

# Evolución de interfaces con simetría rotacional discreta por procesos de difusión superficial

Becaria: Cecilia Analia Sottile

Director: Federico Castez

Co-Directores: Matías Rafti y Victoria Vampa

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)  
Universidad Nacional de La Plata (UNLP)

21 de Septiembre de 2016



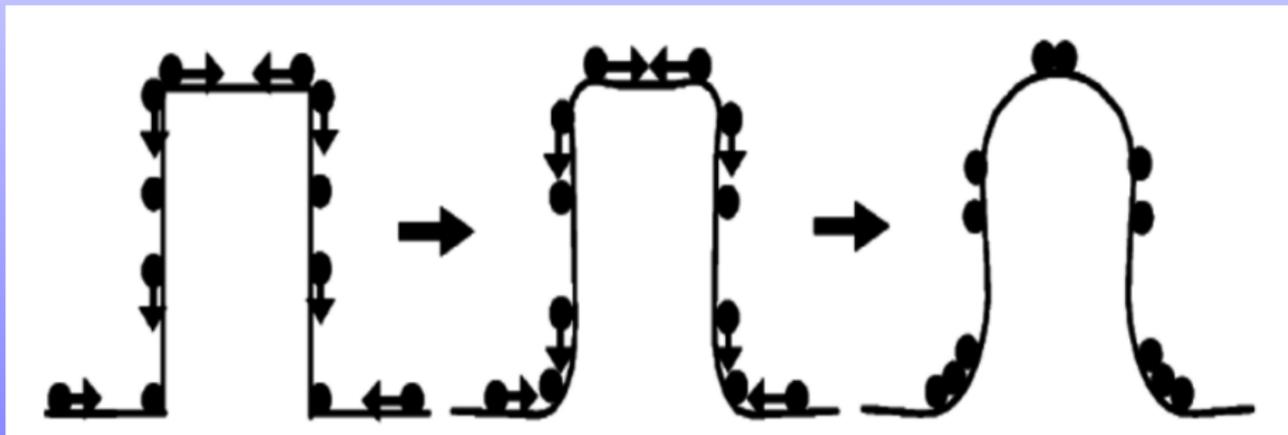
- Aplicaciones de los procesos de difusión superficial.

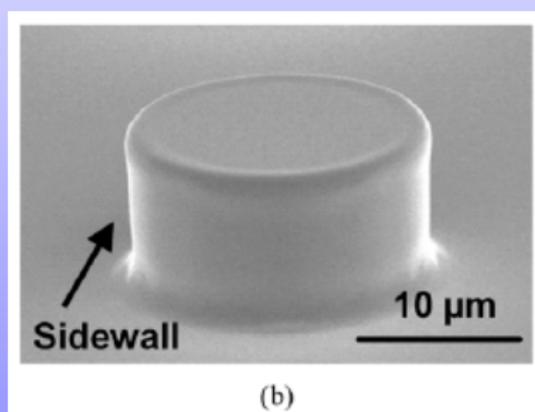
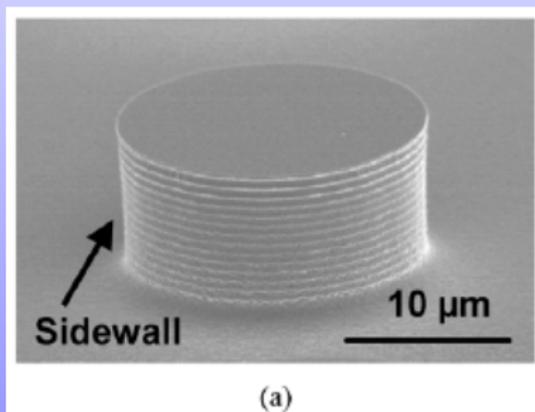
- Aplicaciones de los procesos de difusión superficial.
- Teoría continua de difusión superficial en interfaces cerradas.

- Aplicaciones de los procesos de difusión superficial.
- Teoría continua de difusión superficial en interfaces cerradas.
- Comparación de la teoría continua con un modelo discreto del tipo Monte Carlo Cinético.

- Aplicaciones de los procesos de difusión superficial.
- Teoría continua de difusión superficial en interfaces cerradas.
- Comparación de la teoría continua con un modelo discreto del tipo Monte Carlo Cinético.

## Esquema del proceso de difusión superficial.

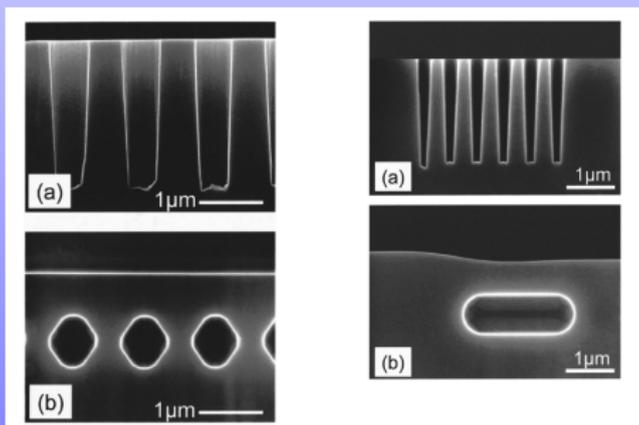
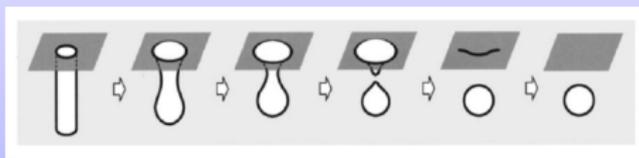




Reducción de la rugosidad de la pared lateral de un cilindro de  $15\ \mu\text{m}$  de altura y  $2,5\ \mu\text{m}$  de diámetro. Tratamiento térmico en atmósfera de hidrógeno a  $1100^\circ\text{C}$  durante 10 min. a 10 Torr. (a) Antes y (b) después del recocido. Técnica de limpieza química (DRIE).

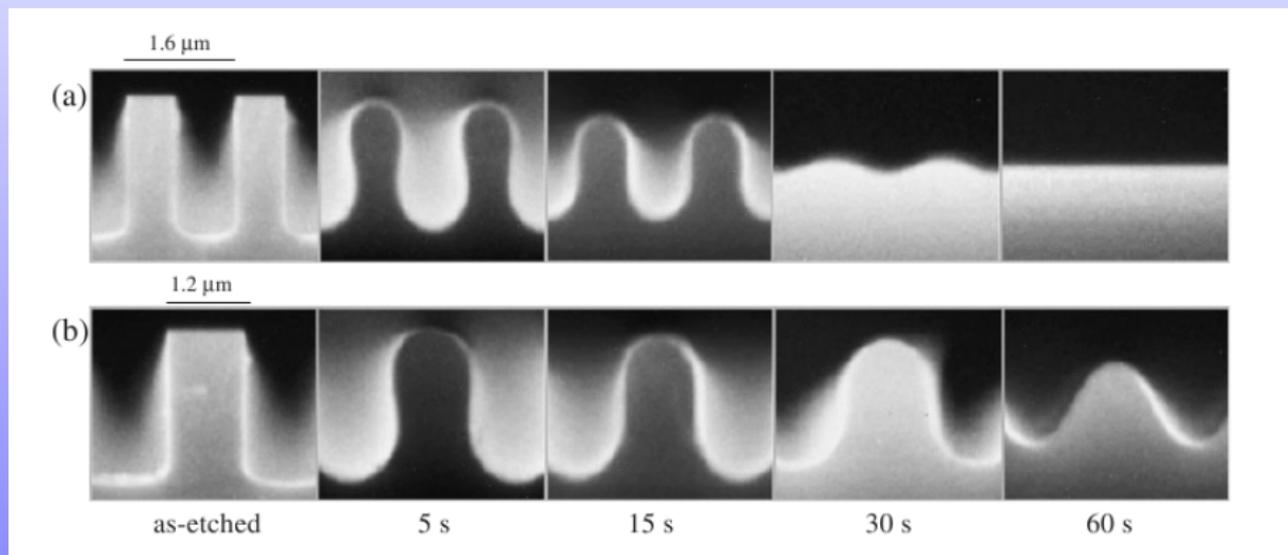
"*Thermal Annealing in Hydrogen for 3-D Profile Transformation on Silicon-on-Insulator and Sidewall Roughness Reduction*". M. Lee and C. Wu. J MemS. Journal of Microelectromechanical Systems. **15** (2). (2006).

# Aplicaciones



Forma inicial rectangular de  $0,25\mu m \times 0,55\mu m$  y profundidad de  $2,3\mu m$ .  
Tratamiento térmico en atmósfera de hidrógeno a  $1100^{\circ}C$  durante 10 min. a 10 Torr.

*"Empty-space-in-silicon technique for fabricating a silicon-on-nothing structure"*. I. Mizushima, T. Sato, S. Taniguchi, and Y. Tsunashima. *Appl. Phys. Lett.* **77** (20). (2000).



Forma inicial rectangular con períodos de  $1,6\mu\text{m}$  y  $2,4\mu\text{m}$  .  
Recocido en ultra-alto-vacío (UHV) a  $1100^\circ\text{C}$  durante 60 seg.

"Evolution of One-Dimensional Gratings with High Aspect Ratios on Si(001) Surfaces by High-Temperature Annealing". J. Nakamura, K. Sudoh, and H. Iwasaki. Jpn. J. Appl. Phys. **46** (11). (2007).

Para modelar la teoría continua de Difusión Superficial para medios isótropos frecuentemente se utiliza la ecuación de Mullins.

Para modelar la teoría continua de Difusión Superficial para medios isótropos frecuentemente se utiliza la ecuación de Mullins.

$$v_n = -K \Delta_S \mathcal{C}$$

Para modelar la teoría continua de Difusión Superficial para medios isótropos frecuentemente se utiliza la ecuación de Mullins.

$$v_n = -K \Delta_S \mathcal{C}$$

Donde  $v_n$  es la velocidad normal a la curva en un punto dado,

Para modelar la teoría continua de Difusión Superficial para medios isótropos frecuentemente se utiliza la ecuación de Mullins.

$$v_n = -K \Delta_S \mathcal{C}$$

Donde  $v_n$  es la velocidad normal a la curva en un punto dado,  $K$  depende del material y la temperatura considerada,

Para modelar la teoría continua de Difusión Superficial para medios isótropos frecuentemente se utiliza la ecuación de Mullins.

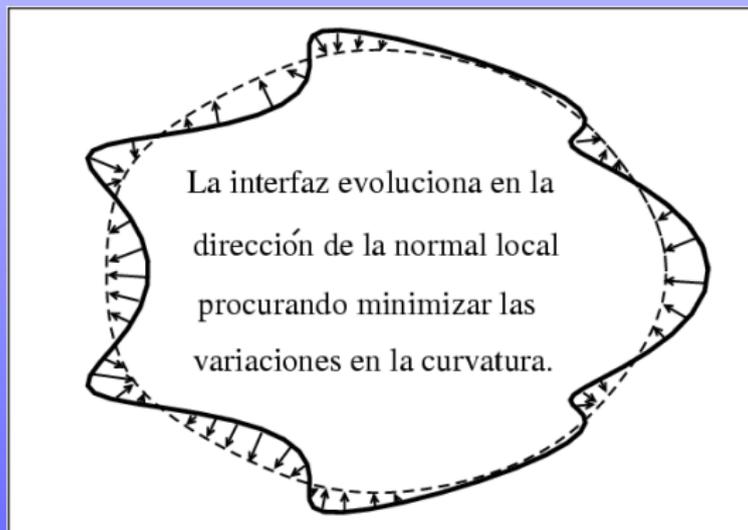
$$v_n = -K \Delta_S \mathcal{C}$$

Donde  $v_n$  es la velocidad normal a la curva en un punto dado,  $K$  depende del material y la temperatura considerada, y  $\Delta_S \mathcal{C}$  es el laplaciano intrínseco de la curvatura con respecto al parámetro longitud de arco.

Para modelar la teoría continua de Difusión Superficial para medios isótropos frecuentemente se utiliza la ecuación de Mullins.

$$v_n = -K \Delta_S \mathcal{C}$$

Donde  $v_n$  es la velocidad normal a la curva en un punto dado,  $K$  depende del material y la temperatura considerada, y  $\Delta_S \mathcal{C}$  es el laplaciano intrínseco de la curvatura con respecto al parámetro longitud de arco.



## Teoría continua de difusión superficial.

Consideremos la curva plana  $L(t)$  cerrada con simetría de orden  $n$  evolucionando por difusión superficial.

## Teoría continua de difusión superficial.

Consideremos la curva plana  $L(t)$  cerrada con simetría de orden  $n$  evolucionando por difusión superficial. Sea  $L_c(t) = n\lambda_s(t)$  la longitud de dicha curva.

## Teoría continua de difusión superficial.

Consideremos la curva plana  $L(t)$  cerrada con simetría de orden  $n$  evolucionando por difusión superficial. Sea  $L_c(t) = n\lambda_s(t)$  la longitud de dicha curva.

A partir de la ecuación de Mullins se puede demostrar la siguiente propiedad general

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

## Teoría continua de difusión superficial.

Consideremos la curva plana  $L(t)$  cerrada con simetría de orden  $n$  evolucionando por difusión superficial. Sea  $L_c(t) = n\lambda_s(t)$  la longitud de dicha curva.

A partir de la ecuación de Mullins se puede demostrar la siguiente propiedad general

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

Observemos que  $\forall t, \frac{dL_c}{dt} < 0$ , con lo cual el flujo de difusión superficial acorta las longitudes de las curvas (áreas en el caso 3D).

## Teoría continua de difusión superficial.

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

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

## Teoría continua de difusión superficial.

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 nos indica que el flujo de difusión superficial mantiene constante el área encerrada (volumen encerrado, en el caso 3D) por la interfaz en el caso 2D.

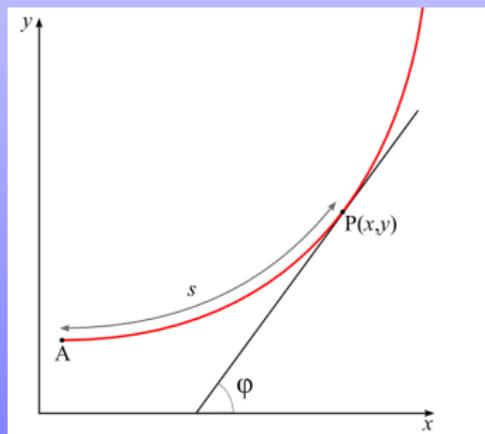
## Ecuación de César y Whewell.

Ecuación de César de una curva plana  $\rightarrow \mathcal{C}(s)$ .

## Ecuación de Césaró y Whewell.

Ecuación de Césaró de una curva plana  $\rightarrow C(s)$ .

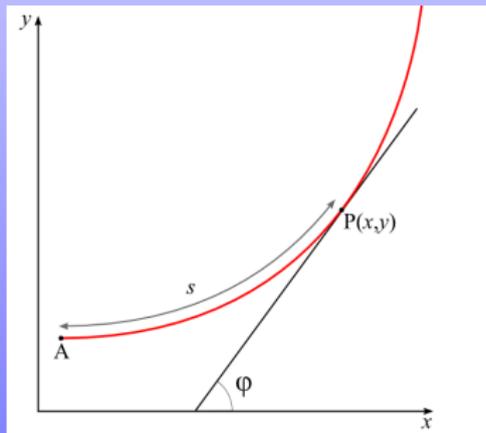
Ecuación de Whewell  $\rightarrow \varphi(s)$ .



## Ecuación de Césaró y Whewell.

Ecuación de Césaró de una curva plana  $\rightarrow C(s)$ .

Ecuación de Whewell  $\rightarrow \varphi(s)$ .



Luego, si  $\varphi(s) = f(s)$  es la ecuación de Whewell, entonces  $C = \frac{df(s)}{ds}$  es la ecuación de Césaró.

## Teoría continua de difusión superficial.

Para lidiar con las curvas multivaluadas que se generan utilizamos la Ecuación de Césaró. Como  $\mathcal{C}$  en un dado  $t$  es periódica de período  $L_c$ , podemos expandirla mediante una serie de Fourier.

## Teoría continua de difusión superficial.

Para lidiar con las curvas multivaluadas que se generan utilizamos la Ecuación de Césaró. Como  $\mathcal{C}$  en un dado  $t$  es periódica de período  $L_c$ , podemos expandirla mediante una serie de Fourier.

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

## Teoría continua de difusión superficial.

Para lidiar con las curvas multivaluadas que se generan utilizamos la Ecuación de Césaró. Como  $\mathcal{C}$  en un dado  $t$  es periódica de período  $L_c$ , podemos expandirla mediante una serie de Fourier.

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

Donde  $c_n$  son los coeficientes de Fourier y  $\delta_n$  es el desplazamiento de fase.

## Teoría continua de difusión superficial.

Para lidiar con las curvas multivaluadas que se generan utilizamos la Ecuación de Césaró. Como  $\mathcal{C}$  en un dado  $t$  es periódica de período  $L_c$ , podemos expandirla mediante una serie de Fourier.

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

Donde  $c_n$  son los coeficientes de Fourier y  $\delta_n$  es el desplazamiento de fase.

Integrando  $\mathcal{C}(s)$ , podemos obtener una descripción alternativa de la curva a través de la ecuación de Whewell.

## Teoría continua de difusión superficial.

Para lidiar con las curvas multivaluadas que se generan utilizamos la Ecuación de Césaró. Como  $\mathcal{C}$  en un dado  $t$  es periódica de período  $L_c$ , podemos expandirla mediante una serie de Fourier.

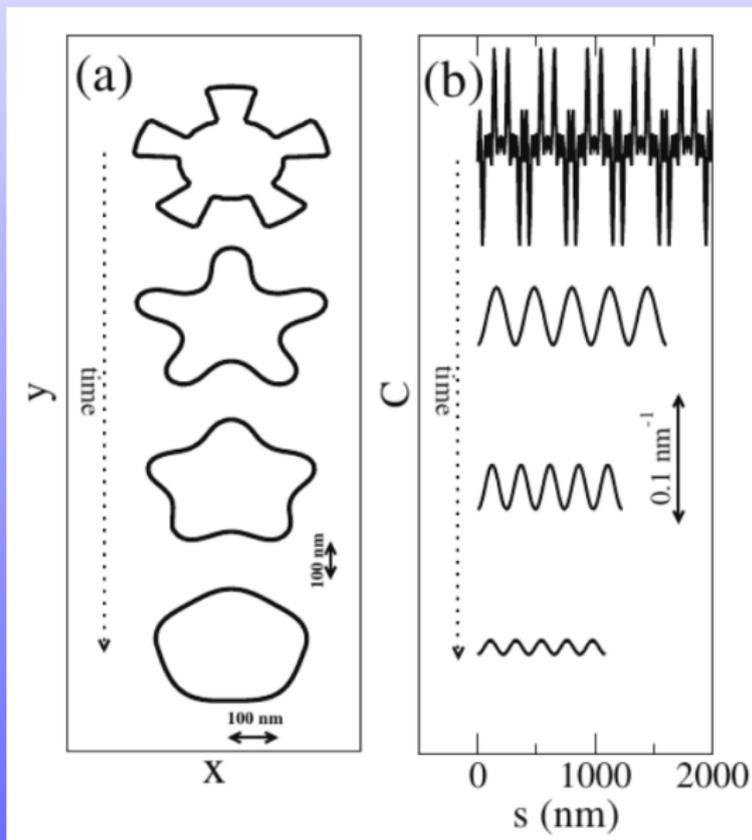
$$\mathcal{C}(s) = c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cos\left(n \frac{2\pi}{L_c} s + \delta_n\right)$$

Donde  $c_n$  son los coeficientes de Fourier y  $\delta_n$  es el desplazamiento de fase.

Integrando  $\mathcal{C}(s)$ , podemos obtener una descripción alternativa de la curva a través de la ecuación de Whewell.

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

# Evolución de una condición inicial tipo engranaje.



## Teoría continua de difusión superficial.

Luego, una vez transcurrido un primer estadio transitorio, la forma de la interfaz puede describirse, con muy buena aproximación, por:

$$\theta(s) = \frac{2\pi}{L_c}s + A\text{Sin}(k_s s)$$

## Teoría continua de difusión superficial.

Luego, una vez transcurrido un primer estadio transitorio, la forma de la interfaz puede describirse, con muy buena aproximación, por:

$$\theta(s) = \frac{2\pi}{L_c}s + A\text{Sin}(k_s s)$$

Las cuales son curvas cerradas y simétricas de orden  $n$ . En donde  $A = \frac{L_c c_n}{2n\pi}$  y

$$k_s = \frac{2n\pi}{L_c} .$$

## Teoría continua de difusión superficial.

Luego, una vez transcurrido un primer estadio transitorio, la forma de la interfaz puede describirse, con muy buena aproximación, por:

$$\theta(s) = \frac{2\pi}{L_c}s + A\text{Sin}(k_s s)$$

Las cuales son curvas cerradas y simétricas de orden  $n$ . En donde  $A = \frac{L_c c_n}{2n\pi}$  y

$$k_s = \frac{2n\pi}{L_c} .$$

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  $\lambda_s(t)$ :

## Teoría continua de difusión superficial.

Luego, una vez transcurrido un primer estadio transitorio, la forma de la interfaz puede describirse, con muy buena aproximación, por:

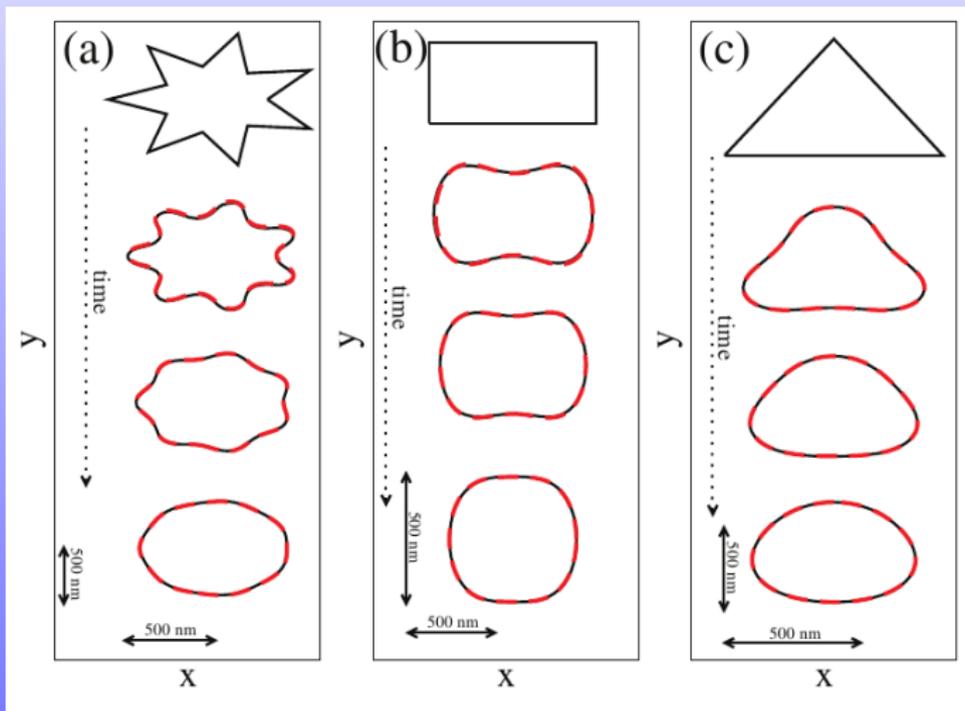
$$\theta(s) = \frac{2\pi}{L_c}s + A\text{Sin}(k_s s)$$

Las cuales son curvas cerradas y simétricas de orden  $n$ . En donde  $A = \frac{L_c c_n}{2n\pi}$  y  $k_s = \frac{2n\pi}{L_c}$ .

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  $\lambda_s(t)$ :

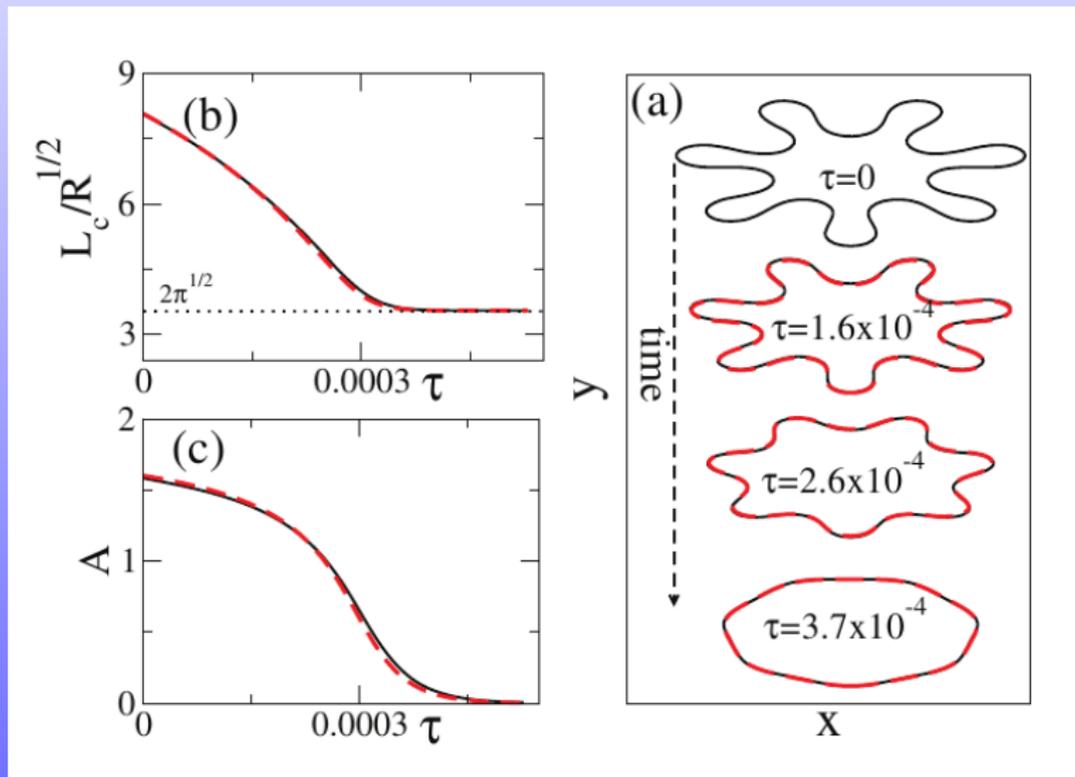
$$\frac{d\lambda_s}{dt} = -\frac{8KA^2\pi^4}{\lambda_s^3} \quad \frac{dA}{dt} = \frac{16KA^2\pi^4\phi^3(A, n)}{R_{ini}^2\phi'(A, n)}$$

## Evolución de diferentes condiciones iniciales.

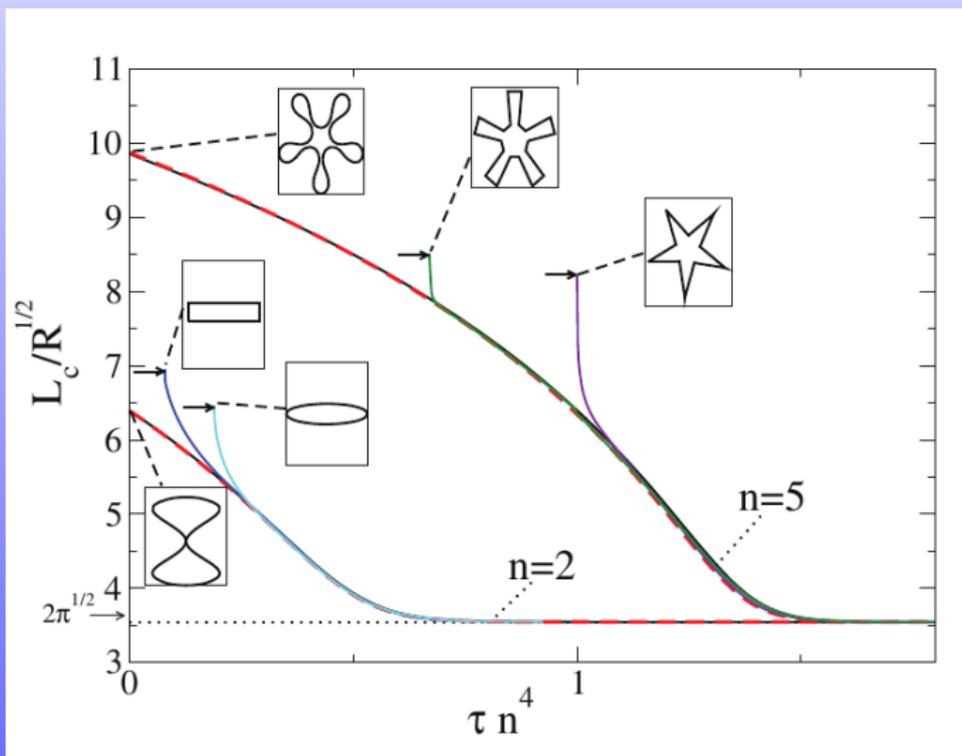


Observemos la concordancia de las predicciones teóricas con los resultados de la simulación.  
Las curvas fueron desplazadas para su mejor apreciación.

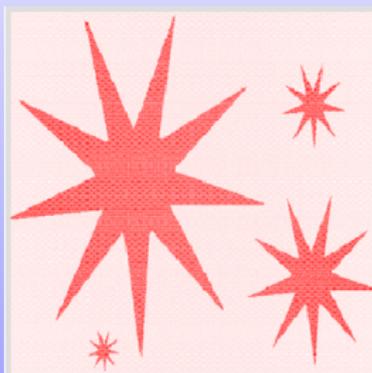
# Decaimiento de la amplitud en el tiempo.



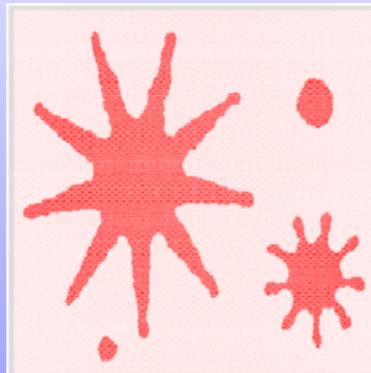
# Convergencia de diferentes condiciones iniciales al perímetro normalizado de la circunferencia.



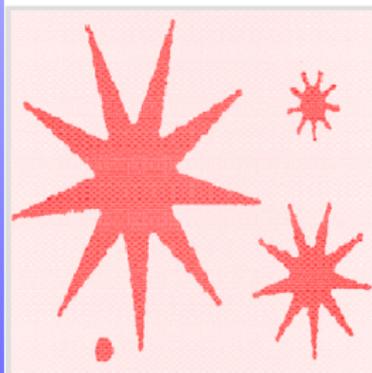
## Comparación con un modelo discreto.



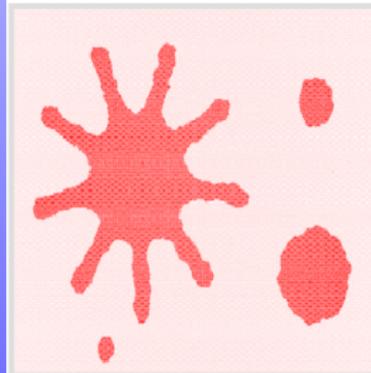
initial condition



705 ns

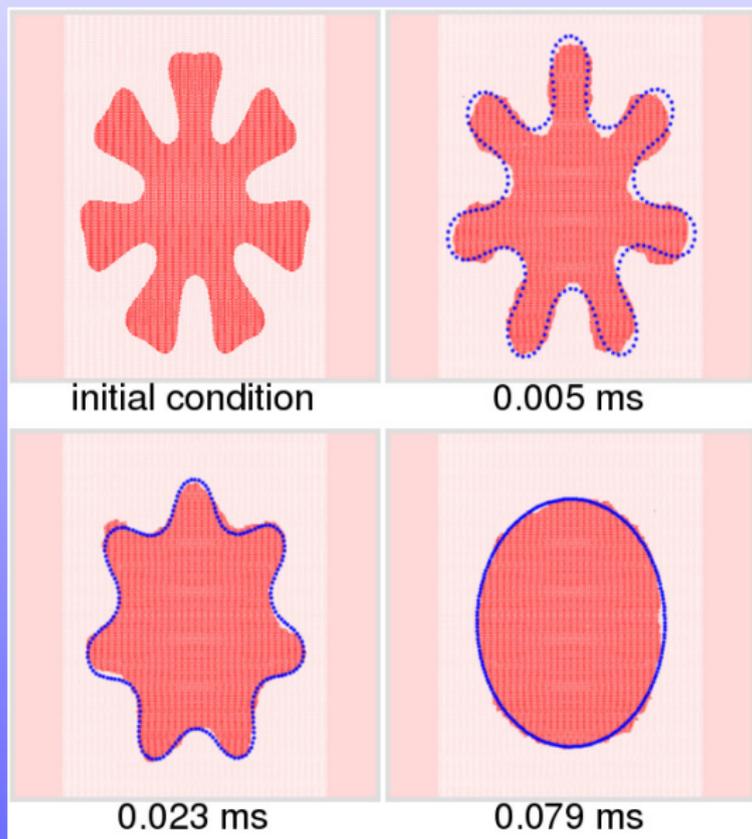


24 ns

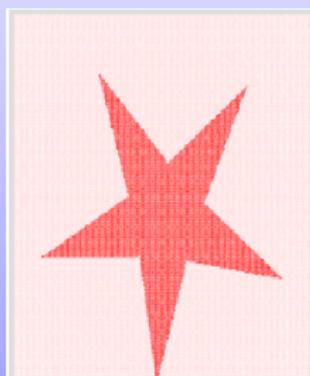


4930 ns

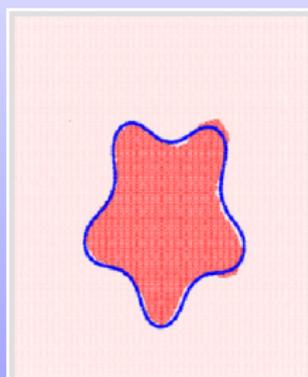
## Comparación con un modelo discreto.



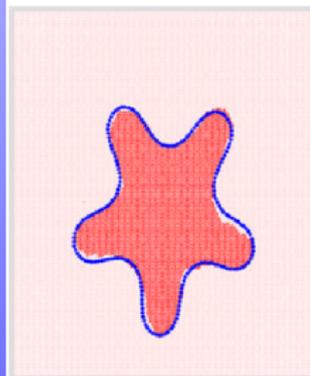
## Comparación con un modelo discreto.



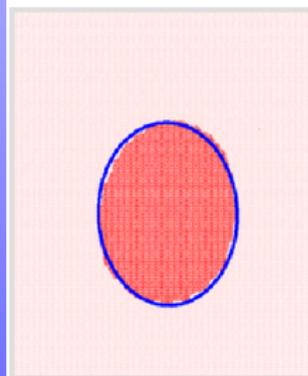
initial condition



0.0114 ms

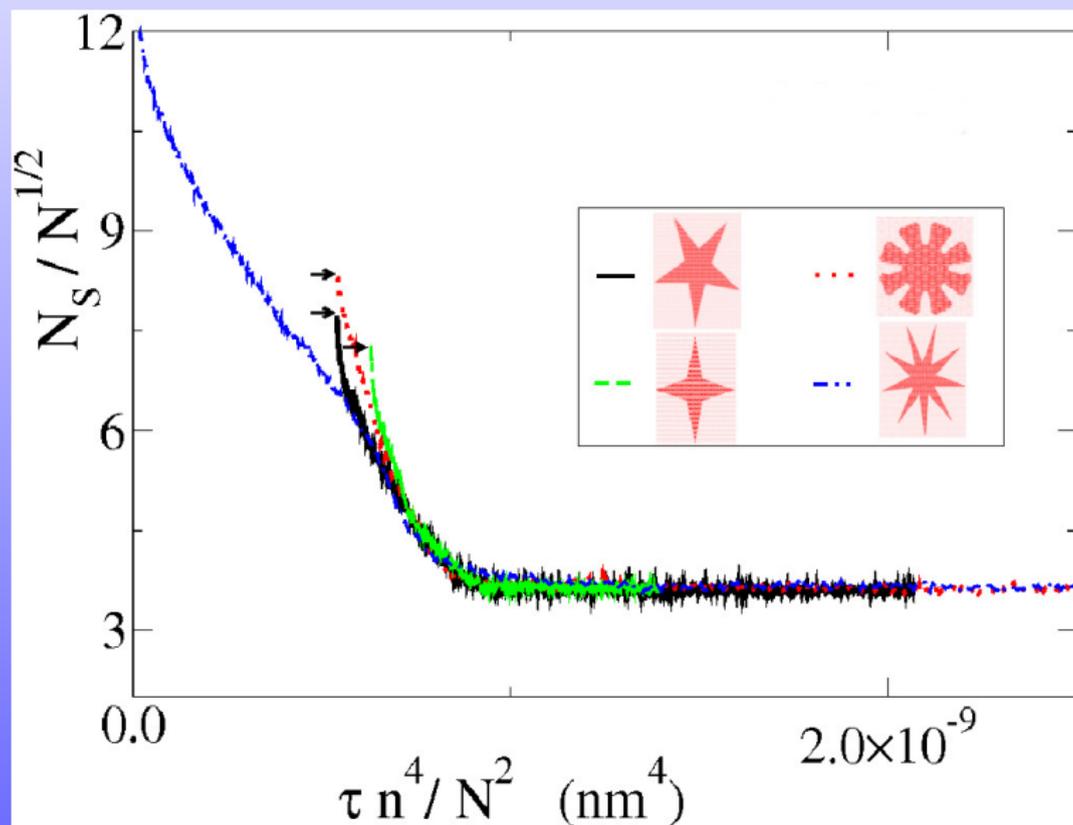


0.0056 ms



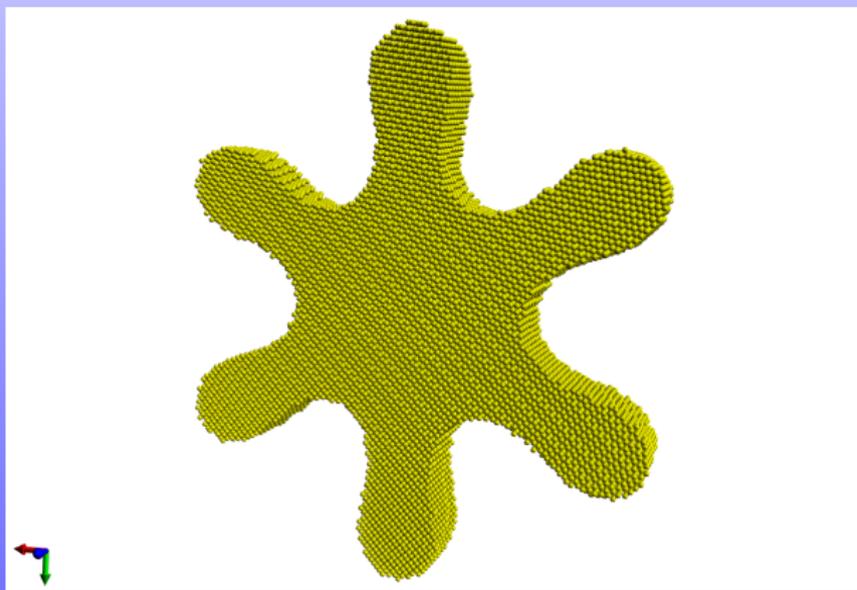
0.0274 ms

# Convergencia de las diferentes condiciones iniciales.



## Trabajo futuro.

El objetivo es evaluar y comparar los resultados de diversas simulaciones mediante dinámica molecular con la teoría continua de difusión superficial.



Agradezco a CONICET por darme la posibilidad  
de hacer mi doctorado.

A mi director y co-directores por su tiempo y dedicación.

Gracias a todos por su atención!!