

## Новое явное решение уравнения Кардара – Паризи – Цванга и его применения\*

**А. Э. Рассадин<sup>1</sup>, А. В. Степанов<sup>2</sup>, Л. А. Фомин<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> член Правления, Нижегородское математическое общество. Россия, г. Нижний Новгород.

ORCID: 0000-0002-7396-0112. E-mail: brat\_ras@list.ru

<sup>2</sup> кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры математики, физики и информационных технологий инженерного факультета, Чувашская государственная сельскохозяйственная академия.

Россия, г. Чебоксары. ORCID: 0000-0003-4306-1199. E-mail: for.antonstep@gmail.com

<sup>3</sup> кандидат физико-математических наук, научный сотрудник,

Институт проблем технологий микроэлектроники и обособленных материалов РАН.

Россия, г. Черноголовка. E-mail: fomin@iptm.ru

**Аннотация.** В настоящее время во всем мире проявляется значительный интерес к методам исследования нано- и микроповерхностей, применимым для проектирования нано- и микроматериалов с наперед заданными физическими и физико-химическими свойствами. Практическая реализация такой наноинженерии настоятельно требует осуществления междисциплинарной стыковки теоретических подходов к описанию роста нано- и микроструктур и методов экспериментального изучения последних, в первую очередь с помощью атомной силовой микроскопии, с современным уровнем развития методов вычислительной математики и информационных технологий. В данной работе проведено теоретическое исследование одной модели эпитаксиальной технологии, учитывающей как прилипание осаждающихся частиц вещества к поверхности твердого тела, так и их перемещение по ней при ее росте. На основе этой модели предложен новый численно-аналитический метод определения формы шероховатого интерфейса, пригодный в том числе и для описания пространственно-временной эволюции его фрактальных начальных неоднородностей.

**Ключевые слова:** разделение переменных, ряд Фурье, сеточная функция, поверхность с цилиндрической образующей, регуляризованный фрактальный профиль.

### Введение

Хорошо известно, что одним из основных факторов, определяющих качество элементной базы радиоэлектроники, являются интерфейсные характеристики микроэлектронных материалов, поэтому большое прикладное значение имеет изучение различных моделей роста поверхности твердого тела.

К числу первых моделей такого сорта относится феноменологическая модель Кардара – Паризи – Цванга (КПЦ) [5], которая, несмотря на свою видимую простоту, и по сей день остается объектом интенсивных исследований [4]. В частности, в докладе [2] было описано явное решение для (1+1)D-поверхности, т. е. поверхности с цилиндрической образующей, для косинусоидального начального профиля.

Данная работа имеет следующую структуру: в части 1 представлено построение нового явного решения уравнения КПЦ для периодического начального профиля (1+1)D-поверхности. В части 2 на основе этого решения получено точное решение уравнения КПЦ для 2D-поверхности, а также развита теория возмущений для двумерного уравнения КПЦ на фоне этого решения и предложен численный метод для решения уравнения первого приближения этой теории. В Заключение суммированы полученные результаты и обсуждены перспективы дальнейших исследований.

### 1. Явное решение уравнения КПЦ для (1+1)D-поверхности

Рассмотрим следующую задачу Коши для уравнения КПЦ в малоугловом приближении [5]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{c}{2} \cdot \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \nu \cdot \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}, \quad h(x,0) = h_0(x), \quad x \in R. \quad (1)$$

В уравнении (1)  $c$  – скорость роста поверхности в направлении ее локальной нормали,  $\nu$  характеризует темп поверхностной диффузии вещества, а функция  $h(x,t)$  связана с высотой  $z$  соотношением:  $z = c \cdot t + h(x,t)$ . Отсутствие зависимости от переменной  $y$  обусловлено предположением о трансляционной инвариантности процесса роста относительно этой оси, т. е. наличием у растущей поверхности цилиндрической образующей.

---

\* Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 18-08-01356-а.  
© Рассадин А. Э., Степанов А. В., Фомин Л. А., 2018

Далее, поскольку твердое тело обладает кристаллической структурой, то в задаче Коши (1) естественно рассматривать периодические начальные условия с пространственным периодом  $a$ , совпадающим с постоянной решетки материала подложки:

$$h_0(x+a) = h_0(x), \quad (2)$$

поэтому решение уравнения (1) можно искать в виде ряда Фурье:

$$h(x,t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} h_n(t) \cdot \exp(i \cdot k_0 \cdot n \cdot x), \quad h_{-n}(t) = h_n^*(t), \quad k_0 = \frac{2 \cdot \pi}{a}. \quad (3)$$

Подставляя разложение (3) в исходное уравнение КПЦ (1), получим следующую бесконечномерную систему обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ):

$$\frac{dh_n(t)}{dt} = -v \cdot n^2 \cdot k_0^2 \cdot h_n(t) - \frac{c \cdot k_0^2}{2} \cdot \sum_{l=-\infty}^{+\infty} l \cdot (n-l) \cdot h_l(t) \cdot h_{n-l}(t), \quad (4)$$

начальными условиями для которой служат коэффициенты разложения в ряд Фурье начального профиля (2):

$$h_n(0) = \frac{1}{a} \cdot \int_0^a h_0(x) \cdot \exp(-i \cdot k_0 \cdot n \cdot x) \cdot dx. \quad (5)$$

Система уравнений (4) нелинейна и потому очень сложна. Тем не менее можно указать такой бесконечномерный вектор ее начальных условий (5), при котором она решится точно, а именно, рассмотрим следующее начальное условие для исходного уравнения (1):

$$h_0(x) = \frac{2 \cdot v}{c} \cdot \ln[1 + m_0 \cdot \cos(k_0 \cdot x)], \quad 0 < m_0 < 1. \quad (6)$$

Выбор такого начального условия продиктован как требованием (2) его периодичности, так и видом подстановки [4, 5]:

$$h(x,t) = \frac{2 \cdot v}{c} \cdot \ln \varphi(x,t), \quad (7)$$

которая приводит нелинейное уравнение КПЦ (1) к линейному уравнению диффузии-теплопроводности:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = v \cdot \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}. \quad (8)$$

Из формул (6) и (7) вытекает, что начальное условие для уравнения (8) есть:

$$\varphi_0(x) = 1 + m_0 \cdot \cos(k_0 \cdot x). \quad (9)$$

Легко убедиться в том, что решение задачи Коши (8)–(9) имеет вид:

$$\varphi(x,t) = 1 + m(t) \cdot \cos(k_0 \cdot x), \quad (10)$$

где

$$m(t) = m_0 \cdot \exp(-v \cdot k_0^2 \cdot t). \quad (11)$$

Отсюда следует, что решение уравнения КПЦ (1) с начальным условием (6) запишется следующим образом:

$$h(x,t) = \frac{2 \cdot v}{c} \cdot \ln[1 + m(t) \cdot \cos(k_0 \cdot x)]. \quad (12)$$

Графики зависимости безразмерной высоты поверхности  $c \cdot h/v$  от безразмерной координаты  $x/a$  в различные моменты безразмерного времени  $v \cdot k_0^2 \cdot t$  представлены на рис. 1. Они соответствуют значению «глубины модуляции»  $m_0$  начального условия (6), равному 0,7.

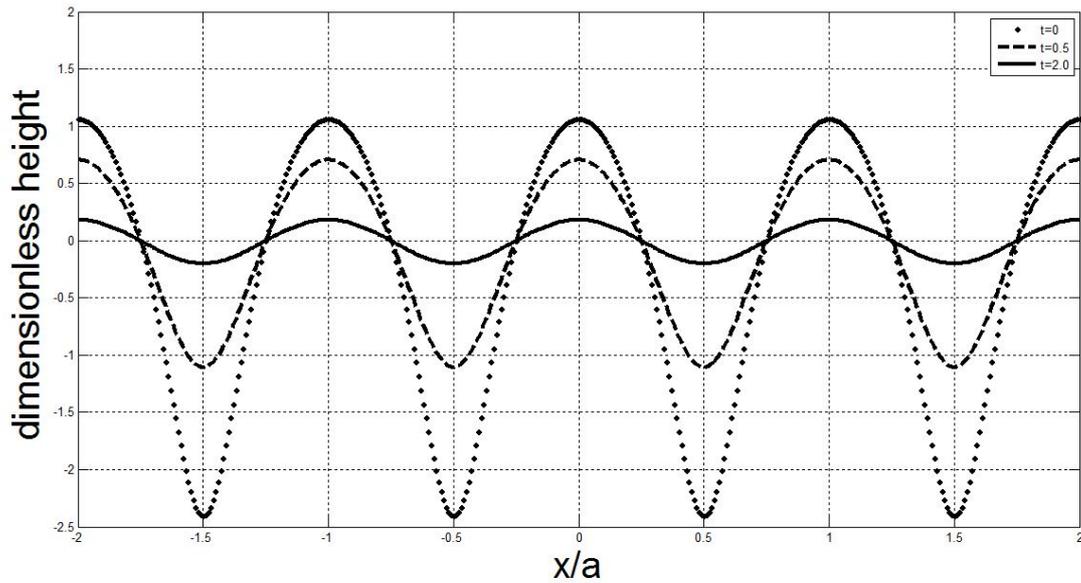


Рис. 1. Временная эволюция высоты (1+1)D-поверхности

Из формулы (12) видно, что  $h(x + a, t) = h(x, t)$ , поэтому для найденного нами явного решения уравнения КПЦ (1) должно быть справедливо разложение (3). Для того чтобы установить его коэффициенты, вспомним известный [1] ряд Фурье:

$$\ln(1 + r^2 + 2 \cdot r \cdot \cos\theta) = 2 \cdot \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \cdot \frac{r^n}{n} \cdot \cos(n \cdot \theta), \quad |r| < 1. \quad (13)$$

Таким образом, сравнивая формулы (12) и (13), найдем, что функция (12) раскладывается в ряд Фурье (3) со следующими коэффициентами:

$$h_0(t) = -\frac{2 \cdot v}{c} \cdot \ln[1 + r^2(t)], \quad h_n(t) = \frac{2 \cdot v}{c} \cdot (-1)^{n+1} \cdot \frac{r^n(t)}{n}, \quad n \in N, \quad (14)$$

где  $r(t) = \frac{1 - \sqrt{1 - m^2(t)}}{m(t)}$  – решение квадратного уравнения  $\frac{2 \cdot r(t)}{1 + r^2(t)} = m(t)$ , меньшее единицы.

Функции времени (14), очевидно, являются точными решениями бесконечномерной системы ОДУ (4). Графики зависимостей первых трех безразмерных коэффициентов  $c \cdot h_n / v$  разложения (3) от безразмерного времени (при  $m_0 = 0,7$ ) приведены на рис. 2.

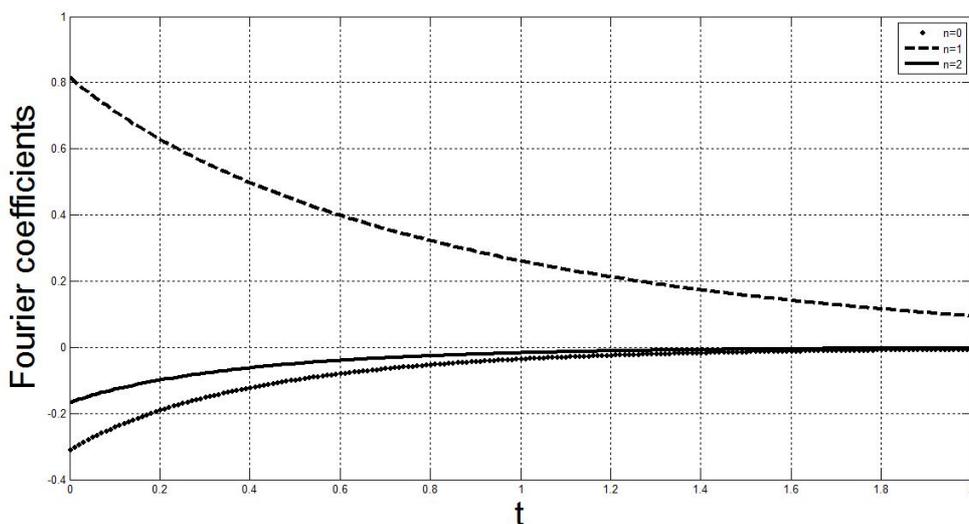


Рис. 2. Временная эволюция коэффициентов ряда Фурье для одномерного уравнения КПЦ

При  $t \gg (v \cdot k_0^2)^{-1}$  величина (11) становится очень малой, поэтому логарифм в формуле (12) можно разложить в ряд Тейлора, т. е.:

$$h(x, t) \approx \frac{2 \cdot v}{c} \cdot m(t) \cdot \cos(k_0 \cdot x). \quad (15)$$

Выражение (15) означает, что на больших временах все неоднородности поверхности сглаживаются.

## 2. Явное решение уравнения КПЦ для 2D-поверхности и его применения

Очевидно, что на практике гораздо более реалистичной является ситуация, когда начальный профиль поверхности твердого тела является не поверхностью с цилиндрической образующей, а поверхностью общего положения. В этом случае рост поверхности описывается двумерным вариантом уравнения КПЦ [5; 6]:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{c}{2} \cdot \left[ \left( \frac{\partial H}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial H}{\partial y} \right)^2 \right] + v \cdot \left( \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} \right). \quad (16)$$

Выберем для уравнения (16) следующее начальное условие:

$$H_0(x, y) = \frac{2 \cdot v}{c} \cdot \ln[1 + m_0 \cdot \cos(k_0 \cdot x)] + \frac{2 \cdot v}{c} \cdot \ln[1 + m_0 \cdot \cos(k_0 \cdot y)]. \quad (17)$$

График этой функции при  $m_0 = 0,7$  приведен на рис. 3.

Как указано в докладе [2], в таких случаях, несмотря на нелинейность уравнения КПЦ (16), для него справедлив специфический вариант метода разделения переменных, а именно, его точное решение, соответствующее начальному условию (17), есть:

$$H(x, y, t) = \frac{2 \cdot v}{c} \cdot \ln[1 + m(t) \cdot \cos(k_0 \cdot x)] + \frac{2 \cdot v}{c} \cdot \ln[1 + m(t) \cdot \cos(k_0 \cdot y)]. \quad (18)$$

Это явное решение можно трактовать как поверхность кристалла кубической симметрии, растущую в направлении одного из ребер кристаллической ячейки. Более того, на основе этого решения можно продвинуться в решении следующей задачи.

Учтем при описании роста такой поверхности находящийся вблизи нее дополнительный источник частиц  $\mu \cdot F(x, y, t)$  [5]:

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{c}{2} \cdot \left[ \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial h}{\partial y} \right)^2 \right] + v \cdot \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) + \mu \cdot F(x, y, t) \quad (19)$$

и зададим начальное условие к уравнению КПЦ (19) в виде:

$$h_0(x, y) = H_0(x, y) + \mu \cdot u_0(x, y). \quad (20)$$

Далее, будем считать, что  $\mu$  – малый параметр:  $0 < \mu \ll 1$ , а  $H_0(x, y)$  – профиль (17). Таким образом, начальное условие (20) есть «испорченный» малой добавкой  $\mu \cdot u_0(x, y)$  профиль, представленный на рис. 3.

В этом случае решение уравнения КПЦ (19) целесообразно искать в виде асимптотического ряда по степеням малого параметра  $\mu$ :

$$h(x, y, t) = H(x, y, t) + \mu \cdot u(x, y, t) + \dots, \quad (21)$$

в котором в качестве нулевого приближения взято выражение (18).

Тогда первое приближение  $u(x, y, t)$  будет подчиняться следующему линейному уравнению в частных производных:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + V(x, t) \cdot \frac{\partial u}{\partial x} + V(y, t) \cdot \frac{\partial u}{\partial y} = v \cdot \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + F(x, y, t) \quad (22)$$

с начальным условием:

$$u(x, y, 0) = u_0(x, y), \quad (23)$$

где функция

$$V(x, t) = -c \cdot \frac{\partial h(x, t)}{\partial x} \equiv \frac{2 \cdot v \cdot k_0 \cdot m(t) \cdot \sin(k_0 \cdot x)}{1 + m(t) \cdot \cos(k_0 \cdot x)}. \quad (24)$$

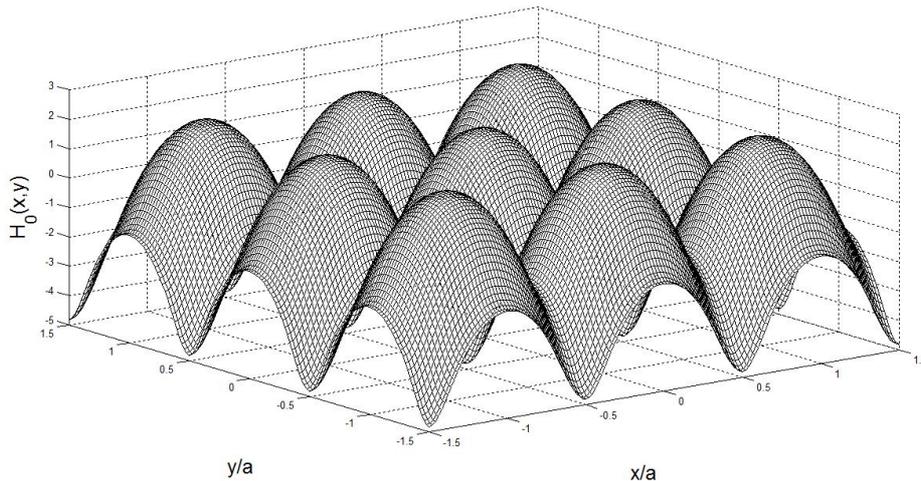


Рис. 3. Начальное условие для двумерного уравнения КПЦ

Задача Коши (22)–(24) из-за переменности ее коэффициентов (24) может быть решена только численно.

Выберем натуральное число  $L$  и рассмотрим замкнутый квадрат  $\bar{\Pi} = [-L \cdot a, L \cdot a] \times [-L \cdot a, L \cdot a]$ . При  $L \gg 1$  он содержит много элементарных ячеек кубической кристаллической решетки. Зададим в этом квадрате сетку с шагом  $\Delta$ :  $x_k = k \cdot \Delta$ ,  $y_m = m \cdot \Delta$ , введем разбиение по времени  $t_j = j \cdot \tau$  с шагом  $\tau$  и определим сеточные функции  $u_{km}^j \equiv u(x_k, y_m, t_j)$ ,  $F_{km}^j \equiv F(x_k, y_m, t_j)$  и  $v_k^j \equiv v(x_k, t_j)$ , тогда решение уравнения (22) может быть найдено с помощью обобщения метода дробных шагов [3]:

$$\frac{u_{km}^{j+\frac{1}{2}} - u_{km}^j}{\tau/2} + \hat{\Lambda}_x u_{km}^{j+\frac{1}{2}} + \hat{\Lambda}_y u_{km}^j = F_{km}^j, \quad \frac{u_{km}^{j+1} - u_{km}^{j+\frac{1}{2}}}{\tau/2} + \hat{\Lambda}_x u_{km}^{j+\frac{1}{2}} + \hat{\Lambda}_y u_{km}^{j+1} = F_{km}^{j+\frac{1}{2}}, \quad (25)$$

где разностные операторы  $\hat{\Lambda}_x$  и  $\hat{\Lambda}_y$  есть:

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}_x u_{km}^j &\equiv v_k^j \cdot \frac{u_{k+1,m}^j - u_{k-1,m}^j}{2 \cdot \Delta} - v \cdot \frac{u_{k+1,m}^j - 2 \cdot u_{km}^j + u_{k-1,m}^j}{\Delta^2}, \\ \hat{\Lambda}_y u_{km}^j &\equiv v_m^j \cdot \frac{u_{k,m+1}^j - u_{k,m-1}^j}{2 \cdot \Delta} - v \cdot \frac{u_{k,m+1}^j - 2 \cdot u_{km}^j + u_{k,m-1}^j}{\Delta^2}. \end{aligned} \quad (26)$$

Системы линейных уравнений в (25) решаются методом прогонки [3].

### Заключение

В представленной работе получены явные решения одномерного и двумерного уравнений КПЦ. При условии определения способа задания граничного условия  $u(x, y, t)|_{\text{от}}$  к уравнению (22) эти решения с помощью разностной схемы (25)–(26) могут быть положены в основу численно-аналитического метода исследования роста шероховатой поверхности твердого тела.

Сведение уравнения КПЦ (1) к бесконечномерной системе ОДУ (4) также представляет значительный интерес для изучения растущей поверхности с цилиндрической образующей, а именно, если начальный профиль такой поверхности задается тригонометрическим полиномом порядка  $N$ , то бесконечномерная система (4) редуцируется к конечномерной системе ОДУ с размерностью фазового пространства, равной  $2 \cdot N + 1$ . Очевидно, что в эту схему вкладываются и усеченные лакунарные тригонометрические ряды, которыми задаются регуляризованные фрактальные профили поверхности [6]. Однако необходимо отметить, что повышение точности приближения фрактала таким рядом ведет к повышению порядка тригонометрического полинома  $N$ , т. е. размерности фазового пространства, и для численного исследования конечномерной системы ОДУ в этой ситуации нужно будет использовать параллельные вычисления на суперЭВМ.

Результаты применения этих методов к анализу реальных поверхностей перспективных материалов микроэлектроники могут быть проверены экспериментально с помощью атомной сило-

вой микроскопии [6], а внедрение описанных в данной статье подходов в отечественное микроэлектронное производство приведет к заметному улучшению качества элементной базы отечественной радиоэлектроники.

### Список литературы

1. Кудрявцев Л. Д. Курс математического анализа : учеб. для студ. ун-тов и вузов : в 3 т. Т. 3. М. : Высш. шк., 1989. 352 с.
2. Рассадин А. Э. О рассеянии электромагнитных волн на динамических подстилающих поверхностях // Всероссийская ежегодная научно-техническая конференция «Общество, наука, инновации» (НТК-2012) : сб. материалов: Общеуниверситетская секция, БФ, ГФ, ФЭМ, ФАВТ, ФАМ, ФПМТ, ФСА, ХФ, ЭТФ / отв. ред. С. Г. Литвинец. Киров : ВятГУ, 2012. С. 1362–1366.
3. Яненко Н. Н. Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск : Наука, 1967. 197 с.
4. Gubinelli M., Perkowski N. KPZ Reloaded // Communications in Mathematical Physics. 2017. V. 349. № 1. P. 165–269.
5. Kardar M., Parisi G., Zhang Y. C. Dynamical scaling of growing interfaces // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 889–892.
6. Rassadin A. E. et al. Model for growth of fractal solid state surface and possibility of its verification by means of atomic force microscopy // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2017. V. 256. № 012026. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/256/1/012026>. 10 p. (дата обращения: 11.02.2018).

## New explicit solution of the Kardar – Parisi – Zhang equation and its application

A. E. Rassadin<sup>1</sup>, A. V. Stepanov<sup>2</sup>, L. A. Fomin<sup>3</sup>

<sup>1</sup> member of the Board of Nizhny Novgorod mathematical society. Russia, Nizhny Novgorod.

ORCID: 0000-0002-7396-0112. E-mail: brat\_ras@list.ru

<sup>2</sup> PhD of physical and mathematical sciences, senior lecturer of the Department of mathematics, physics and information technology, faculty of engineering, Chuvash State Agricultural Academy. Russia, Cheboksary.

ORCID: 0000-0003-4306-1199. E-mail: for.antonstep@gmail.com

<sup>3</sup> PhD of physical and mathematical sciences, researcher, Institute of problems of microelectronics technology and high purity materials of Russian Academy of Sciences. Russia, Chernogolovka. E-mail: fomin@iptm.ru

**Abstract:** At present all over the world considerable interest is shown in methods of investigation of nano- and microscales applicable to design of nano- and micromaterials with preassigned physical and physicochemical properties. Putting such nanoengineering into practice insistently requires realization of interdisciplinary joining of theoretical approaches to description of growth of nano- and microstructures and methods of its experimental research at first by means of atomic force microscopy with contemporary level of development of computational mathematics and information technologies. In the work presented theoretical investigation of one model of epitaxial technology is carried out. This model takes into account both adhesion of particles of falling out substance to surface of solid state and their transfer along the surface under its growth. On the basis of the model new numerically-analytical method for determination of shape of rough interface has been proposed. The method is also admissible for description of spatially-temporal evolution of fractal initial inhomogeneities of the interface.

**Keywords:** separation of variables, Fourier series, mesh function, surface with cylindrical generatrix, regularized fractal shape.

### References

1. Kudryavcev L. D. Kurs matematicheskogo analiza : ucheb. dlya stud. un-ov i vuzov : v 3 t. T. 3 [Course of mathematical analysis : textbook for students of universities and high schools: in 3 vol. Vol. 3]. M. Vyssh. shk. 1989. 352 p.
2. Rassadin A. E. O rasseyanii elektromagnitnykh voln na dinamicheskikh podstilyayushchih poverhnostyakh [On the scattering electromagnetic waves on the dynamic of the underlying surfaces] // Vserossiyskaya ezhegodnaya nauchno-tekhnicheskaya konferenciya «Obshchestvo, nauka, innovacii» (NTK-2012) : sb. materialov: Obshcheuniversitetskaya sekcija, BF, GF, FEHM, FAVT, FAM, FPMT, FSA, HF, EHTF - All-Russian annual scientific and technical conference "Society, science, innovation" (ITC-2012): materials: the All-University section, BF, GF, FEM, FACT, FAM, FAMT, FBA, ChF, ETF / resp. ed. S. G. Litvinets. Kirov. VyatSU. 2012. Pp. 1362–1366.
3. Yanenko N. N. Metod drobnnykh shagov resheniya mnogomernykh zadach matematicheskoy fiziki [The method of fractional steps for solving multidimensional problems of mathematical physics]. Novosibirsk. Nauka. 1967. 197 p.
4. Gubinelli M., Perkowski N. KPZ Reloaded // Communications in Mathematical Physics. 2017. V. 349. № 1. P. 165–269.
5. Kardar M., Parisi G., Zhang Y. C. Dynamical scaling of growing interfaces // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 889–892.
6. Rassadin A. E. et al. Model for growth of fractal solid state surface and possibility of its verification by means of atomic force microscopy // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2017. V. 256. № 012026. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/256/1/012026>. 10 p. (date accessed: 11.02.2018).