

01;11

К вопросу оценки времени релаксации локальных деформаций на поверхности металлов

© Ю.И. Дударев, А.В. Казаков, М.З. Максимов

Сухумский физико-технический институт АН Республики Абхазия,
Сухуми, Абхазия

(Поступило в Редакцию 28 апреля 1997 г.)

С помощью асимптотических методов для изменения рельефа локальных поверхностных образований получены простые и достаточно точные соотношения для профиля рельефа и характерных времен релаксации локальных деформаций на поверхности металлов в кинетической и диффузионной моделях.

1. При создании сверхемких накопителей информации на твердом теле ее кодирование осуществляется воздействием острия сканирующего туннельного микроскопа, изготовленного из тугоплавкого металла. Происходящее при этом изменение рельефа (бугорок и впадина) может быть сопоставлено биту информации [1]. Однако самодиффузия материала носителя может приводить к постепенному сглаживанию рельефа и уменьшению долговечности бита информации. Поэтому исследование кинетики и динамики релаксаций поверхностных структур представляет определенный интерес для прогнозирования срока службы соответствующих устройств. Этому вопросу посвящена обстоятельная работа [1]. Однако решения полученных там уравнений для функции $f(r,t)$, описывающей рельеф поверхности, по нашему мнению, проанализированы аналитически недостаточно полно. Остановимся на этом подробнее. Прежде всего эти уравнения можно записать единым образом

$$\frac{\partial f(r,t)}{\partial t} = -K_n(-1)^n L^{n-1} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r f_r}{\sqrt{1+f_r^2}} \right),$$

$$L = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right); \quad f_r = \frac{\partial f}{\partial r}, \quad (1)$$

где L — радиальный оператор Лапласа на плоскости; $n = 1$ соответствует кинетической ($K_1 \equiv K$) и $n = 2$ — диффузионной ($K_2 \equiv \lambda$) модели.

При этом предполагается, что начальный профиль углублений на поверхности металла описывается гауссовым распределением

$$f(r,0) \equiv -b_0 f_0(r) = -b_0 \exp\left(-\frac{\pi b_0 r^2}{V_0}\right), \quad (2)$$

где b_0 — исходная глубина ямы, V_0 — ее объем со среднеквадратичным радиусом эквивалентного цилиндра

$$\langle r^2 \rangle = R^2 = \frac{V_0}{\pi b_0} = b_0 \mu^2, \quad \mu^2 = \frac{V_0}{\pi b^3}. \quad (3)$$

Такое представление начального условия для профиля вполне естественно, так как оно совпадает с общим распределением шероховатостей на поверхности (см.,

например, [2–4]). В общем случае решение системы (1), (2) затруднительно, однако горизонтальные размеры ямок $2R$, возникающие на поверхности металлов в результате воздействия острия туннельного микроскопа, намного больше [1,3] их вертикальных размеров, подобно естественным поверхностным шероховатостям [2–4]. В этом случае

$$|f_r| \sim \frac{r}{R} \frac{b_0}{R} < 1,$$

поэтому уравнение (1) линеаризуется и принимает компактный вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} = K_n(-1)^n L^n f. \quad (4)$$

2. Следует при этом отметить, что описание профиля шероховатости системой (2) и (4) полностью совпадает с задачей изменения функции распределения $f_0(r)$ во времени при исследовании кинетики тонкодисперсного измельчения и других технологических процессов переработки природного сырья и полезных материалов [5,6]. В этом смысле существенно облегчается анализ соответствующих решений. В самом деле, согласно [5,6], решение системы (2), (3) может быть представлено в следующей интегральной форме:

$$f_n(r,t) = -b_0 \int_0^\infty f_0(r_0) G_n(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, 0) d\mathbf{r}_0, \quad (5)$$

где $G_n(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, 0)$ — функции Грина оператора (4), фурье-представление которой имеет вид

$$G_n(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, 0) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{q} \exp[i\mathbf{q}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) - K_n t q^{2n}]. \quad (6)$$

Нетрудно убедиться, что при $t \rightarrow 0$

$$G_n(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}_0, 0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0), \quad (7)$$

на основании (5) сразу получаем результат (2) при любых $f_0(r)$. Далее, поскольку основной вклад в интеграл (6) дают конечные $q \sim q_0$, то при $t \rightarrow \infty$ заменой $K_n q^{2n} t = \rho$ нетрудно получить вторую ведущую асимптотику G_n

$$G_n(\mathbf{r}, t | \mathbf{r}, 0) = \frac{1}{2} \Gamma\left(1 + \frac{1}{n}\right) (K_n t)^{-1/n}, \quad (8)$$

где $\Gamma(z)$ — гамма-функция.

Подстановка (8) в (5) дает

$$f(r, t)_{t \rightarrow \infty} = -\frac{V_0}{4\pi} \Gamma\left(1 + \frac{1}{n}\right) (K_n t)^{-1/n}, \quad (9)$$

поскольку

$$2\pi b_0 \int_0^\infty f(r_0) r_0 dr_0 = V_0. \quad (10)$$

В случае кинетической модели ($n = 1$, $K_1 = K$) и гауссовского начального условия (2) все вычисления упрощаются [1], так как соответствующие интегралы от функций Бесселя в формулах (5), (6) являются полными интегралами Вебера [7]. Имеем

$$f_1(r, t) = -b_1(t) \exp(-\pi b_1(t) r^2/V_0), \quad (11)$$

так что

$$f_1(0, t) = -b_1(t) = -b_0(1 + 4\pi K b_0 t/V_0)^{-1}. \quad (12)$$

При любых же n и, в частности, для диффузионной модели ($n = 2$, $K_2 = \lambda$) получить такие простые соотношения для $f_n(r, t)$ не удастся. Однако для приближенных оценок можно воспользоваться приведенным методом сращивания асимптотических решений (ПМС) [8] по параметру t . Согласно процедуре этого метода, для ведущих асимптотик функции $[-f(r, t)]^n$ из (2) и (9) имеем

$$\left(-\frac{f(r, t)}{b_0}\right)^n = \begin{cases} [f_0(r)]^n & t \rightarrow 0, \\ \tau_n/t & t \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (13)$$

сращивание которых дает

$$f_n(r, t) = -b_0 \left(t/\tau_n + 1/f_0^n(r)\right)^{-1/n}, \quad (14)$$

$$\tau_n K_n = \left(\frac{V_0 \Gamma(1 + 1/n)}{4\pi b_0}\right)^n. \quad (15)$$

Отсюда прежде всего для кинетической модели ($n = 1$) и начального условия (2) получаем

$$f_1(r, t) \approx -b_0(\exp(r^2/R^2) + t/\tau_1), \quad \tau_1 = R^2/4K, \quad (16)$$

где было использовано соотношение (3).

При этом, с одной стороны, (16) удовлетворяет начальным условиям и его разложение вместе с (11) в ряд по степеням r^2/R^2 дает несколько совпадающих коэффициентов, с другой — для $b_1(t) = f_1(0, t)$ получаем правильный результат (11), (12). Поэтому с достаточной точностью соотношения (14), (15) могут быть использованы и для других r и n . Если при этом ввести степень сохранности углубления $\xi = -f(r, t)/b_0 < f_0(r)$, то для времени t заполнения с начального $f(r)$ до данного уровня ξ найдем

$$t_n = \tau_n (\xi^{-n} - f_0^{-n}(r)), \quad \xi \leq f_0(r). \quad (17)$$

Здесь следует отметить, что все полученные выше оценки не очень чувствительны к форме начального распределения $f_0(r)$, ибо при этом, как и в работе [1], предполагается выполнение условий (10) — нормировки на объем V_0 при заданной глубине $f_0 = b_0$ и (3) — для среднего радиуса. Все это вместе позволяет выбирать начальное распределение в простейшей форме, близкой к прямоугольной, когда переход от (1) к (4) становится более обоснованным. Об этом свидетельствуют и численные расчеты [1] для двух приближений t_1 в кинетической модели. В этих случаях можно также считать $f_0 \approx 1$, тогда формула (17) для кинетической ($n = 1$) и диффузионной ($n = 2$) моделей принимает вид

$$t_{\text{kin}} \approx \tau_1(1/\xi - 1), \quad \tau_1 = R^2/4K; \quad (18)$$

$$t_{\text{dif}} \approx \tau_2(1/\xi^2 - 1), \quad \tau_2 = \pi R^4/64\lambda. \quad (19)$$

Их отношение будет равно

$$t_{\text{dif}}/t_{\text{kin}} = (1/\xi + 1)\tau_2/\tau_1, \quad (20)$$

т. е. при прочих равных условиях оно зависит от степени заполнения. Например, при $\xi = 0.5$ имеем

$$t_{\text{dif}}/t_{\text{kin}} = 3\tau_2/\tau_1. \quad (21)$$

Далее формула (19) для диффузионной модели при $\xi \rightarrow 0$ дает правильный результат $\lambda t_{\text{dif}}/\pi b_0^4 \mu^4 = 1/64\xi^2$ в отличие от оценок работы [1] — $1/96\xi$.

3. Таким образом, с помощью последовательного анализа исходных кинетических уравнений и асимптотических методов для изменения рельефа локальных поверхностных образований получены простые и достаточно точные соотношения для профиля рельефа и характерных времен релаксации локальных деформаций на поверхности металлов в кинетической и диффузионной моделях. Все это вместе с методами расчета энергетических параметров и коэффициентов переноса [1] существенно облегчает прогнозирование срока службы устройств памяти, определение условий их надежной эксплуатации, выбор материала носителя и др., что является неотъемлемыми этапами нанотехнологий.

Список литературы

- [1] Добротворский А.М., Адамчук В.К. // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 8. С. 132.
- [2] Трофимов В.И., Осадченко В.А. // Поверхность. 1987. № 9. С. 5.
- [3] Веттегрень В.И., Рахимов С.Ш., Светлов В.Н. // ФТТ. 1995. Т. 37. Вып. 4. С. 913.
- [4] Бойко В.В., Кашин А.П., Максимов М.З., Чиковани З.Е. // Поверхность. 1993. № 11. С. 40.
- [5] Непомнящий Е.А. // Теоретические основы химической технологии. 1973. Т. 7. № 5. С. 754. Там же. 1977. Т. 11. № 3. С. 477. Там же. 1978. Т. 12. № 4. С. 576.
- [6] Кашин А.П., Максимов М.З., Чиковани З.Е. // УФЖ. 1991. Т. 36. № 5. С. 973.
- [7] Агрест М.М., Максимов М.З. Теория неполных цилиндрических функций и их приложения. М.: Атомиздат, 1965.
- [8] Кашин А.П., Кварацхелия Т.М., Максимов М.З., Чиковани З.Е. // ТМФ. 1989. Т. 78. № 3. С. 392.