

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ПОДЛОЖКИ НА ЗАКОНОМЕРНОСТИ РАСТЕКАНИЯ: МД МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ

Проценко П.В., Тимошенко В.А., Боченков В.Е.

*Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, кафедра коллоидной химии,
кафедра химической кинетики*

Влияние кристаллографической ориентации подложки на скорость химических реакций, протекающих на границе раздела фаз, широко известно. Например процесс анизотропного травления монокристаллического кремния широко применяется при создании микроэлектронных устройств (MEMS).

В литературе имеются данные о влиянии ориентации подложки на краевой угол смачивания – при смачивании собственным расплавом краевой угол увеличивается с увеличением плотности упаковки атомов в поверхностном слое [1]. Систематические исследования влияния ориентации подложки на скорость растекания не проводились.

Целью данной работы является анализ влияния ориентации плоскости поверхности подложки на закономерности растекания и краевой угол смачивания в (i) системе монокристаллы Si (ориентация подложки 001 и 111) – равновесный расплав Cu-Si и расплав чистой меди экспериментально в вакууме при 1100 °С и в (ii) системах монокристаллы Cu (ориентация подложки 001 и 111) – расплав Pb методом молекулярной динамики с использованием программного пакета LAMMPS.

Показано, что ориентация кремниевой подложки влияет на смачивание только в случае использования чистой меди, когда одновременно происходят растекание и растворении материала подложки в расплаве. В работе обсуждается влияние ориентации на работу адгезии (рассчитанную по уравнению Дюпре) и на величины энергий границ раздела твердое/газ и твердое/расплав (рассчитаны в рамках модели, учитывающей взаимодействия в первой координационной сфере и по данным молекулярно динамического моделирования).

[1] Yu. V. Naidich, N. F. Grigorenko and V. M. Perevertailo. Journal of Crystal Growth Vol. 53, Iss. 2, 1981, pp. 261-272