

Simulación multiescala de la formación de patrones por irradiación

Ana Moreno*, Mario Castro[†], Javier Muñoz-García[‡] y Rodolfo Cuerno[‡]
Instituto de Investigación Tecnológica, Universidad Pontificia Comillas, Madrid E-28015.

Una de las promesas de la nanotecnología reside en la capacidad de producir estructuras ordenadas con al menos una escala del orden del nanómetro¹. La erosión por bombardeo iónico es una técnica utilizada desde los años 60 y que es capaz de producir este tipo de estructuras de manera autoorganizada².

A pesar de que el proceso se conoce y se ha utilizado durante décadas, la Física que da lugar al tamaño y organización de estos patrones es controvertida. Recientemente se ha visto que el paradigma comúnmente aceptado (el llamado modelo de Bradley-Harper³) no es capaz de explicar las transiciones morfológicas rugoso-patrón ni, cuantitativamente, las escalas observadas en los experimentos.

Recientemente, Castro y Cuerno⁴ han propuesto una teoría en la que el material bombardeado se puede modelar como un fluido (altamente) viscoso cuyo movimiento se debe al stress residual creado por los impactos de los iones y la consiguiente producción de defectos. Así, los iones crean una *capa amorfa* cerca de la superficie debido a las colisiones que ocurren en tiempos del orden de picosegundos. Esta capa amorfa *fluye* debido a la reorganización de defectos en escalas de tiempo varios órdenes de magnitud superiores.

En la Fig. 1 se muestra la capa amorfa producida tras el bombardeo de 200 iones de Xe de 100 eV de energía sobre una cristal de Si incidiendo a 45° con respecto a la superficie.

Una dificultad del sistema experimental es, precisamente, determinar de manera precisa el valor del stress. Por otra parte, los modelos teóricos tienen coeficientes macroscópicos que son difíciles de estimar a partir de primeros principios.

En este trabajo proponemos un método multiescala para conectar la física de la colisión y la hidrodinámica del flujo viscoso. Para ello, proponemos utilizar una descripción basada en la teoría de lubricación (en este caso justificada porque la capa amorfa es del orden de 1 nm para estas energías y los patrones del orden de 50 nm) utilizando medidas de stress a partir de simulaciones de dinámica molecular. Así, la altura de la superficie de silicio, $H(X, T)$, se describe mediante la ecuación (adimensionalizada)⁴

$$\partial_T H = -\partial_X \left[(\tilde{\sigma} \partial_X^3 H + \partial_X \Sigma_n^{(ext)}) \frac{H^3}{3} + \Sigma_t^{(ext)} \frac{H^2}{2} \right], \quad (1)$$

donde $\Sigma_{n,t}^{(ext)}$ son, respectivamente, las proyecciones superficiales en la dirección normal y tangencial del tensor stress residual.

De este modo, midiendo dicho stress residual a partir de las simulaciones, se determinan numéricamente los coeficientes de la ecuación (1), lo que permite, *de facto*, abordar las escalas diversas involucradas en el problema. La ecuación resultante se puede integrar numéricamente utilizando esquemas de discretización adaptados a ecuaciones que obedecen leyes de conservación⁵.

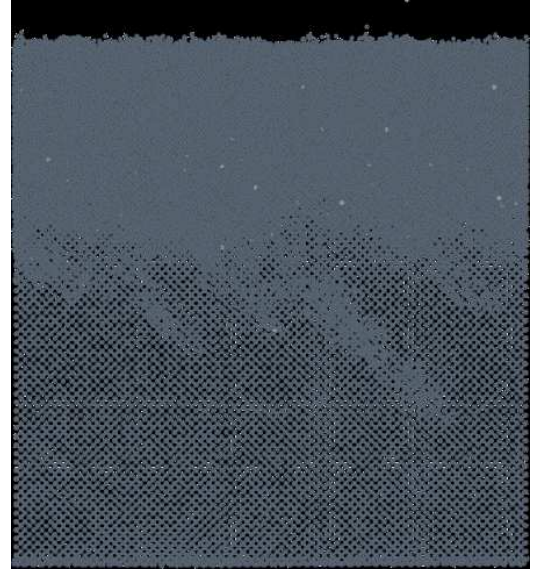


FIG. 1. Morfología de un cristal de silicio tras 100 impactos de iones de Xe de 100 eV de energía en incidencia a 45°. El potencial utilizado es un Tersoff interpolado mediante un potencial ZBL para tener en cuenta el efecto colisional a altas energías.

* ana.moreno@iit.upcomillas.es

[†] Grupo Interdisciplinar de Sistemas Complejos (GISC), Universidad Pontificia Comillas, Madrid E-28015.

[‡] Departamento de Matemáticas y GISC, Universidad Carlos III de Madrid, Leganés E-28911.

¹ R. Cunningham, P. Haymann, C. Lecomte, W. Moore, and J. Trillat, *Journal of Applied Physics* **31**, 839 (1960).

² M. Navez, C. Sella, and D. Chaperot, *Comptes Rendus. Académie des Sciences* **254**, 240 (1962).

³ R. Bradley and J. Harper, *J. Vac. Sci. Technol. A* **6**, 2390 (1988).

⁴ M. Castro and R. Cuerno, *Appl. Surf. Sci.* **258**, 4171 (2012).

⁵ L. Kondic, *SIAM Review* **45**, 95 (2003).