\partial^2 h}{\partial y^2} - -k\left(\frac{\partial^4 h}{\partial x^4} + \frac{\partial^4 h}{\partial y^4}\right), \qquad (6)$$

где $k = D_S\gamma\nu / n^2 k_\beta T > 0$, D_s – поверхностная диффузия, γ – поверхностная свободная энергия, приходящая на единицу площади, ν – поверхностное натяжение [9].

На основании литературного обзора в заключительной части главы сделан вывод, что в задачах эрозии поверхности, исходя из общих соображений, более естественно использовать нелинейные уравнения, в частности нелинейный вариант уравнения Бредли-Харпера, т.к. линейные уравнения не позволяют вычислить амплитуду рельефа. Поскольку в настоящее время уравнение Бредли-Харпера является общепризнанным, в диссертационной работе был выполнен поиск состояний равновесия нелинейного уравнения для частного случая цилиндрического рельефа поверхности $z = z(x,t)$ и исследована их устойчивость.

Во **второй главе** диссертации в разделе 2.1 приведен подробный вывод уравнения эрозии, учитывающего нелокальность процесса распыления. В рамках предлагаемого подхода рельеф распыляемой поверхности рассматривается как суперпозиция «гладкого» рельефа $\bar{z}(x,t)$ с характерным размером неоднородностей более 1 мкм и нанорельефа $\tilde{z}(x,t)$. При этом коэффициент распыления полагается зависящим не только от угла $\Theta - \Theta_0$, но и от высоты нанорельефа в точке падения первичного иона $\tilde{z}_1$ и в точке эмиссии вторичного иона $\tilde{z}_2$

$$Y[\Theta_0-\bar{\Theta},\tilde{z}_1,\tilde{z}_2,]\approx Y(\Theta_0-\bar{\Theta})-\kappa\tilde{z}_1+\kappa\tilde{z}_2. \tag{7}$$

Подстановка (7) в уравнение баланса (2) и учет изменения плотности центров энерговыделения под распыляемым элементом поверхности, обусловленного наклоном поверхности в точке внедрения первичного иона, приводит к уравнению

$$\begin{gathered}\frac{\partial z}{\partial t}=-\frac{J_0}{\rho\cos\bar{\Theta}}[Y(\Theta_0-\bar{\Theta})-\kappa(\tilde{z}_1-\tilde{z}_2)]\times\\ \times\left[\cos(\Theta_0-\bar{\Theta})+\sin(\Theta_0-\bar{\Theta})\frac{\cos^2\bar{\Theta}\,\tilde{z}_2'}{1+\tilde{z}_2'\sin\bar{\Theta}\cos\bar{\Theta}}\right].\end{gathered} \tag{8}$$

С учетом $z=\bar{z}+\tilde{z}$ уравнение (8) распадается на два уравнения

$$\frac{\partial\bar{z}}{\partial t}=-\frac{J_0}{\rho}Y(\Theta_0-\bar{\Theta})\frac{\cos(\Theta_0-\bar{\Theta})}{\cos\bar{\Theta}}, \tag{9}$$

$$\begin{gathered}\frac{\partial\tilde{z}}{\partial t}=\frac{J_0Y}{\rho}[\beta-\alpha/\cos(\Theta_0-\bar{\Theta})]\left\{\frac{\tilde{z}_1-\tilde{z}_2}{l}-\frac{\sin(\Theta_0-\bar{\Theta})\cos\bar{\Theta}}{\beta-\alpha/\cos(\Theta_0-\bar{\Theta})}\times\right.\\ \left.\times\left[1-\frac{\beta-\alpha/\cos(\Theta_0-\bar{\Theta})}{\cos(\Theta_0-\bar{\Theta})}\cos\bar{\Theta}\frac{\tilde{z}_1-\tilde{z}_2}{l}\right]\frac{\tilde{z}_2'}{1+\tilde{z}_2'\sin\bar{\Theta}\cos\bar{\Theta}}\right\}.\end{gathered} \tag{10}$$

Из них первое совпадает с уравнением (2), а второе, получившее название нелокального уравнения эрозии, описывает эволюцию нанорельефа.

В разделе 2.2 для регуляризации уравнения (10) в него введен диффузионный член $D\tilde{z}''$, учитывающий релаксационные эффекты за счет поверхностной диффузии атомов в области линейных каскадов, и выполнено обезразмеривание переменных. Если выбрать нормировку $J_0\Pi Y(\Theta_0-\bar{\Theta})/l\rho c=1$, то в безразмерных переменных $\tau=t/\Pi$; $\xi=x/l_x$; $\varsigma=\tilde{z}/l$, с использованием обозначения $c=1/[\beta-\alpha/\cos(\Theta_0-\bar{\Theta})]$ уравнение (10) принимает вид

$$\begin{gathered}\frac{\partial\varsigma_1}{\partial\tau}=\varepsilon\varsigma_1''+\varsigma_1-\varsigma_2-\frac{1}{\beta-\alpha/\cos(\Theta_0-\bar{\Theta})}\times\\ \times\left[1-\frac{\beta-\alpha/\cos(\Theta_0-\bar{\Theta})}{\cos(\Theta_0-\bar{\Theta})}\cos\bar{\Theta}(\varsigma_1-\varsigma_2)\right]\frac{\varsigma_2'}{1+\dfrac{\sin\bar{\Theta}}{\sin(\Theta_0-\bar{\Theta})}\varsigma_2'}.\end{gathered} \tag{11}$$

Далее рассматривался случай так называемого малоуглового макроскопического рельефа $\bar{z}(x,t)$, для которого $\bar{\Theta}\simeq 0$ уравнение (11) преобразуется к более простому виду

$$\frac{\partial \varsigma_1}{\partial \tau} = \varepsilon \varsigma_1'' + \varsigma_1 - \varsigma_2 - c\left[1 - \frac{\beta - \alpha / \cos\Theta_0}{\cos\Theta_0}(\varsigma_1 - \varsigma_2)\right]\varsigma_2'. \tag{12}$$

В разделе 2.3 исследуются состояния равновесия уравнения (12), имеющие форму так называемых «террас» и плоскостей. Террасы являются самым устойчивым видом рельефа, формирующимся на конечной стадии процесса распыления, поэтому существование таких решений служит подтверждением адекватности математической модели. Следует отметить, что террасы являются нерегулярными структурами микроскопического масштаба, поэтому отвечающие им решения нелокального уравнения эрозии $\tilde{z}(x,t)$ ищутся в виде линейных функций

$$\varsigma = a\xi + b(\tau). \tag{13}$$

Поскольку формулировка граничных условий в виду нерегулярности «террас» не представляется возможной, постоянная a определяется исходя из требования минимальной скорости распыления поверхности, эквивалентного принципу минимального производства энтропии. В работе показано, что требованию минимальной скорости распыления отвечают решения, имеющие в исходных переменных вид

$$z = \left(\frac{1}{\beta - \alpha / \cos\Theta_0} - 1\right)\mathrm{ctg}\Theta_0 \; x + x_0. \tag{14}$$

В заключительной части раздела 2.3 выполнен анализ устойчивости террас и плоскостей. С этой целью рассмотрены малые возмущения $V(\xi,\tau)$ на состоянии равновесия $\bar{\varsigma}(\xi) = a\xi + \xi_0$, для которых краевая задача с периодическими граничными условиями имеет вид

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

$$V(\xi + 2, \tau) \equiv V(\xi, \tau), \tag{15}$$

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

где $V_1 = V(\xi,\tau)$, $V_2(\xi,\tau) = V(\xi-1,\tau)$. Далее рассматриваются два возможных случая: $a = (c-1)\cos\Theta_0$ и $a = 0$, для которых краевая задача (15) после линеаризации в нулевом решении принимает вид

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

$$V(\xi+2,\tau) \equiv V(\xi,\tau), \tag{16}$$

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

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

В работе показано, что при $\varepsilon > \varepsilon_{c1} = 2a_2 / \pi^2$ нулевое решение задачи (16) а, следовательно, и задачи (15) асимптотически устойчиво. Последнее означает, что в случае, когда исходная поверхность плоская, т.е. $a_2 = 1$, нулевое решение теряет устойчивость при $\varepsilon < \varepsilon_{c1} = 2/\pi^2 \equiv 0,20264$. Если же исходный рельеф имеет вид террас, т.е. $a_2 = c$, то нулевое решение остается устойчиво при условии $\varepsilon > \varepsilon_{c2} = 2c/\pi^2$, где величина параметра c, согласно соотношению $c = 1/(\beta - \alpha/\cos\Theta_0)$ определяется углом бомбардировки Θ_0.

В разделе 2.4 исследованы волновые решения линеаризованного уравнения (12) с периодическими граничными условиями

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \varsigma_1}{\partial \tau} = \varepsilon\varsigma_1'' - c\varsigma_2' + \varsigma_1 - \varsigma_2, \\ &\varsigma_1(\tau,\xi) = \varsigma_1(\tau,\xi+L), \quad \varsigma_1(0,\xi) = f(\xi). \end{aligned} \tag{17}$$

Подстановка решений, которые ищутся в виде $\varsigma(\xi,\tau) = e^{\mu\tau}V(\xi)$ в уравнение (17) приводит к задаче на собственные значения и собственные функции оператора

$$\begin{aligned} &\varepsilon V''(\xi) - cV'(\xi-1) + V(\xi) - V(\xi-1) = \mu V(\xi), \\ &V(\xi) = V(\xi+L), \quad V(\xi) = f(\xi). \end{aligned} \tag{18}$$

Собственные значения оператора (18) имеют вид

$$\mu_n = 1 - \varepsilon\kappa_n^2 - (1 + ic\kappa_n)(\cos\kappa_n - i\sin\kappa_n), \text{ где } \kappa_n = 2\pi n / L. \tag{19}$$

Численный анализ динамики вещественной части выражения (19) в диапазоне углов бомбардировки $\Theta_0 \in [25^\circ, 65^\circ]$ показал, что при физически обоснованных значения коэффициента поверхностной самодиффузии кремния $D = 0{,}5645 \cdot 10^{-16} \div 25{,}95 \cdot 10^{-16}\ м^2/с$ вещественная часть точек спектра собственных значений оператора (19) переходит в правую полуплоскость. Существенно, что в правую полуплоскость переходят точки спектра с номерами от 70-и до 49-и, т.е. имеет место бифуркация коротковолновых мод, а длина волны не зависит от периода L.

В **третьей главе** рассмотрена модель эрозии поверхности ионной бомбардировкой, которую в теории распыления принято называть моделью Бредли-Харпера, но более известная как уравнение Курамото-Сивашинского. Уравнение Бредли-Харпера рассматривается применительно к распылению поверхности, рельеф которой имеет цилиндрическую форму, т.е. зависит от t, x, но не зависит от переменной y. Данное предположение оправдано тем, что именно такой рельеф формируется в большинстве случаев и представляет интерес с точки зрения его практического использования.

В разделе 3.1. приведена постановка краевой задачи для уравнения Бредли-Харпера, записанного в перенормированном виде

$$\begin{gathered}\frac{\partial h}{\partial t} = -\alpha + a\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right) + a_1\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2 + a_2\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^3 - \\ -b\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + b_1\frac{\partial h}{\partial x}\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + b_2\left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)^2\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} - d\frac{\partial^4 h}{\partial x^4},\end{gathered} \tag{20}$$

где функция $z = h(t, x)$ задает форму поверхности мишени в момент времени t и в точке с координатой x. Коэффициенты a, a_1, a_2, b, b_1, b_2 в правой части уравнения зависят от параметров процесса распыления, $\alpha > 0$ называют скоростью понижения поверхности, а $d > 0$ - коэффициентом «диффузии». Все коэффициенты уравнения (20) константы.

Уравнение (20) имеет решение

$$h(t, x) = h_0 - \alpha t \quad (h_0 \in R), \tag{21}$$

которое задает так называемый «плоский» профиль для поверхности, подвергнутой бомбардировке. Постоянная h_0 произвольна и зависит от выбора системы координат. Если положить

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

где $u(t,x)$ - нормированное отклонение от плоского профиля, то для новой неизвестной функции уравнение Бредли-Харпера примет вид

$$\begin{gathered}\frac{\partial u}{\partial t} = a\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) + a_1\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + a_2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^3 - \\ -b\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b_1\frac{\partial u}{\partial x}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b_2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - d\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}.\end{gathered} \tag{22}$$

Далее уравнение (22) рассматривается в совокупности с периодическими краевыми и начальными условиями

$$u(t, x + 2\pi) = u(t,x), \tag{23}$$

$$u(0,x) = f(x),$$

где $f(x)$ задает некий профиль поверхности до начала ее обработки, а функция $f(x) \in H_2^4$ принадлежит пространству Соболева.

Состоянием равновесия краевой задачи (22), (23) является так называемый плоский профиль, описываемый равенством $(C = const)$, причем этом постоянная С может быть выбрана равной нулю $(C = 0)$. Тем самым вопрос об устойчивости плоского профиля сводится к вопросу об устойчивости нулевого решения нелинейной краевой задачи (22), (23).

Решения линеаризованной в нуле краевой задачи (22), (23)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a\frac{\partial u}{\partial x} - b\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - d\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}, \tag{24}$$

$$u(t, x + 2\pi) = u(t,x) \tag{25}$$

ищутся в форме Эйлера

$$u(t,x) = \exp(\lambda t)v(x). \tag{26}$$

Дальнейший анализ приводит к задаче на собственные значения оператора $A(b)v = -dv_{xxxx} - bv_{xx} + av_x$,

$$A(b)v = \lambda v, \quad v(x+2\pi) = v(x), \tag{27}$$

для которых получены следующие выражения

$$\lambda_n(b) = \tau_n + i\sigma_n, \quad \tau_n = -dn^4 + bn^2, \quad \sigma_n = an. \tag{28}$$

Детальный анализ выражений (28) дает следующий результат:

- плоский профиль устойчив при $b - d < 0, \quad (b < d)$;
- плоский профиль теряет устойчивость при $b > d$;
- равенство $b = d$ выделяет критический случай в задаче об устойчивости однородных состояний равновесия нелинейной краевой задачи (22), (23).

Теорема 3.1. *Нулевое решение линейной краевой задачи (24), (25) устойчиво, если* $b \le d$ *и теряет устойчивость при* $b > d$.

Нулевое решение нелинейной краевой задачи (22), (23) устойчиво, если $b < d$ *и неустойчиво, если* $b > d$.

Случай асимптотической устойчивости для обоих вариантов краевой задачи исключен.

В разделе 3.3 выполнен анализ нелинейной краевой задачи (22), (23), в которой полагается, что $b = d(1+\gamma\varepsilon)$, где $\gamma = \pm 1$, а $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$, $0 < \varepsilon_0 << 1$, т.е. ε малый неотрицательный параметр. Нелинейная краевая задача была записана в более подходящей для исследования форме

$$\frac{\partial u}{\partial t} - A(\varepsilon)u = F_2(u) + F_3(u), \tag{29}$$

$$u(t, x+2\pi) = u(t, x). \tag{30}$$

Здесь $A(\varepsilon)$ линейный дифференциальный оператор, определенный равенством $A(\varepsilon)u = a\dfrac{\partial u}{\partial x} - d(1+\gamma\varepsilon)\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} - d\dfrac{\partial^4 u}{\partial x^4}$, а F_2, F_3, соответственно, квадратичная и кубическая нелинейности

$$F_2(u) = a_1\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + b_1\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right), \quad F_3(u) = a_2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^3 + b_2\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right).$$

Решение нелинейной краевой задачи (29), (30) можно и целесообразно искать в следующей форме

$$u(t,x,\varepsilon)=\psi(s)+\varepsilon^{1/2}u_1(t,x,z,\bar{z})+\varepsilon u_2(t,x,z,\bar{z})+\varepsilon^{3/2}u_3(t,x,z,\bar{z})+\ldots, \tag{31}$$

где $\psi(s)$, $z=z(s)$ - компоненты будущей вспомогательной системы дифференциальных уравнений, называемой нормальной формой. При этом $\psi(s)$ - действительная, а $z(s)$ - комплекснозначная функция «медленного» времени $s=\varepsilon t$.

Функция $u_1(t,x,z,\bar{z})$ ищется в виде

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

Функции $u_2(t,x,z,\bar{z}), u_3(t,x,z,\bar{z})$, после подстановки суммы (31) в краевую задачу (29), (30), ищутся как решения двух соответствующих неоднородных краевых задач:

$$\frac{\partial u_2}{\partial t}-A_0u_2=\varphi_2(t,x,z,\bar{z}), \tag{32}$$

$$u_2(t,x+2\pi)=u_2(t,x), \tag{33}$$

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

$$\frac{\partial u_3}{\partial t}-A_0u_3=\varphi_3, \tag{34}$$

$$u_3(t,x+2\pi)=u_3(t,x), \tag{35}$$

где

$$\varphi_3=-\frac{\partial u_1}{\partial s}-d\frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}+2a_1\frac{\partial u_1}{\partial x}\frac{\partial u_2}{\partial x}+a_2\left(\frac{\partial u_1}{\partial x}\right)^3+b_1\left[\frac{\partial u_1}{\partial x}\frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2}+\frac{\partial u_2}{\partial x}\frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}\right]+$$
$$+b_2\left(\frac{\partial u_1}{\partial x}\right)^2\frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}.$$

Условия их разрешимости позволяют выписать нормальную форму:

$$\begin{aligned}\psi'(s)&=2a_1z\bar{z}+\ldots,\\ z'&=\gamma dz-(l_1+il_2)\bar{z}z^2+\ldots\end{aligned} \tag{36}$$

При этом оказалось, что $l_1 = \dfrac{b_1^2 - a_1^2}{6d} - b_2$, $l_2 = 3a_2 - \dfrac{a_1 b_1}{2d}$. Точками обозначены слагаемые, имеющие более высокий порядок малости по сравнению с выписанными. Система (36) может быть дополнена уравнением, комплексно сопряженным второму уравнению нормальной формы (36).

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

$$\begin{aligned} &\psi'(s) = 2a_1 z\bar{z}, \\ &z' = \gamma dz - (l_1 + il_2)\bar{z}z^2, \end{aligned} \tag{37}$$

которая и определяет динамику решений краевой задачи (29), (30).

Полагая в системе дифференциальных уравнений (37) $z(s) = \rho(s)\exp(i\varphi(s))$ и разделяя во втором уравнении действительную и мнимую части

$$\psi' = 2a_1\rho^2, \quad \varphi' = -l_1\rho^2, \quad \rho' = (\gamma d)\rho - l_1\rho^3, \tag{38}$$

можно получить нормальную форму (37) в вещественном виде. При этом определяющую роль при анализе системы (38) играет уравнение для амплитуды $\rho(s)$ $(\rho(s) \geq 0)$.

Лемма 3.1. *Дифференциальное уравнение (38) имеет состояние равновесия* $s_0 : \rho = 0$, *а также ненулевое состояние равновесия* $s_1 : \rho = \rho_0$, *где* $\rho_0 = \sqrt{\gamma d / l_1}$, *которое существует, если* $\gamma d / l_1 > 0$ *или* $\gamma / l_1 > 0$, *так как* $d > 0$ *по условию. Состояние равновесия* s_0 *для уравнения (38) асимптотически устойчиво, если* $\gamma = -1$ $(\gamma < 0)$, *и неустойчиво, если* $\gamma = 1$ $(\gamma > 0)$. *Напротив, состояние равновесия* s_1 *асимптотически устойчиво, если* $l_1 > 0$ $(\gamma > 0)$, *и неустойчиво, если* $l_1 < 0$ $(\gamma < 0)$ *[15].*

Состоянию равновесия s_0 соответствует семейство решений

$$\psi(s) = \psi_0, \quad z(s) \equiv 0, \quad \psi_0 = const, \tag{39}$$

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

Состоянию равновесия s_1 соответствует решение вида

$$\begin{aligned}&\psi(s)=2a_1\rho_0^2 s+\psi_0, \quad \psi_0=const,\\&z(s)=\rho_0\exp(i\sigma s), \quad \sigma=-l_2\rho_0^2.\end{aligned} \tag{40}$$

Каждое из этих решений устойчиво, если состояние равновесия асимптотически (экспоненциально) устойчиво и неустойчиво при неустойчивости s_1.

Теорема 3.2. *Существует такое* $\varepsilon_0>0$, *что при всех* $\varepsilon\in(0,\varepsilon_0)$ *каждому решению (40) нормальной формы* $z=z(s)$, $\psi=\psi(s)$ *соответствует семейство автомодельных решений, для которых справедлива асимптотическая формула*

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

где $\omega(\varepsilon)=a-l_2\rho_0^2\varepsilon$, $\rho_0=\sqrt{\gamma d/l_1}$, $\xi=-(a_1+ib_1)/12d$, $\bar{\xi}=-(a_1-ib_1)/12d$ *были определены при построении и анализе нормальной формы.*

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

Для исходной краевой задачи с учетом $b=d(1+\varepsilon)$ ($l_1>0$ $(\gamma=1)$) имеется семейство решений

$$\begin{aligned}&h(t,x)=h_0-\alpha t+u_*(t,x,\varepsilon)=\\&=h_0-\alpha t+\left(2a_1\rho_0{}^2\varepsilon+o(\varepsilon)\right)t+2\varepsilon^{1/2}\rho_0\cos\left(\omega(\varepsilon)t+x\right)+\\&+2\varepsilon\rho_0{}^2\left\{\xi_1\cos\left(2\omega(\varepsilon)t+2x\right)-\xi_2\sin\left(2\omega(\varepsilon)t+2x\right)\right\}+o(\varepsilon),\end{aligned} \tag{41}$$

где $\xi_1 = \operatorname{Re}\xi$, $\xi_2 = \operatorname{Im}\xi$ или $\xi_1 = -\dfrac{a_1}{12d}$, $\xi_2 = -\dfrac{b_1}{12d}$, h_0 - произвольная действительная постоянная. Все решения семейства (41) устойчивы и поэтому описывают физически реализуемый неоднородный рельеф.

Заключение

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

В результате анализа волновых решений краевых задач установлено, что рассматриваемые уравнения эрозии предсказывают два абсолютно разных сценария формирования наноструктур. Так, нелокальное уравнение эрозии имеет решения в виде высокомодовых (коротких) бегущих волн. Если исходная поверхность представляет собой плоскость, то при периодических граничных условиях с периодом L нелокальное уравнение эрозии дает волновые решения с длиной волны $\lambda_n = L / n$. Здесь n – номер первой бифурцирующей моды, который изменяется с изменением L таким образом, что длина волны остается неизменной. Волновые решения уравнения Бредли-Харпера, напротив, бифурцируют от состояния равновесия в порядке возрастания номера моды, т.е. первой возникает волна длиной L, затем L/2, и т.д. При этом длина волны зависит от L.

Резюмируя результаты анализа моделей эрозии поверхности ионной бомбардировкой, можно утверждать, что:

- Согласно модели Бредли-Харпера одной из причин формирования неоднородного рельефа является смена устойчивости однородных состояний равновесия, т.е. процесс самоорганизации.
- Аналогичный механизм формирования неоднородного рельефа имеет место и для нелокального уравнения эрозии. Отличие состоит в том, что нелокальная модель дает возможность объяснения возникновения коротковолнового рельефа, т.е. позволяет описать более широкий класс экспериментально наблюдаемых структур.
- Подход, основанный на применении качественной теории дифференциальных уравнений (теории бифуркаций), позволяет предложить единый механизм формирования неоднородного нанорельефа.
- С использованием предложенного подхода показано, что нелокальное уравнение эрозии учитывает более тонкие эффекты при описании процесса распыления. В частности, данная модель описывает коротковолновый рельеф поверхности. Нелокальная модель эрозии объясняет возникновение и иного типа неоднородного рельефа, известного под названием «террасы».

Список цитируемой литературы

1. Ed. by Sheath, J.R. Microlithography: Science and Technology / Ed. by Sheath, J.R., Smith, B.W. // Published by Marcell Dekker Inc. - N.-Y. - 1998.

2. Viheriala, J. Narrow linewidth templates for nanoimprint lithography utilizing conformal deposition /J. Viheriala, T. Rytkonen, T. Niemi, M. Pessa // Nanotechnology. - 2008. - V. 19. - P. 015302.

3. Hu, W. Sub-10 nm e-beam lithography using cold development of PMMA /W. Hu, G.H. Bernstein, K. Sarveswaran, M. Lieberman // J. Vac. Sci. Technol. B. - 2004. – V. 22. -№ 4. - P. 1711–1716.

4. Фатьянова, Г.И. Перспективы разработки многолучевых систем для низковольтной электронной литографии /Г.И. Фатьянова, Б.Н. Васильев // Известия РАН, Серия физическая. – 2007. - Т. 71. - № 10. - С. 1502–1506.

5. Sematech Litho Forum: Sematech mulling multi-beam mask writer effort [электронный ресурс]. – 2010. – Режим доступа: http://www.fabtech.org/news/_a/sematech_litho_forum_sematech_mulling_multi-beam_mask_writer_effort/#.
6. Smirnov, V.K. Technology for nanoperiodic doping of a metal–oxide–semiconductor field-effect transistor channel using a self-forming wave-ordered structure /V.K. Smirnov, D.S. Kibalov, O.M. Orlov, V.V. Graboshnikov// Nanotechnology. – 2003. - V. 14. - P. 709 - 715.
7. Кибалов, Д.С. Волнообразные наноструктуры на поверхности кремния, инициируемые ионной бомбардировкой: автореф. дис. д. ф.-м. наук: 05.27.01 / Кибалов Дмитрий Станиславович. – Москва. – 2005. - 42 с.
8. Elst, K. Influence of the composition of the altered layer on the ripple formation /K. Elst and W. Vandervorst // J. Vac. Sci. Technol. A. -1994. - V. 12. – P. 3205.
9. Bradley, R.M. Theory of ripple topography induced by ion bombardment /R.M. Bradley, J.M.F. Harper // J. Vac. Sci. Technol. A. - 1988. - V. 6. № 4. - P. 2390 - 2395.
10. Рудый, А.С. Пространственно нелокальная модель эрозии поверхности ионной бомбардировкой /А.С. Рудый, В.И. Бачурин // Известия РАН, Серия физическая. – 2008. - Т. 72. - № 5. - С. 624 - 629.
11. Sigmund, P. A mechanism of surface micro-roughening by ion bombardment /P. Sigmund // J. Mater. Sci. -1973. - V. 8. - P.1545 - 1553.
12. Carter, G. The physics and applications of ion beam erosion /G. Carter // J. Phys. D.: Appl. Phys. - 2001. - V. 34. - R 1 – R 22.
13. Bachurin, V.I. Nanoscale Model of Surface Erosion by Ion Bombardment /V.I. Bachurin, A.S. Rudy, V.K. Smirnov // Radiation Effects and Defects in Solids. - 2006. - V. 161.- № 6. - P. 319-329.
14. Birkgan, S.E. Modeling of Surface Topography Development During Ion Sputtering of Solids /S.E. Birkgan, V.I. Bachurin, A.S. Rudy, V.K. Smirnov // Radiation Effects and Defects in Solids. -2004. - V. 159. - № 3. - P. 163-172.
15. Куликов, А.Н. О бифуркациях рождения инвариантных торов /А.Н. Куликов // Исследования по устойчивости теории колебаний, 1983. – С. 112-117.

Публикации автора по теме диссертации

Статьи в ведущих журналах, включенных в перечень ВАК:

1. Метлицкая, А.В. О нелокальности механизма распыления поверхности ионной бомбардировкой и ее роли в формировании наноструктур /А.С. Рудый, А.В. Метлицкая // Интеграл. – 2008. - Т. 43, № 5. - С. 10-13.

2. Метлицкая, А.В. Моделирование процессов формирования наноструктур при распылении поверхности ионной бомбардировкой /А.С. Рудый, А.Н. Куликов, А.В. Метлицкая // Микроэлектроника. – 2011. – Т.40, № 2. - С. 109 – 118.

3. Метлицкая, А.В. Механизм формирования волнового нанорельефа при эрозии поверхности ионной бомбардировкой в рамках модели Бредли-Харпера /А.С. Рудый, А.Н. Куликов, А.В. Метлицкая // Микроэлектроника. – 2013. – Т. 42, № 4. - С. 298–305.

4. Метлицкая, А.В. Высокомодовые волновые рельефы в рамках пространственно-нелокальной модели эрозии /А.С. Рудый, А.Н. Куликов, Д.А. Куликов, А.В. Метлицкая // Микроэлектроника. – 2014. - Т. 43, № 4. - С. 282 – 288.

Другие публикации:

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

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

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

8. Метлицкая, А.В. Формирования волнового нанорельефа при эрозии поверхности ионной бомбардировкой /А.В. Метлицкая // Сборник тезисов

международной молодежной научно-практической конференции «ПУТЬ В НАУКУ», Ярославль, 22-26 апреля 2013 г. - С. 57-59.

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