

11;12

## Экспериментальная оценка параметров распределений для шероховатости поверхности в каналах наноразмеров

© В.П. Мемнонов, П.Г. Ульянов

Санкт-Петербургский государственный университет,  
198504 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: pokusa@star.math.spbu.ru

(Поступило в Редакцию 7 декабря 2010 г. В окончательной редакции 23 марта 2011 г.)

Для расчета молекулярных течений в наносистемах создана статистическая модель шероховатости поверхности, основанная на представлении ее неровностей в виде набора плоских микроплощадок, соединяющихся краями между собой и имеющих нормали, отличные от нормали к среднему уровню. В качестве примера с помощью атомно-силового микроскопа Solver PRO-M выполнены измерения двух параметров микроскопической шероховатости жесткого диска винчестера: тангенса угла наклона вдоль линии скана и высоты неровности. По большой экспериментальной выборке из измеренных значений получены плотность функций распределения для угла наклона и условные распределения с параметрами, зависящими от этого угла, для высоты неровности, а также для площади треугольника, образуемого высотой вместе со сторонами угла. Это последнее условное экспоненциальное распределение оказалось более удобным для расчетов случайных величин. Полученные результаты могут использоваться для моделирования граничных условий при расчете молекулярных течений статистическими методами Монте-Карло, а также для оценки свойств новых материалов защитных покрытий поверхностей в наносистемах, содержащих течения газа.

### Введение

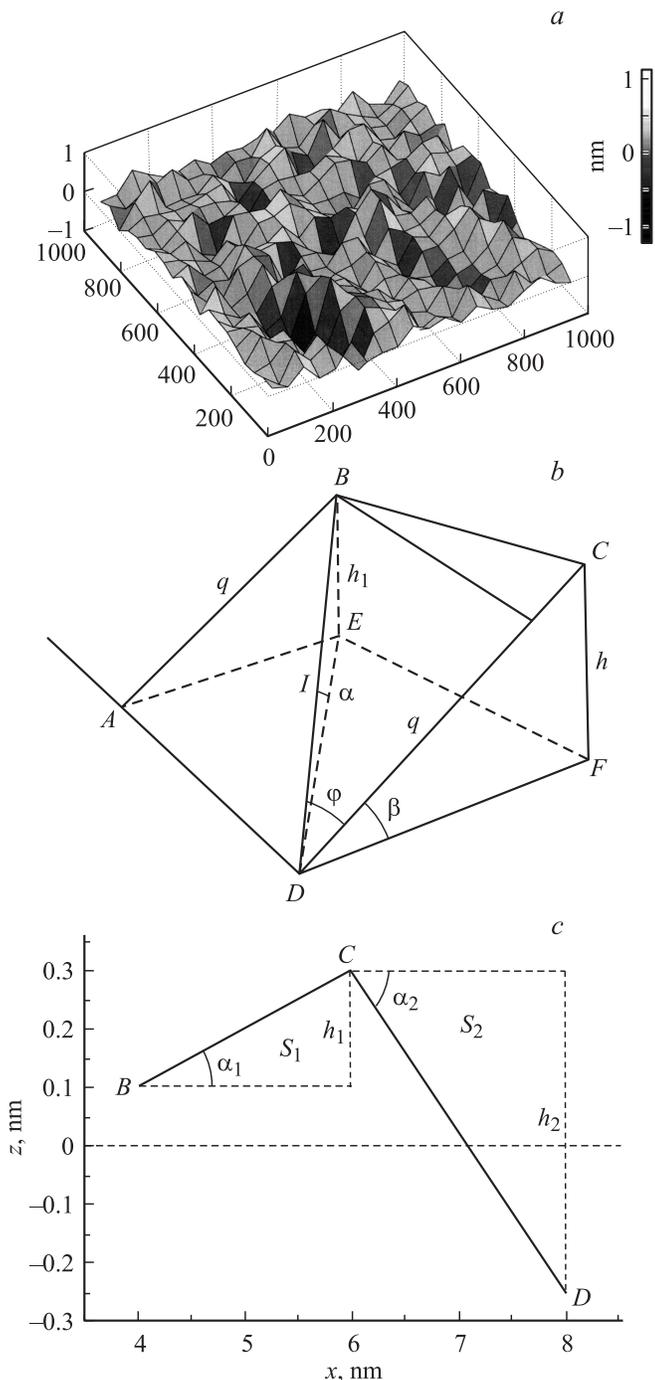
В наносистемах вследствие высоких величин отношения площади поверхности к объему влияния характеристик поверхности на протекание явлений сильно возрастает. Это приводит в том числе и к необходимости изучения таких характеристик на микроуровне. Течение воздуха и других газов в очень узких каналах уже работающих или только проектируемых новых технологических устройств относится к подобным явлениям. Очень часто, например, для увеличения плотности магнитной записи в винчестерах конструкторы вынуждены уменьшать расстояние между магнитной головкой и жестким диском до наноразмеров [1]. И, больше того, уже в таком наномасштабе исследователи для получения рекордной плотности записи в  $1 \text{ Tb/in}^2$  ( $155 \text{ Gb/cm}^2$ ) уменьшают его еще до  $4.5\text{--}6 \text{ nm}$  [2]. Таким образом, расстояние между магнитной головкой и жестким диском становится порядка и даже гораздо меньше длины свободного пробега молекул в воздухе.

Течения воздуха в таких каналах соответствуют переходному режиму и уравнения Навье–Стокса, прежде использовавшиеся для их описания, должны быть заменены на решение уравнения Больцмана или численное моделирование на молекулярном уровне, например как в методе прямого статистического моделирования (ПСМ) [3], где теперь нужно учитывать шероховатость на граничных поверхностях уже также в микроскопическом масштабе. В этом методе при расчете взаимодействия газа с поверхностью в малой ее локальной области применяется диффузная модель, в которой падающая на поверхность молекула после релаксации вылетает обратно по косинусному закону Кнудсена, т.е. пропор-

ционально косинусу угла к нормали для этой малой области. Но вследствие шероховатости положения этих нормалей относительно среднего уровня поверхности сильно меняются, оказывая заметное влияние на сопротивление движению газа за счет дополнительного изменения импульса молекул при столкновении с такими неровностями.

Конечно, кроме винчестеров оценка параметров шероховатости необходима и в других задачах для расчетов течений в очень узких каналах. В работе [4] исследовалась газодинамическая проводимость микроканалов с использованием моделирования шероховатости в микрометровом масштабе с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ), а в работе [5] рассматривалось диффузное рассеяние молекул газа с моделированием шероховатости в виде набора конусов. Весьма актуальна сейчас задача охлаждения компьютерных плат с помощью протекающих внутри газовых потоков, которые теперь в сравнительно широко используемой технологии  $45 \text{ nm}$  и тем более в технологии  $32 \text{ nm}$  (Intel) уже относятся к наноразмерным течениям. Задача теплопередачи в таких каналах рассматривалась в работе [6], но без учета шероховатости.

С появлением АСМ статистические характеристики шероховатости можно оценивать экспериментально. Вопросы калибровки АСМ для различных применений обсуждаются в работах [7] и [8], причем в [8] проведены измерения электростатических и ван-дер-ваальсовых сил взаимодействия зондов АСМ с проводящими поверхностями. В работе [9] было проведено сравнение различных методов исследования шероховатости поверхности полированных ситаловых и кварцевых подложек с помощью как методов АСМ, так и рентгеновского



**Рис. 1.** *a* — поверхность винчестера фирмы Quantum с 200-кратным сжатием по горизонтали, *b* — пересечение микроплощадки *ABCD* линией скана *I* над средним уровнем *AEFD*, *c* — фрагмент ломаной с площадями треугольников  $S_1, S_2$  и высотами гребней  $h_1, h_2$ .

рассеяния и дифференциального рассеяния света. Получилось хорошее совпадение функций спектральной плотности, мощности рельефа поверхности и значений эффективной высоты шероховатости по данным этих трех разных методов. Анализ влияния конечных размеров острия кантилевера на точность измерений содержится в работах [10,11].

В настоящей работе используется приближенное представление шероховатой поверхности в виде совокупности плоских микроплощадок, соединяющихся между собой краями над и под средним уровнем поверхности (см. рис. 1, *a*) и имеющими нормали, отличающиеся от нормали к нему на некоторый угол  $\beta$  (см. рис. 1, *b*). В отличие от прежних экспериментов [2,5], в которых измерялся лишь один параметр — чаще всего только среднее квадратичное отклонение на поверхности, работа посвящена получению экспериментальным путем статистических распределений одновременно двух основных параметров шероховатости: тангенса угла наклона  $\alpha_i$  (см. рис. 1, *b*) и соответствующего ему гребня неровности (см. рис. 1, *c*). Как отмечалось выше, особый интерес представляют новые проектируемые винчестерные устройства и специальные материалы защитного покрытия поверхности для них [2], но методика измерений и статистический анализ могут обрабатываться на доступных коммерческих винчестерах, что и было выполнено в работе. Хотя с помощью метода ПСМ с разной степенью приближения к реальным условиям уже проделано несколько расчетов для моделирования параметров течений в будущих новых винчестерах [12–14], однако вопрос о создании статистической модели шероховатости их поверхности и учете ее в расчетах и исследовании влияния ее на параметры, в том числе на силу, действующую на магнитную головку, насколько нам известно, нигде не поднимался.

## 1. Методика измерений

Для измерений параметров шероховатости использовался ACM Solver PRO-M. Сканирование производилось зондом в полуконтактном режиме с использованием кантилеверов NSG03. Измерения проведены для образцов поверхностей используемых в настоящее время жестких дисков винчестеров фирмы Quantum в воздухе при атмосферном давлении с адсорбционным слоем на поверхности. Именно такие условия существуют на практике, причем косинусный закон как раз хорошо выполняется благодаря адсорбционному слою. Были получены АСМ-изображения вдоль и поперек радиуса жесткого диска на одном и том же участке поверхности. Изображение, называемое в дальнейшем сканом, представляет из себя набор точек. Для каждой точки скана известны ее координаты  $x, y, z$ . Причем координата  $z$  отсчитывается от нулевой линии, получаемой последующим вычитанием средней линии из всех измеренных  $z$  координат точек по  $x$  и  $y$ . Расстояние  $d$  между соседними точками по  $x$  и  $y$  одинаково и равно 1.96 nm. Набор точек с одинаковой координатой по  $x$  образует строку.

При измерении высоты  $z$  с большим полем сканирования, которое необходимо для получения статистических выборок нужного размера, приходилось работать не на максимальном разрешении. Поэтому для снижения шума применялось дополнительное осреднение, состоя-

шее в том, что координата  $z$  определялась как среднее арифметическое координат  $z$  по 25 точкам в квадрате со сторонами  $5 \times d$  по  $x$  и  $y$ . В результате ошибка по координате  $z$  составила порядка 0.4 нм. Соединяя такие соседние укрупненные точки отрезками прямой, получаем ломаную. На этих ломаных были проведены затем еще отрезки, которые соответствуют углам отклонения от средней линии порядка или больше  $0.1^\circ$ , так как мелкая рябь совсем небольших отклонений внутри них вносит вклад в отклонения молекул, не отличимый от диффузного рассеяния. Эти отрезки и представляют собой сечения плоскостью скана микроплощадок, о которых говорилось во Введении. Были измерены углы  $\alpha_i$  между ними и линиями, параллельными общей нулевой линии (см. рис. 1, *c*), а также вычислены площади прямоугольных треугольников  $S_i$ , образуемых такими отрезками и высотами  $h_i$ , проведенными из одного конца отрезка на основание, параллельное нулевой линии от другого его конца. Углы  $\alpha_i$ , высоты  $h_i$  и площади  $S_i$  составили большой файл данных для последующей статистической обработки. Как будет видно из дальнейшего, площади  $S_i$  имеют приближенно экспоненциальное распределение с параметром, зависящим от угла  $\alpha_i$ , а углы и высоты — распределение Гаусса.

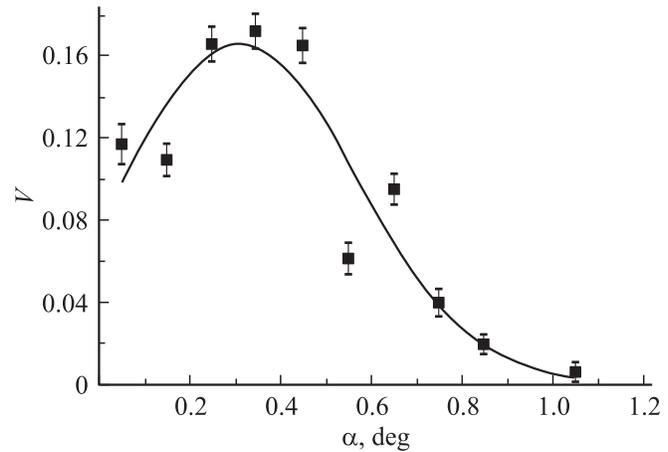
Эти измерения были проделаны для 5 сканов вдоль и 5 поперек радиуса жесткого диска. Следует отметить, что направление, вдоль которого производится измерение, пересекает встретившийся наклон микроплощадки под некоторым углом  $\phi$  к перпендикуляру ее двугранного угла со средней плоскостью поверхности, как это показано на рис. 1, *b*. Из рис. 1, *b* получаем необходимые в дальнейшем геометрические соотношения:  $q = I \cos \phi$ ,  $h_1 = q \sin \beta$  и  $h_1 = I \sin \alpha$ , откуда  $\sin \alpha = \cos \phi \sin \beta$ . Или приближенно для малых углов  $\alpha, \beta$  имеем

$$\alpha = \cos \phi \beta. \quad (1)$$

В качестве первого приближения для поверхности без специальной обработки на микроуровне естественно предположить равновероятное распределение угла  $\phi$  в интервале  $-\pi/2 \leq \phi \leq \pi/2$ .

## 2. Оценка статистических параметров шероховатости

Таким образом, вдоль ломаной были измерены углы наклона  $\alpha_j$  ее отрезков и одновременно соответствующие площадки  $S_j$  и высоты  $h_j$  (см. рис. 1, *c*). Эти данные, записываемые построчно, составили большой массив. Причем, так же как и в макроскопической шероховатости [15], в дальнейших статистических оценках используется модуль угла  $|\alpha_j|$ , поскольку положительные и отрицательные его значения встречаются практически с одинаковой вероятностью. Более того, в рассматриваемом массиве измеренных данных знаки углов  $\alpha_j$  относительно средней линии (см. рис. 1, *c*) последовательно чередуются, сохраняясь меньше чем



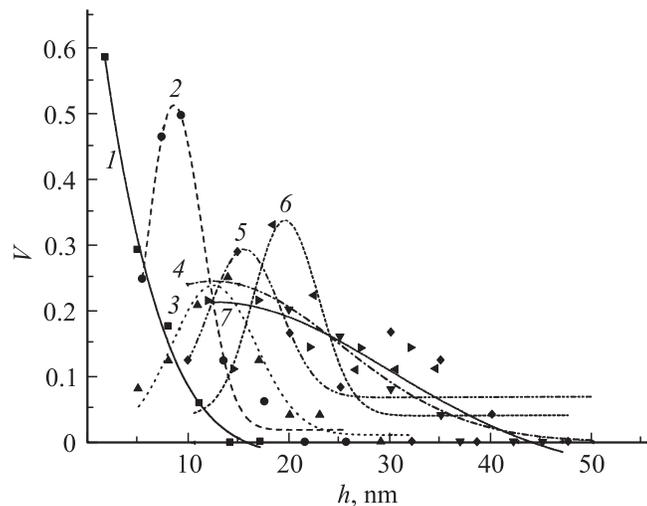
**Рис. 2.** Распределение модуля углов наклона поперек радиуса жесткого диска винчестера.

в 10% случаев. Затем с помощью алгоритма сортировки „пузырек“ [16] образовывался новый массив с возрастающими по абсолютной величине углами  $\alpha_j$  и прилегающими к ним соответствующими площадями  $S_j$  и высотами  $h_j$  и подсчитывалось число углов  $N_i$ , попадающих по численному значению модуля в интервалы между  $\alpha_i$  и  $\alpha_i + \delta\alpha$ , причем полагалось  $\delta\alpha = 0.1^\circ$ . В итоге на интервалах  $\delta\alpha$  набиралось до нескольких десятков значений, что позволило оценить не только параметры распределения для углов  $|\alpha_j|$ , но также и параметры условного распределения для соответствующих площадей  $S_j$  и высот  $h_j$  внутри этих интервалов. В частности, разделив  $N_i$  на общее число измеренных углов  $N$ , для величин  $V_i = N_i/N$ , соответствующих вероятностям попадания значений в интервале  $i$ , получаем приближенно нормальные распределения углов  $|\alpha|$  как для направления поперек радиуса (см. рис. 2), так и вдоль него. Здесь следует отметить, что при поворотах жесткого диска винчестера на малых временных интервалах  $\delta t$  порядка  $10^{-6}$  s проходимый отрезок для современных скоростей оборотов винчестеров можно приближенно считать перпендикулярным к радиусу. Причем на таком временном интервале уже устанавливаются параметры течения [12], а сама задача может быть сведена к двумерной. Поэтому направление поперек радиуса оказывается более важным, и в дальнейшем рассматривается только оно.

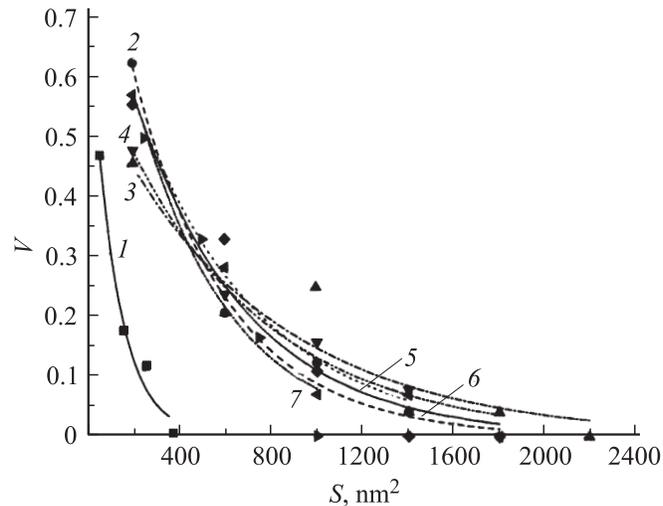
На рис. 2 кривая распределения модуля углов наклона аппроксимирована по методу наименьших квадратов экспонентой с квадратичной зависимостью от угла  $\alpha$ , которую после нормировки на исследованном интервале углов в градусах  $[\alpha_1 \leq \alpha \leq 1]$ , причем  $\alpha_1 = 0.05$ , преобразуем в плотность функции распределения  $f(\alpha)$ :

$$f(\alpha) = \frac{\sqrt{2/\pi}}{C_1 \sigma} \exp\left(-\frac{(|\alpha| - \alpha_c)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (2)$$

где входящие параметры имеют следующие значения:  $\alpha_c = 0.31118^\circ$ ,  $\sigma = 0.25716^\circ$ , а нормировочная постоянная



**Рис. 3.** Распределение высот гребней  $h$  для интервалов углов  $|\alpha_i|$  от  $0-0.1^\circ$  до  $0.7-0.8^\circ$ ; кривые 1–7 (через интервал  $0.1^\circ$ ). Ошибки аппроксимаций кривых около 7–10%.



**Рис. 4.** Экспоненциальное распределение площадей  $S$  при углах  $|\alpha_i|$  из интервалов от  $0-0.1^\circ$  до  $0.7-0.8^\circ$ ; кривые 1–7 с ошибками аппроксимации 7–10%.

ная  $C_1$  выражается через интеграл вероятности  $\Phi(z_1)$  в виде  $C_1 = 1 + \Phi(z_1)$ , с  $z_1 = (\alpha_c - \alpha_1)/(\sqrt{2}\sigma)$ .

Как уже отмечалось выше, внутри интервалов  $\delta\alpha$  угла  $|\alpha|$  оказалось по несколько десятков измеренных величин площадей  $S_j$  и высот  $h_j$ . Подсчитывая значения  $V$  вероятностей попадания, например высот  $h$  в промежутки между  $h$  и  $h + \delta h$  для каждого из интервалов угла  $|\alpha|$  соответственно от  $0^\circ-0.1^\circ$  до  $0.6^\circ-0.7^\circ$  (для интервала  $0.7^\circ-0.8^\circ$  и последующих уже было недостаточно данных) при значениях  $\delta h$ , равных 3–5 nm, получаем наборы точек в них и строим по методу наименьших квадратов кривые (см. рис. 3). Они хорошо аппроксимируются квадратичными экспонентами, и для высот  $h$  можно представить на каждом угловом интервале нормированные в промежутке  $[h_1 \leq h \leq \infty]$  плотности функций распределения  $W(h)$ :

$$W(h) = \frac{2\sqrt{2/\pi}}{C_2 r} \exp\left[-\frac{2(h-h_c)^2}{r^2}\right]. \quad (3)$$

Нормировочная постоянная  $C_2$  выражается через интеграл вероятности  $\Phi(z_2)$  по формуле  $C_2 = 1 + \Phi(z_2)$ , с  $z_2 = \sqrt{2}(h_c - h_1)/r$ . Правда, все численные значения параметров  $r$ ,  $h_c$  и  $h_1$  здесь очень сильно и нерегулярно зависят от углового интервала.

В отличие от распределения для модуля углов и высот  $h$  условные статистические распределения для площадей  $S_j$ , соответствующие разным интервалам углов  $|\alpha_i|$ , оказались отличными от гауссовых и аппроксимируются экспоненциальными распределениями. На рис. 4 с помощью кривых 1–7, полученных также методом наименьших квадратов, представлены вычисленные значения  $V$  вероятностей попадания площадей  $S$  в промежутки между  $S$  и  $S + \delta S$  для углов  $|\alpha_i|$  из интервалов соответственно от  $0-0.1^\circ$  до  $0.7-0.8^\circ$  при значениях  $\delta S$ , равных для первого из них  $100 \text{ nm}^2$ , для

последующих  $400 \text{ nm}^2$  и для последнего  $250 \text{ nm}^2$  в направлении поперек радиуса жесткого диска винчестера. Видно, что с ростом углов  $|\alpha_i|$  скорость падения кривых 1–4 последовательно уменьшается, но затем крутизна кривых 4–7, наоборот, возрастает. Это вызвано изменением параметра  $t$  в экспоненциальном распределении для  $S$ .

Действительно, нормированная плотность экспоненциального распределения  $F(S)$  на интервале  $(S_0, \infty)$ , где параметр  $S_0$  имеет следующие значения: для первого и последнего интервалов  $S_0 = 50 \text{ nm}^2$  и  $S_0 = 250 \text{ nm}^2$  соответственно, а для всех остальных  $S_0 = 200 \text{ nm}^2$ , может быть записана в виде

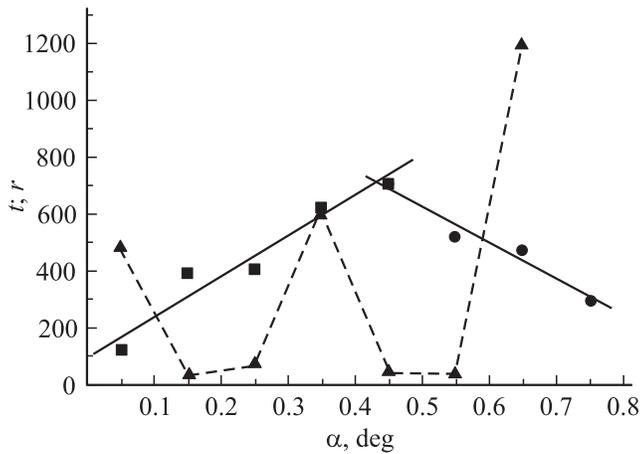
$$F(S) = \frac{1}{t} \exp\left[-\frac{(S-S_0)}{t}\right]. \quad (4)$$

Поэтому отмеченное выше поведение кривых связано с изменением величины параметра  $t$  в зависимости от интервала углов  $|\alpha_i|$ . И, проводя по методу наименьших квадратов отрезки прямых для значений  $t$  по всем этим интервалам, получаем (см. рис. 5, сплошные линии) представление, в котором для промежутка  $0.4-0.5^\circ$  достигается его наибольшая величина. По обе стороны от него  $t$  уменьшается линейно, а крутизна падения кривых соответственно увеличивается. В то же время на рис. 5 штриховой кривой представлена нерегулярная зависимость для параметра  $r$  из формулы (3) для распределения высот  $W(h)$ , о которой говорилось выше, после этой формулы.

Параметр  $t$  аналитически может быть приближенно представлен формулой

$$t = A + B|\alpha|, \quad (5)$$

где при  $|\alpha| \leq 0.45^\circ$  параметры отрезка прямой равны  $A = 94.2 \text{ nm}^2$ ;  $B = 145.08 \text{ nm}^2/\text{deg}$ , а на интерва-



**Рис. 5.** Зависимость параметров распределений (3) и (4) от интервалов угла  $|\alpha_i|$ :  $t$  — сплошные линии,  $r$  — штриховые.

ле  $0,45^\circ \leq |\alpha| \leq 0,75^\circ$  они равны  $A = 1290,72 \text{ nm}^2$ ;  $B = -1293,77 \text{ nm}^2/\text{deg}$ .

### 3. Обсуждение полученных результатов

Результаты исследований, проведенных в работе, можно использовать вместе с математическим моделированием происходящих процессов при разрабатывании и конструировании наносистем, содержащих течения газа.

С помощью полученных функций распределения и последующего экспериментального определения их параметров уже для конкретных веществ определяются граничные условия для численного моделирования таких течений. Действительно, молекула, пересекающая формальную границу канала на расчетном поле, вступает во взаимодействие с шероховатостью, которая проявляется после разыгрывания случайных величин: угла наклона  $\alpha$  и высоты  $h$  и состоит в том, что последующая траектория молекулы рассчитывается с учетом этого наклона и полученного значения высоты  $h$  на рассматриваемом участке границы. Высоты  $h$  очень важны, потому что они определяют затенение соседних участков поверхности для траекторий молекул и через них можно совмещать края соседних микроплощадок, что необходимо при учете затенения. Причем, как уже отмечалось в предыдущем разделе, в результате статистической обработки экспериментальных данных получено распределение для вспомогательной величины — площади  $S$ , которое оказалось очень удобным для численных статистических расчетов. Действительно, условное по углу  $\alpha$  экспоненциальное распределение (4) для площади  $S$  позволяет легко получать высоту  $h$  по разыгрываемому в методе Монте-Карло значению  $S$ . К тому же зависимость входящего в него параметра  $t$  от угла  $\alpha$  (см. соотношение (5)) очень удобна для расчетов.

Используя моделирование по методу ПСМ-течения, можно оценивать применимость новых материалов в наносистемах с течениями газа. Например, в защитных покрытиях жестких дисков будущих винчестеров, исследуемых в работе [2], с магнитной головкой на высоте всего 4,5 нм для малых, но все-таки отличных от нуля вероятностей существования неровностей порядка 1 нм с помощью математического моделирования по методу ПСМ-параметров течения можно оценить изменение силы, действующей на магнитную головку и тем самым степень возможного снижения работоспособности будущего устройства.

### Заключение

Разработана статистическая модель шероховатости поверхности, опирающаяся на представление ее неровностей в виде совокупности плоских микроплощадок, соединяющихся краями между собой. В качестве примера с помощью АСМ выполнены измерения параметров шероховатости поверхности жесткого диска винчестера фирмы Quantum в воздухе при атмосферном давлении с адсорбционным слоем на поверхности. В отличие от прежних экспериментов, измеривших средние квадратичные отклонения поверхности, в настоящей работе после статистической обработки проведенных измерений получены статистические распределения для двух одновременно измеряемых параметров шероховатости, пригодные для моделирования микроскопических граничных условий в методе ПСМ при исследовании течений в очень узких каналах. Отмечено, что эти результаты могут быть использованы для оценки применимости новых материалов защитных покрытий поверхностей в наносистемах, содержащих течения газа.

### Список литературы

- [1] Cowborn R.P. // Phil. Trans. R. Soc. Lond. 2000. Vol. A. 358. P. 281–301.
- [2] Li D., Yip W.Ch., Freire F.L. // J. Vac. Sci. Technol. 2003. Vol. A. 21. P. L19–L21.
- [3] Bird G.A. // Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press. 1994. 458 p.
- [4] Ухов А.И., Породнов Б.Т., Борисов С.Ф. // ПМТФ. 2009. Т. 50. С. 20–27.
- [5] Savada T., Horie B.Y., Sugiyama W. // J. Vacuum. 1996. Vol. 47. P. 795–797.
- [6] Ковалев В.Л., Якупчиков А.Н. // Вестн. МГУ. Сер. 1. Математика, механика. 2008. Вып. 2. С. 67–70.
- [7] Новиков Ю.А. // Тр. ИОФ им. Прохорова. 2006. Т. 62. С. 121–143.
- [8] Дедков Г.В., Канаметов А.А., Дедкова Е.Г. // ЖТФ. 2009. Т. 79. Вып. 12. С. 79–85.
- [9] Занавескин М.Л., Занавескина И.С., Ращин Б.С., Асадчиков В.Е., Азарова В.В., Грищенко Ю.В., Толстихина А.Л. // Вестн. МГУ. Сер. 3. Физика, астрономия. 2006. Вып. 8. С. 80–82.

- [10] *Klapetek P., Ohlidal I., Bilek J.* // Ultramicroscopy. 2004. Vol. 102. P. 51–59.
- [11] *Klapetek P., Ohlidal I.* // Acta Physica Slovaca. 2005. Vol. 55. P. 295–303.
- [12] *Memnonov V.P.* // Ed. by B. Chetverushkin, A. Ecer. Parallel Computational Fluid Dynamics-Advance Numerical Methods, Software and Applications. Amsterdam: Elsevir, 2004. P. 89–96.
- [13] *Jiand J.-Z., Shen C., Fan J.* // Ed. by M. Capitelli. 24<sup>th</sup> Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. AIP Conf. Proc. 762, N.Y.: AIP, 2004. P. 180–185.
- [14] *Wu J.-S., Tseng K.-C.* // Ed. by T.J. Bartel, M.A. Gallis. Rarefied Gas Dynamics. Proc. 22d. Int. Sydney 2000, AIP Conf. Proc. 585, N.Y.: AIP, 2001. P. 486–493.
- [15] *Хусу А.П., Виттенберг Ю.Р., Пальмов В.А.* Шероховатость поверхностей, теоретико-вероятностный подход. М.: Наука, 1975. 343 с.
- [16] *Кнут Д.* Искусство программирования для ЭВМ. М.: Мир, 1978. Т. 3. 841 с.