

УДК 621.315.592

Н.В. Бодягин, С.П. Вихров

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ЭВОЛЮЦИИ ТЕХНОЛОГИЙ МАТЕРИАЛОВ

Изложены аспекты теории сложных систем и самоорганизации применительно к технологиям материалов для микро- и нанoeлектроники. Обоснованы новые методы устранения существующих проблем современного материаловедения. Разработаны принципы построения новых технологических систем синтеза материалов для микро- и нанoeлектроники с заданными свойствами.

Ключевые слова: *сложные системы, самоорганизация, бифуркация, технологические системы, неупорядоченные полупроводники.*

Введение. Технологии, в том числе и технологии материалов, есть обусловленные состоянием знаний и общественной эффективностью способы достижения целей, поставленных обществом, в том числе и таких, которые никто, приступая к делу, не имел в виду.

Технологии материалов (ТМ) – это интеллектуальная система, в центре которой находится человек. ТМ представляют собой определенные области соприкосновения Человека и Природы в процессе его целенаправленной деятельности [1].

Технологии материалов – это продукты эволюции процесса познания Природы и подражания ей. Технологические методы – это, как правило, определенные процессы, вычлененные из Природы и искусственно изолированные от нее.

Они появляются как результат новой, удачной и полезной, с точки зрения человека, комбинации потоков энергии и вещества, сочетаемых в разных пропорциях.

Новые технологии возникают как результат колебаний гомеостатического равновесия. Они зарождаются в старых и сначала походят на них. Но они уже содержат "нечто", в корне отличающее их от старых технологий. Далее, убедительно доказав свое превосходство, они вытесняют старые технологии.

Следует отметить важное обстоятельство. Как правило, ТМ не возникают как результат воплощения целевого замысла человека. Они часто всего лишь побочный результат каких-либо целенаправленных его действий, не имеющих прямой целью создание именно этой технологии.

Современные ТМ переживают глубокий кризис. Как не парадоксально, но именно

впечатляющие успехи технологий, расходуемых колоссальные количества вещества, энергии и интеллекта и изменивших за короткий срок облик человеческого бытия и Земли, и есть свидетельство этого кризиса.

Базовые процессы большинства современных ТМ протекают в условиях, максимально приближенных к равновесным, в которых возникают состояния веществ в основном уже реализованные в Природе за время длительной эволюции (например, кристаллы). Однако технологические приемы, направленные на обеспечение условий максимальной изоляции процессов синтеза, позволяют получать материалы с чистотой нереализуемой в Природе. Это их главное отличие от естественных минералов. Но число состояний равновесия для химических элементов и их комбинаций, существующих в земных условиях, принципиально ограничено. Это всего лишь частные и нехарактерные образования среди множества возможных форм вещества, реализующихся в неравновесных эволюционных процессах. Поэтому технологии, использующие их в качестве рабочих режимов, с неизбежностью достигают как насыщения в увеличении качества конечного продукта, присущего любой технологии, но прежде всего количественного предела, т.е. ограничены в возможности производства принципиально новых материалов. Кризис современных ТМ связан именно с этим фактором. Число и свойства материалов, синтезированных в равновесных условиях, оказались в основном исчерпаны [2].

Современные технологии выглядят неуместно и нелепо на фоне живой клетки, естественно встроенной в Природу и обла-

дающей невероятными возможностями и эффективностью при относительно небольшом числе составляющих элементов. Существующие технологии материалов и устройств, искусственно упрощенные по сравнению с природными процессами, несмотря на масштабность, не смогли дать аналогичного сложного результата. Вместе с тем человечество имеет потенциально равные с клеткой возможности использования тех же компонентов. Кризис современных технологий есть результат простых решений в системах с большой сложностью. Дальнейший прогресс технологий невозможен без знаний о явлениях чрезвычайно сложных, как например появление жизни.

Некоторые прогнозы все же возможны из-за своей безальтернативности и очевидности.

1. Принципиальным для будущих технологий будет осознание их генетического сходства с биосистемами. И те и другие обладают сопоставимым числом степеней свободы и подобными динамическими закономерностями. По своей сути обе группы являются самоорганизующимися системами. А таким системам, как целому, свойственны явления "прогресса", то есть возрастания эффективности гомеостаза, стремящегося к ультрастабильному равновесию как к своей непосредственной цели. Поэтому технологии будущего вряд ли принципиально будут отличаться от процессов в биосистемах, сумевших извлечь максимум "содержания" из их составных элементов.

Принципиально важно, что экологически чистота, связанная с энергосбережением, минимальным влиянием на существующую Природу, может быть реализована только в технологиях, использующих принципы сложных естественных систем, находящихся в гармоничном "резонансе" с окружающей средой.

До сих пор техническая эволюция двигалась в направлении как бы обратном биологическому, создавая исключительно устройства узкой специализации. Достижение универсальности лежит, по-видимому, на пути дальнейшего развития теории самоорганизующихся систем, способных к самопрограммированию. Функциональное сходство таких систем с человеком не является, конечно, случайным [1].

2. Эволюция ТМ идет в направлении от использования состояний равновесия или близких к нему к процессам в неравновесных и сильнонеравновесных условиях, т.е. от изолированных систем, реализующих искусственную

простоту, к открытым системам с нормальной сложностью.

Ростки принципиально новых неравновесных технологий интенсивно прорастают в современных ТМ (сверхбыстрые термические обработки, ионные потоки, лучевые обработки и т.д.). Будущие неравновесные ТМ будут пронизывать все масштабы человеческой практики: от космологических до нанодиапазона и ниже.

Проблемы технологий. Традиционно под проблемами технологий обычно имеют в виду явления, которые, с точки зрения человека, ухудшают результат его деятельности. Однако такое определение не обладает положительным потенциалом для их эффективного решения. Во-первых, в нем не обозначается роль самого человека как носителя проблем, во-вторых, оно связывает проблемы прежде всего с практикой, а не с познавательной деятельностью. Поэтому стоит переосмыслить и переформулировать эту внешне простую задачу.

Если проанализировать технологии различных материалов, то несмотря на все многообразие и непохожесть, несложно обнаружить, что ряд проблем является общим для них.

- В структуре выращенных материалов всегда присутствуют различные структурно-химические неоднородности. Их размеры могут значительно превышать межатомные расстояния, а происхождение неочевидно с точки зрения внутренних связей, составляющих их элементы, т.е. они не могут быть выведены даже из точно известных характеристик этих элементов. Это дислокации, зерна, дефекты, поры и т.д.

- Индивидуальность вещества, т.е. невоспроизводимость свойств от процесса к процессу, которая практически всегда воспринимается как негативное явление. Однако оно зачастую не есть следствие неквалифицированности технологов или разработчиков аппаратуры или недостаточной точности регулирования поступающих в систему материально-энергетических потоков.

- Небольшое улучшение свойств требует геометрически возрастающего количества затрат или вообще невозможно.

- Для нахождения оптимальной области технологических параметров (отработки технологии) как правило, затрачивается очень много времени и значительные средства.

Исходя из этой простой игровой схемы [2], все проблемы технологий можно разделить на две принципиально разные группы:

- проблемы, связанные с трудностями

регулировки материально-энергетических потоков, обеспечивающих протекание процессов роста (проблемы первого рода);

- проблемы второго типа возникают из-за несоответствия когнитивных уровней человека и Природы или, другими словами, из-за столкновения с новым, неожиданным и непонятным иерархическим уровнем, рожденным в процессе эволюции вещества в технологическом цикле. Это означает несоответствие интуитивных ожиданий и, как следствие, управляющих воздействий сложному коллективному поведению вещества. На языке динамики такая ситуация трактуется как невозможность сжатия, моделирования динамики наблюдаемой системы [3, 4].

Проблемы второго рода ответственны за "антиинтуитивные эффекты". Эта ситуация удачно описана И. Пригожиным [4]: "Очень часто отклик системы на возмущение оказывается противоположным тому, что подсказывает нам интуиция. Наше состояние обманутых ожиданий в этой ситуации хорошо отражает принцип "антиинтуитивности". Эта проклятая штука ведет себя не так, как должна была вести. Единственной специфической особенностью сложных систем (СС) является то, что знание о них ограничено и неопределенность со временем возрастает". Это означает, что в данной ситуации невозможно определить пути и предсказать итоги эволюции вещества.

"Антиинтуитивность" проблем технологий обусловлена тем, что мы не в состоянии предугадать результат влияния на исход процесса множества существенных параметров. В равновесных условиях таких параметров немного, и в этом смысле их влияние можно учесть и соответственно управлять ими. Этот факт предопределил успех равновесных процессов в технологиях материалов на данной стадии их развития. Чем больше степень отклонения от равновесия, тем большее число существенных переменных возникает в системе, тем сложнее описать и спрогнозировать ее поведение. Наличие проблем такого рода означает необходимость пересмотра существующих представлений о процессах эволюции вещества в технологиях и разработки адекватных им принципов управления. Причем именно решение проблем второго рода обеспечивает кардинальный прогресс в управлении свойствами и создании новых материалов. Использование принципов самоорганизации в живой клетке, обеспечивающих высочайшую эффективность ее функционирования, откры-

вает новую перспективу в технологиях.

То, что совершенно непохожие технологии имеют одинаковые проблемы не столь удивительно, а свидетельствует о том, что во всех них есть нечто общее, ответственное за эти проблемы. Другими словами, всегда существуют некие пространственно-временные области, где вещество обнаруживает собственные свойства, несоответствующие теоретическим представлениям о росте и не предусмотренные заранее управляющими параметрами технологии и, как следствие, неуправляемые ими. Выявление этих областей или, другими словами, локализация проблем технологий позволит обнаружить и описать процессы, для которых и должна решаться задача эффективного управления.

Промежуточный слой (ПС) - это неустойчивая фаза вещества с собственными сложными коллективными свойствами, принципиально отличающимися от свойств объемов исходных (жидких, газообразных) и образующихся (твердых) фаз [2].

Источником проблем технологий, по-видимому, являются особые свойства вещества в ПС между устойчивыми фазами: жидкой (газообразной) и твердой. Возникающие трудности являются следствием использования методов управления, не соответствующих собственным коллективным свойствам. При этом точность задания управляющих параметров технологий не является достаточным условием для эффективного управления системой в целом [6].

То, что даже у самых эффективных технологий есть проблемы – факт вполне очевидный. Однако мы хотим показать, что их существование означает, что мы имеем дело с явлениями, которые по своей природе намного глубже и фундаментальнее, чем наши представления о них. А представления эти порождают примитивно-линейный диктаторский подход в обращении с веществом, который малоэффективен и совершенно не экологичен. Это означает, что истинный КПД нашей технологической деятельности очень невелик. Из вышесказанного можно сделать следующие выводы.

1. Проблемы технологий отражаются в сознании человека как проявление сложного непредсказуемого поведения вещества в условиях синтеза, поведения, в котором важны очень многие параметры.

2. Причинами проблем технологий являются: неустановленные взаимосвязи между управляющими воздействиями, свойствами вещества, возникающими в процессе образования твердотельной структуры, и свойствами

получаемого материала. Как следствие, отсутствуют осмысленные алгоритмы оптимизации технологий и подбора наиболее эффективных способов управления, не используется непосредственная обратная связь между процессами в реакционном объеме (особо это касается ПС) и системой управления и т.д.

3. Создание принципиально новых технологий и материалов будет достигнуто через смену фундаментальных представлений об эволюционных возможностях неживой материи и их использовании в технологической практике. Однако этот процесс довольно сложный и инерционный. Это связано с устройством психики человека и прежде всего ее бессознательного начала, которое вопреки нашему тщеславию о свободе воли все же доминирует в наших действиях и мыслях. Эта ситуация всегда заставляет с собой считаться.

Основы теории сложных систем. Сложность в Природе невозможно свести к некоторому всеобщему принципу глобальной оптимальности. В своей погоне за сложностью Природа занимает более прагматическую позицию, в которой существенную роль играет поиск устойчивости [2]. Образование сложной структуры или сложное поведение соответствуют состоянию ультрастабильного равновесия в условиях, наложенных на систему. Ни в каких других формах данная система в данных условиях существовать не может. Это означает, что система и ее окружение стремятся сохранить себя как некие псевдосамостоятельные образования через взаимную адаптацию. Сложность, в этом плане, проявляется как способность (возможность) системы удержаться в определенной конфигурации посредством сложного многофакторного взаимодействия с окружающей средой. Конфигурацию можно определить как систему взаимосвязанных элементов, занимающих определенное положение в пространстве и времени. Простые системы, т.е. находящиеся в условиях, близких к равновесию, в стремлении обрести устойчивость также стремятся к равновесному состоянию. И это возможно означает существование некоего универсального финиша для всех типов изменений в природе.

С физической точки зрения для возникновения сложного поведения необходимыми и достаточными условиями являются следующие [7].

Термодинамическая открытость. Имеется в виду, что система обменивается энергией, веществом, информацией с окружающей средой, и поддерживает само ее существование.

Сильнонеравновесные условия. Под неравновесным обычно понимают состояние, в котором с ненулевыми скоростями идут необратимые процессы диссипации.

Неустойчивость. Когда термодинамические силы, действующие на систему, становятся достаточно большими и вынуждают ее покинуть устойчивую линейную область, гарантировать устойчивость стационарного состояния становится невозможным. Флуктуации вместо того, чтобы затухать, усиливаются и распространяются на всю систему, вынуждая ее эволюционировать к новому состоянию, которое может быть качественно отличным от стационарных состояний, соответствующих минимуму производства энтропии.

При наличии всех перечисленных этих условий, наложенных на систему она переходит в качественно новое упорядоченное самоорганизованное состояние [8].

Динамическая теория такого рода переходов в качественном виде была разработана И. Пригожиным. Она пригодна для описания большого числа переходов в физико-химических системах. Рассмотрим кратко ее основные положения.

В общем виде поведение системы, характеризуемое какой-либо переменной, в зависимости от некоторого управляющего параметра можно представить в виде, показанном на рисунке 1, который называется бифуркационной диаграммой. При малых значениях P (до P_1) возможно лишь одно решение, соответствующее, например, жидкому или газообразному состоянию. Это устойчивое состояние термодинамического равновесия, в котором система способна гасить аномальные внутренние флуктуации и компенсировать внешние возмущения. Такая ветвь называется термодинамической. При переходе через критическое значение параметра P_1 состояние становится неустойчивым, так как флуктуации или внешние возмущения, уже не гасятся. Действуя подобно усилителю, система отклоняется от исходно устойчивой конфигурации и переходит в новое состояние. Для нашего случая это образование твердой фазы. Это явление И. Пригожин назвал бифуркацией. Следует заметить, что в решающий момент перехода система должна совершить критический выбор. Но ни в самой системе, ни в окружающей среде заранее не предусмотрено, какая структура будет получена. Решать все будет случай через флуктуацию. Просканировав «фон» потенциально возможных состояний, система может совершить несколько попыток, вначале возможно безуспешных, и наконец какая-то флуктуация победит и завла-

деет всей системой. Это состояние стабилизируется и возникает новая структура. Рассмотрим некоторые особенности процесса самоорганизации [9].

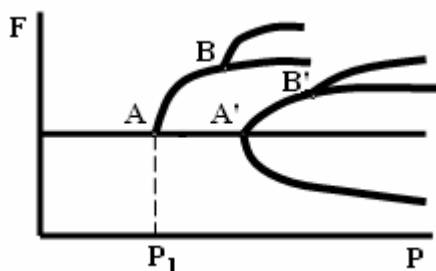


Рисунок 1 – Поведение системы в зависимости от обобщенного параметра:

- A, A' – точки первичных бифуркаций;**
- B, B' – точки вторичных бифуркаций;**
- F – значения функции, характеризующей состояние системы;**
- P – обобщенный управляющий параметр;**
- P₁ – точка бифуркации**

1. Самоорганизованное состояние возникает как правило скачкообразно. Смысл этого следующий. В обычных стационарных условиях мы наблюдаем или исходное состояние системы до перехода, или конечное после него. Но в момент бифуркации возникает еще одно переходное состояние, которое существует весьма кратковременно и требует совершенно исключительных условий. В обычных стационарных условиях оно не наблюдается. Поэтому с позиций наблюдателя процесс перехода протекает скачкообразно. Для многих физико-химических систем это переходное состояние существует на мезомасштабе, промежуточном между макро- и микромиром.

2. Другой характерной особенностью этого перехода является его катастрофичность, т.е. непредсказуемость конечного результата. Возникновение сложного поведения имеет ярко выраженный «антиинтуитивный» характер.

3. В общем случае после бифуркации возможна реализация множества потенциальных состояний. После первичной бифуркации может следовать целый каскад бифуркаций, приводящий в конечном итоге к очень сложному режиму, называемому динамическим хаосом.

4. Флуктуации в критических точках это уже далеко не те случайные флуктуации, которые имеют место в равновесных условиях. Их природа иная. Это появление новых средних величин (рисунок 2). Они возникают вследствие аномальной чувствительности некоторых мод внутренних степеней свободы к внешним возмущениям.

5. Предположим, что некая новая структура

возникла в результате конечного возмущения в веществе, находящемся в критическом состоянии. Но сразу «одолеть» начальное состояние во всем объеме оно не может. Структура сначала должна установиться в некоторой конечной локальной области и лишь затем распространиться и «заполнить» все доступное пространство. Иначе говоря, существует механизм нуклеации. В зависимости от того, лежат ли размеры начальной области флуктуаций ниже или выше критического значения (в случае химических диссипативных структур этот порог зависит, в частности, от кинетических констант и коэффициента диффузии), флуктуации в виде новой структуры либо затухают, либо распространяются на всю систему.

Явления нуклеации хорошо известны из классической теории фазового перехода: например, в газе непрерывно образуются и затем испаряются капельки конденсата. Когда температура и давление достигают точки, в которой становится устойчивым жидкое состояние, может образоваться капелька критических размеров (тем меньших, чем ниже температура и чем выше давление). Если размеры капли превышают порог нуклеации, газ почти мгновенно превращается в жидкость.

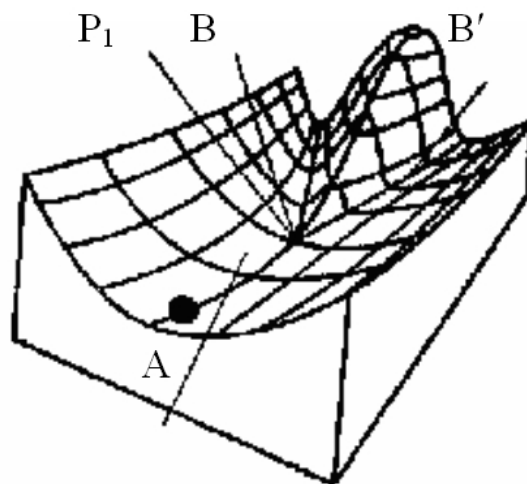


Рисунок 2 – Механическая иллюстрация явления бифуркации

Другой аналогичный пример: процесс протекания ядерной реакции. Когда масса вещества меньше критической, реакция не протекает. При превышении определенного порога начинается взрывной процесс спонтанного деления. После того как ресурсы оказываются исчерпанными, система «успокаивается». Все развивающиеся открытые нелинейные системы с сильной нелинейностью, скорее всего, пульсируют. Они подвержены естественным колебаниям развития: тенденции дифференциации сменяются интег-

рацией, разбегание - сближением, ослабление - усилением [6]. Осознание этого факта принципиально важно при решении задачи эффективного управления нелинейными процессами и напрямую касается технологий материалов.

6. Другой особенностью процесса отвердевания является нарушение симметрии. Исходное высокосимметричное состояние вещества после бифуркации сохраняет лишь некоторые симметрии, определяемые внешними условиями и типом самого вещества. Как правило, это проявляется в возникновении различных упорядоченных структур. Наиболее известные примеры таких явлений, которые можно наблюдать визуально: реакция Белоусова-Жаботинского, ячейки Бернара и т.д. Более «сложным» поведением является режим детерминированного хаоса.

Перечисленные особенности эволюции вещества являются сущностными ингредиентами сложного поведения, которое определяется как *самоорганизация* [2, 9].

Идея о самоорганизации появилась как вариант объяснения возникновения упорядоченных структур в разупорядоченных средах. Именно возникновение когерентности в исходно хаотической среде считается главным атрибутом самоорганизации. Система называется самоорганизующейся, если она без специфического воздействия извне, т.е. спонтанно, обретает какую-то пространственную, временную или функциональную структуру [9]. В результате самоорганизации в системе возникают новые коллективные свойства, которыми изначально не обладают ее элементы. Эти свойства проявляются в виде корреляций. Т.е. создаются и поддерживаются воспроизводимые взаимоотношения между удаленными частями системы.

Главная идея надежной нелинейной динамики состоит в том, что многие сложные системы, возникшие в результате процессов самоорганизации, могут быть просто описаны с помощью нескольких переменных – параметров порядка. Рассмотрим это подробнее.

Пусть первоначально система находится в состоянии, когда ее элементы не зависят (слабо зависят) друг от друга. Примером может служить вещество с полностью разупорядоченной структурой, находящееся в равновесных условиях (жидкость, газ), которое можно представить как множество слабозаимодействующих подсистем атомов или молекул. Масштабы корреляций между ними имеют порядок межатомного расстояния. Матема-

тическое описание такой системы на уровне динамики отдельных частиц является бесконечно сложным. При определенном соотношении потоков из окружающей среды и внутренних диссипативных процессов система теряет устойчивость, и после перехода через точку бифуркации возникает новый режим асимптотического поведения. Если решение, описывающее поведение системы, разложить в ряд по гармоникам, то окажется, что на этой стадии существенный вклад в него вносят лишь некоторые из них [7]. По мере развития процесса число гармоник сокращается и при $t \rightarrow \infty$ оно достигает некоего «равновесного» значения. Это значение не превышает, как правило, 5-7 единиц. Оставшиеся гармоники служат параметрами порядка, описывающими макроскопическую структуру. В то же время они определяют поведение всех частей системы. Это явление названо принципом подчинения [10].

Состояние системы, которого она достигает при времени процесса, стремящемся к бесконечности, определяемое небольшим числом параметров порядка в динамике называется аттрактором.

Хаос в динамических системах. Обычно самоорганизация ассоциируется с появлением в изначально разупорядоченной среде неких пространственно-временных структур, которые часто имеют эстетичную геометрию (снежинки, лазеры, ячейки Бернара и т.д.). Это яркие и наглядные образы. Но существуют и другие проявления самоорганизации, может быть и не столь эффектные, но более распространенные. Это так называемое детерминированное хаотическое поведение (динамический хаос – ДХ) [11].

Модель ДХ является чрезвычайно успешной при описании многих самоорганизованных систем самой различной природы. На наш взгляд она может оказаться весьма полезной и для решения многих существующих технологических проблем и для формирования идеологии технологий будущего, в которых будут реализованы принципиально иные способы управления.

Ранее считалось, что аттрактор есть образ исключительно устойчивого режима функционирования системы, которому в фазовом пространстве соответствовали простые геометрические образы. Если система в процессе эволюции достигает единственно устойчивого состояния, этим образом будет неподвижная точка, если установилось периодическое движение, то – периодический аттрактор, например предельный цикл. Однако при значении размерности фазового

пространства $N \geq 3$ был обнаружен принципиально новый тип фазовых траекторий – *странные аттракторы, которые порождаются так называемым детерминированным хаосом*. Фазовая траектория динамической системы в этом случае представляет собой бесконечную линию без самопересечений, причем при $t \rightarrow \infty$ траектория не покидает заданной области и не притягивается ни к точкам равновесия, ни к циклическим траекториям. Такой аттрактор имеет два существенных отличия: фазовая траектория непериодическая и режим функционирования неустойчив (малые отклонения от начальных условий нарастают). Странный аттрактор представляет собой сложное апериодическое движение, которое можно представить как суперпозицию большого числа периодических орбит. На короткое время хаотические системы могут демонстрировать движение по орбите очень близкой к периодической, а затем перейти к другой с периодичностью, скажем, в пять раз больше и т.д. Постоянная смена нестабильных периодических движений и создает при долговременном наблюдении впечатление стохастичности, в то время как в ближней перспективе наблюдается порядок.

ДХ представляет собой сложное поведение, внешне сходное с обычным тепловым хаосом. Но он принципиально отличается от него. Основное различие состоит в интенсивности и временном масштабе отклонений от среднего.

Существует и еще одно важное отличие этого режима от случайного – этот процесс теоретически полностью предсказуем и воспроизводим.

В хаотических системах причина генерирования сложных колебательных процессов кроется не в большом числе степеней свободы и не в наличии флуктуаций, а в экспоненциальной неустойчивости режимов. Здесь хаос возникает как результат внутренней динамики системы, а не вследствие внешних источников или внешних случайных воздействий. Настоящая причина нерегулярности и непредсказуемости поведения определяется тем, что в таких нелинейных системах небольшие отклонения от начальных условий нарастают со временем, «уводя» друг от друга первоначально близкие траектории. Малые изменения начальных условий приводят здесь к большим конечным результатам. Экспоненциально быстрое нарастание первоначальных ошибок в реально задаваемых начальных условиях приводит к невозможности предсказать длительное поведение системы [9].

Именно это обстоятельство ведет к потере детерминированной предсказуемости и необхо-

димости вводить вероятностные характеристики для описания динамики таких систем.

Неопределенность в задании начального состояния – это реальность абсолютного числа реальных систем. Другая ситуация невозможна в принципе. Физических причин, приводящих к неопределенности, может быть множество, но в любом случае найдется хотя бы одна.

Связанная с разупорядоченностью неустойчивость движения позволяет системе непрерывно как бы прощупывать пространство состояний, создавая информацию и сложность. Хаос действует как своего рода селектор, отбрасывающий огромное число случайных последовательностей и сохраняющий лишь те, которые совместимы с соответствующими динамическими законами. Никакая другая известная на сегодня динамика не в состоянии удовлетворить этим условиям [7, 12].

Инварианты хаотической динамики. Любое реальное явление или его модель обретают самостоятельный смысл в сознании человека, если ему можно приписать набор характеристик, определяющих его некую внутреннюю сущность, отличную от окружающей среды. Это своеобразный паспорт системы. Для динамического хаоса тоже были разработаны такие паспортные данные. Сформировалось два основных класса инвариантов.

Размерности аттрактора D. Они определяют геометрические свойства аттрактора в фазовом пространстве. Размерности важны еще и потому, что их можно оценить непосредственно по экспериментальным данным [7].

Размерность позволяет оценить сложность аттрактора, т.е. с ее помощью можно оценить число параметров порядка n , к которым подстраиваются все остальные степени свободы системы. Обычно это делают по следующей формуле:

$$n > 2D + 1. \quad (1)$$

Ляпуновские показатели. Показатели Ляпунова определяют время корреляций в системе (τ_c). После истечения этого времени корреляционная связь между значениями процесса в соседние моменты времени ослабляется, и многомерные функции распределения распадаются на произведение одномерных.

Как уже отмечалось, в результате самоорганизации у системы остается небольшое число параметров порядка, которые определяют ее поведение. Т.е. нет необходимости исследовать динамику всего исходного (до самоорганизации) бесконечномерного фазового пространства. Вполне достаточно наблюдать аттрактор системы, размерность которого при

математическом описании во многих исследованных физических системах оказалась довольно небольшой: три, пять или около того. На этом и базируется главная идея экспериментального изучения таких объектов.

Основным способом практической реализации этой идеи является *метод вложения*, основанный на результатах, полученных Такенсом. Он позволяет решить несколько важных практических задач [10]:

- измерять инвариантные характеристики хаотических систем;
- прогнозировать динамическое поведение и строить соответствующие модели;
- идентифицировать и классифицировать динамические системы. Например, различать системы, демонстрирующие детерминированное хаотическое движение в пространстве небольшой размерности от систем с шумом, а также выявлять простое регулярное движение.

Рассмотрим основные физические предпосылки этого метода. Представим себе динамическую пространственно распределенную систему, все части, которой взаимосвязаны, т.е. ведут себя как единое целое. С физической точки зрения это обычная ситуация. Во многих случаях системы, в которых происходят процессы диффузии, теплопроводности или есть вязкость, рассматриваются как единое целое. Интуиция подсказывает, что поскольку вся структура и соответственно свойства взаимосвязаны, то любой сигнал от такой системы содержит в себе информацию обо всех внутренних процессах. Поэтому весьма заманчиво попытаться расшифровать поведение системы по измерениям одной из ее динамических характеристик (в принципе любой). Эта идея сначала была обоснована теоретически, а затем успешно использована для исследования многих физических, химических, биологических и иных сложных систем.

Ф. Такенс доказал, что установить наличие детерминированного хаоса можно, измеряя любую из динамических переменных в одной точке почти при любом временном интервале измерения Δt .

Итак, чтобы исследовать количество параметров порядка у сложной многомерной системы, достаточно просто измерить одну из ее динамических характеристик через дискретные промежутки времени. Этот парадоксально простой рецепт является одним из самых эффективных и изящных решений в современной физике.

Методу вложения Такенса уже около 30 лет. За это время он разросся вглубь и вширь, оброс массой методик и алгоритмов. Возникло целое

направление в математике, занимающееся проблемами реконструкции. Но сущность метода осталась неизменной.

Для технологий важнейшее значение имеет исследование динамики и структуры растущих или обрабатываемых каким-либо образом поверхностей материалов или разделов фаз, которые представляют собой «сердце» большинства технологических процессов. А это двумерные распределенные системы, у которых динамика изменяется не только во времени, но и по поверхности. Этот метод позволяет эффективно исследовать и такие пространственно-распределенные системы.

Таким образом, если вы достаточно удачливы и все необходимые обстоятельства складываются положительно, то можно рассчитывать, что вам удастся справиться с расшифровкой поведения испытываемой сложной системы. И тогда она предстанет как очаровательно простое совершенство. Но, как показывает опыт, удача в этом деле крайне редка. За простоту рецепта реконструкции приходится платить очень высокую цену в виде массы ограничений и трудностей. Но понимать эти препятствия крайне необходимо. Иначе мы так и не найдем эффективных способов определять динамику на основании имеющейся информации, и модели сложных систем никогда не пойдут дальше карикатур.

Управление хаотическими системами. Разумеется, наука о нелинейных хаотических системах оставалась бы просто красивой игрушкой, если не были обнаружены эффективные способы диалога и управления ими. И то, что они возникли и были успешно экспериментально испытаны, делает наше знание о сложности настоящей практической наукой, обладающей огромным технологическим потенциалом. Более того, эти способы управления являются одними из самых изящных и эффективных решений в физике и технологии за всю историю. Таковыми их делает то, что они в полной мере используют внутренние свойства хаотических систем [13, 14].

Как уже говорилось, хаос может быть представлен как суперпозиция очень большого числа периодических орбит. На короткое время хаотические системы могут продемонстрировать движение по орбите, очень близкой к периодической, а затем перейти к другой периодичности, с периодом, скажем, в 5 раз больше, и так далее. Постоянная смена одного (нестабильного) периодического движения другим и создает, при долговременном наблюдении, впечатление стохастичности, в то время как в

ближней перспективе наблюдается порядок.

Если сделать видимым движение хаотической системы в фазовом пространстве, можно наблюдать, что все нестабильные периодические движения соответствуют траекториям фазового пространства. И поскольку в замкнутом объеме проходит очень большое число траекторий, каждое нестабильное периодическое движение находится очень близко ко всем другим. Поэтому система оказывается очень чувствительной к малым изменениям начальных условий.

Чувствительность является и разочарованием и надеждой. Разочарованием - поскольку из-за этого достаточно долговременный прогноз поведения невозможен. Парадоксально, но этот же факт дает основания для надежды. Если система столь чувствительна к малым возмущениям, почему бы не использовать их для управления состоянием? Эта идея и была воплощена Оттом, Грибоджи и Йорка (OGY).

Этот метод предназначен для приведения хаотической системы от иррегулярного к периодическому, правильному поведению, по отдельной периодической траектории. Эта траектория нестабильна в исходной, неуправляемой системе, но устойчиво стабильна в управляемой. Метод состоит из двух элементов: 1) применение относительно стандартных процедур теории управления, начиная с линеаризации динамики вдоль траекторий и 2) революционной идеи относительно использования нелинейных свойств динамики для экспоненциально быстрого достижения линейного контроля над системой. Одним из ключей к применению этого метода является детальное знание фазового пространства и динамики системы. Эти сведения могут быть собраны из наблюдений над системой, выполненных по рецепту Такенса. Притягательной особенностью метода является то, что для достижения контроля над системой необходимо маневрирование незначительными изменениями величины параметра в соответствующем образом линеаризованном режиме.

Для того чтобы управлять хаосом, согласно схеме OGY необходимы три вещи: определить нестабильные периодические точки аттрактора, локально охарактеризовать форму аттрактора вблизи этих точек и определить в них отклик аттрактора на внешние воздействия.

Механизм управления состоит в моментальном изменении системного параметра на величину, необходимую для достижения контроля.

Все эти действия по достижению контроля точкой подобны балансированию бейсбольного мяча на седле. Незначительные манипуляции седлом удерживают мяч в точке нестабильного равновесия, для этого не надо менять форму или природу седла.

Очень важно, что OGY метод может использоваться для контроля любого числа периодов хаотического сигнала.

Оказывать влияние на динамику хаотических систем возможно также с использованием традиционных способов теории управления, которые подразумевают установление обратных связей для манипулирования динамикой. Т.е. в систему вводится некая новая внешняя сила, которая сообщает траекториям некоторый толчок, с помощью которого стабилизируется нестабильная траектория.

Важно отметить, что два обсуждавшихся нами типа контроля не эквивалентны. В первом случае для достижения контроля изменяются параметры системы. При этом используются знания о положении и функциях стабильного и нестабильного многообразия динамики. В этом случае нет необходимости в новом классе внешних сил, а их роль выполняет эффект от изменений параметров системы, а не ее формы. Главными различиями являются использование в первом методе самой нелинейной динамики системы и тот важный факт, что для изменения параметров требуются только бесконечно малые внешние силы.

Осторожное вмешательство, определяемое процедурой OGY, совершенно не изменяет динамику, лежащую в основе системы. Традиционные методы подразумевают введение в систему "возмущения" для подстройки параметра, который сопоставим с его масштабом. Такие методы правильней называть не "управлением" хаосом, а его "ликвидацией", поскольку они коренным образом меняют природу изучаемой системы.

Нацеливание как тип контроля отличается от обоих рассмотренных выше случаев. Как и многие другие вещи, механизмы контроля хорошо срабатывают, когда они вообще срабатывают. После того как система приведена в область фазового пространства, в которой мы хотим управлять, можно применить методы установления контроля с большим успехом. Однако, прежде чем контроль установится, мы вынуждены дожидаться, пока динамика попадет в искомую область. Часто это требует довольно длительного времени. Очень желательны были бы некоторые методы, которые быстро приводили бы динамику в нужную для

управления область. Другими словами, нужна сеть в фазовом пространстве для захвата траекторий. Когда траектория попадает в сеть, ее можно «отбуксировать» в область управления и там эффективно управлять ее поведением.

Для направления траекторий в отдельную область фазового пространства применяют специальную технику прямых и обратных итераций небольшой области фазового пространства. При этом используется только одно незначительное изменение параметра. После начального возмущения величина параметра возвращается к исходному. Стратегия также предполагает полное знание динамики. В присутствии шумов или без законченных знаний о динамике процедура окажется неработоспособной без некоторой модификации. Она достаточно проста. Вместо одного изменения динамики ее надо возмущать при каждой итерации через поверхность [15].

Многие физические явления можно смоделировать как динамическую систему, на которую оказывают влияние внешние силы. Наиболее изученные типы сил: периодические и постоянные. В качестве примера можно привести систему, на которую сила действует с периодом в половину естественного колебания. Так моделируется раскачивание детских качелей.

В сфере нашего изучения новый тип привода можно назвать хаотическим, т.е. имеется динамическая система, приводом которой является выходной сигнал другой динамической системы. Если вторая динамическая система обнаруживает хаотическое поведение, то можно сказать, что первая подвергается воздействию хаотического привода.

Наиболее показательные эффекты имеют место, когда ведущая система подобна ведомой. В таком случае хаотическая ведомая система может засинхронизироваться с ведущей. Синхронизация в данном случае означает, что обе системы будут следовать одним и тем же траекториям фазового пространства. Это происходит вопреки различию в начальных условиях. Обычно, в случае хаотической динамики, неодинаковость в начальных условиях означает, что траектории экспоненциально расходятся на аттракторе. Таким образом, факт движения систем с разными начальными условиями по одним и тем же траекториям в условиях хаотического привода привлекает огромное внимание. Для технологий материалов, в частности для решения проблемы невоспроизводимости, это может принести неоценимую пользу.

Можно объединить несколько динамических систем в каскад и достичь синхронизации всех систем, используя только один привод. Этот каскад может быть распространен до бесконечности без всякого изменения результатов. Более того, поскольку вторая и третья системы отзываются на привод первой, реально существует только один привод.

Весьма вероятны ситуации, в том числе и в технологиях материалов, когда для управления потребуется сигнал, переводящий исходно неким образом упорядоченную систему в состояние детерминированного хаоса. Технические же решения могут быть весьма разнообразными и не столь тривиальными. Можно предложить несколько вариантов:

- шумовое воздействие на систему;
- подключение к системе с хаотической динамикой;
- использование традиционных способов управления, обозначенных выше.

Разумеется, что во всех этих случаях необходимо устанавливать характеристики управляющего воздействия в соответствии с параметрами управляемой системы.

Динамический хаос нужен по следующим причинам.

Причина 1. Динамические явления, называемые сегодня хаосом, существовали всегда, но покуда они не были опознаны как самостоятельное явление и поименованы, у нас не было возможности отличать их от других аспектов природы, таких как стохастичность и порядок. Зачастую хаос смешивался с недетерминированностью и стохастичностью. Однако после того как динамический хаос был открыт и наречен, его обнаружили практически во всех областях современного естествознания: в физике, радиотехнике, химии, биологии, механике, экономике и др. Стало очевидно, что он вездесущ, отражает глубокие закономерности динамической организации сложных систем и является одной из фундаментальных проблем современного естествознания. При этом уже оказалось, что весь инструментарий, разработанный для хаотической динамики, может быть успешно использован для исследования более простых систем. Это напрямую следует из того факта, что остальные виды динамического поведения, за исключением теплового хаоса, являются всего лишь частными и весьма упрощенными вариантами хаоса и могут быть без труда выведены из него.

Наша жизнь все более настоятельно требует количественного учета таких факторов, как сверхвысокая плотность, сверхвысокая темпе-

ратура, давление, скорость и т. д. А, как известно, учет этих факторов требует принципиально нелинейного подхода к описанию эволюционных процессов. И выяснилось, что в таких системах хаотический режим функционирования скорее правило, чем исключение. Это напрямую касается и задач синтеза новых материалов с заданными свойствами и решения проблем уже действующих технологий.

Причина 2. Хаос теоретически и экспериментально обнаружен в структуре поверхностей аморфных и кристаллических материалов. На основе его инвариантных характеристик и способов исследования оказалось возможным разработать новые методы идентификации порядка в поверхностных структурах. Кроме того, существует принципиальная возможность напрямую реконструировать динамику роста твердотельных материалов по их структуре.

Причина 3. Представления о веществе в процессе отвердевания как о самоорганизующейся структуре очевидно свидетельствуют о существовании неких особых переходных форм вещества – мезофаз, возникающих в виде слоев на границах раздела. Вещество в этом слое находится в сильнонеравновесном неустойчивом состоянии бифуркаций и проходит через стадию пространственно-временного динамического хаоса, на которой у него возникают необычные физические свойства. И в этом смысле хаос может оказаться весьма полезной моделью «перехода» от квантового поведения на макроуровень.

Причина 4. С помощью хаоса можно строить принципиально новые модели твердотельного состояния, которые позволяют предсказывать будущее развитие событий и могут быть очень важны для синтеза новых материалов. Причем эти модели строятся из первых принципов, сводя к минимуму влияние личности «модельеров».

В этом смысле хаос может оказаться эффективным прототипом аморфного состояния вещества. По крайней мере, с его помощью уже сегодня удастся непротиворечивым образом объяснить: наличие в аморфных материалах «запрещенной зоны» и структурных неоднородностей, закономерности послеростовой эволюции их структуры и т.д.

Причина 5. Одной из важнейших проблем технологий материалов является невозможность их структуры и характеристик. Вопреки устоявшимся представлениям о ее возникновении она имеет фундаментальное физическое происхождение. Невозможность обусловлена неустойчивостью процессов роста, которая связана с динамическим хаосом и

неустраимыми флуктуациями. Критерии для оценки степени воспроизводимости могут быть сформулированы на основе характеристик, используемых для нелинейных систем.

Причина 6. Хаотическая динамика имеет свойства уникального информационного процессора, который эффективно сжимает поступающую информацию и производит новую. Создание устройств, принцип работы которых основан на явлении самоорганизации при переходе газ (жидкость) – твердое тело, возможно позволит реализовать принципиально новую концепцию обработки информации, включающую адаптивную подстройку к любым окружающим условиям. Не стоит исключать возможность привлечения этих идей и к реализации квантовых вычислителей.

Причина 7. По-настоящему эффективные способы управления выращиванием материалов должны быть основаны на принципе соответствия управляющих воздействий внутренним закономерностям эволюции вещества. И коль скоро вещество в процессе формирования твердотельной структуры проходит через стадию пространственно-временного хаоса, то и созданные методы контроля хаоса будут как нельзя кстати.

В общем концепция хаоса, на наш взгляд, открывает новые возможности в исследовании и технологиях материалов. И в отличие от громоздких и грязных современных технологий их перспективы выглядят более привлекательными, хотя бы потому, что демонстрируют экологичное резонансное взаимодействие с Природой.

Динамические особенности процессов образования твердотельного состояния. Для описания процессов отвердевания учет диссипативных членов обязателен, поскольку открытость системы, подразумевающая обмен энергией, веществом, информацией с окружающей средой, поддерживает само ее существование. Очевидно, что процессы роста протекают в неравновесных условиях, которые могут быть обусловлены резкими границами концентраций и температур между твердой фазой и пограничным объемом, разницей между скоростями роста и достижениями термодинамического равновесия на границе роста и т.д. Поэтому с позиций динамики вещество в процессе отвердевания представляет собой *открытую, неравновесную, диссипативную систему* [3, 5, 16].

Образование твердой фазы – это возникновение *нового состояния* вещества, которое отличается от исходного как по макрохарак-

теристикам: плотности, твердости, цвету, электропроводности и т.д., так и на микроуровне: в ближнем и среднем, и дальнем порядках. В терминах неравновесной динамики это свидетельствует о *бифуркации*, т.е. о скачкообразном возникновении с позиции внешнего наблюдателя новой формы молекулярной организации при изменении управляющих параметров и внешних ограничений в открытой системе.

Другой особенностью этого перехода является его *катастрофичность* и, как следствие, непредсказуемость конечного результата. Даже когда всевозможные усилия направлены на выращивание кристалла с идеальной структурой, имеет место непредсказуемость и невоспроизводимость. Можно, конечно, утверждать, что структура нам известна заранее и каждый раз воспроизводится. Но даже в этом случае невозможно предположить, что каждый раз дефекты структуры расположены строго одинаково. А дефекты всегда присутствуют в любом реальном материале. Причем их пространственное распределение каждый раз отличается от предыдущего. Таким образом, даже в случае выращивания кристалла имеет место множество устойчивых состояний, которые могут возникнуть в процессе эволюции к твердотельному состоянию. Мощность этого множества сравнима с числом атомов, образующих структуру.

Что касается некристаллических материалов, то для них явление невоспроизводимости имеет место уже не только на уровне микроструктуры, но и существенно проявляет себя на уровне макрохарактеристик, т.е., и в этом случае имеет место множественность возможных состояний. И заранее предсказать, какое из них будет реализовано, невозможно.

Факт, что структура материала, полученного по одной технологии, но в разных процессах, всякий раз обладает индивидуальным характером, настолько прост и очевиден, что никогда не рассматривался как предмет для исследований. Однако он имеет фундаментальное значение и свидетельствует о глобальной неустойчивости процессов роста, наличии множества локально устойчивых состояний и, как следствие, невозможности достижения состояния глобального равновесия в реальных условиях.

Другой особенностью процесса отвердевания является *нарушение симметрии*. Исходное высокосимметричное состояние газа или расплава при отвердевании сохраняет лишь некоторые симметрии, определяемые внешними условиями и типом вещества [4]. Это проявляется в возникновении разнообразных структурно-химических неоднородностей. Они имеют размеры от

макро- до наноструктур и обнаружены в упорядоченных и неупорядоченных материалах, в объемных веществах, тонких пленках и на поверхностях.

Следует заметить, что и индивидуальный характер структуры каждого материала и разнообразные структурно-химические неоднородности воспринимаются в большинстве случаев как нечто экзотическое и второстепенное по отношению к «основной» структуре. Однако именно они наиболее наглядно свидетельствуют о существовании сложных процессов самоорганизации во время роста. Но они представляют собой лишь «надводную» внешне видимую и по этой причине наиболее эффективную часть айсберга иерархической самоорганизованной системы. Есть и «подводные миры», которые определяют верхнюю часть и имеют более сложную организацию.

Символично, что ряд ростовых образований в неживой природе внешне идентичен структуре ряда биообъектов. Это, в свою очередь, свидетельствует не просто о топологическом подобии живого и неживого, а о глубинном родстве процессов, определяющих их появление. Это означает, что неживая материя в необычных условиях обладает таким же арсеналом средств самовыражения, как несравнимо более сложноорганизованные живые системы. И это не только повод для аналогий и философских заключений о границах и сущности «живого» и «неживого», но прежде всего задача для изучения и использования потенциальных возможностей, скрытых до сих пор в «обычных», хорошо известных нам материалах.

Заметим, что структура получаемого материала до момента отвердевания заранее не записана в расплаве или газе. Трудно предположить, что атомы газа или жидкости заранее «знают», где, когда и какую конфигурацию образовать. Они не различимы в исходном состоянии. Однако благодаря нелинейностям и неравновесным условиям, создаваемым в технологических установках, атомы и молекулы становятся чувствительными к окружающей среде и образуют различные структуры, которые затем «замораживают», в том числе и в виде различных неоднородностей [4].

Перечисленные особенности эволюции вещества в процессе отвердевания являются сущностными ингредиентами сложного поведения, которое определяется в общепринятой терминологии как *самоорганизация* [7].

В результате самоорганизации в веществе возникают новые коллективные свойства, которыми изначально не обладают составляющие

его атомы и молекулы. Эти свойства проявляются в виде корреляций, т.е. создаются и поддерживаются воспроизводимые взаимоотношения между удаленными частями материала. В кристаллах корреляции проявляются в виде среднего и дальнего порядка, структур с фрактальной размерностью и др. В неупорядоченных материалах в виде небольшого числа множества мод - гармоник, формирующих хаотическую структуру. Наиболее явно коллективные свойства атомов в твердых телах проявляются в виде структурных неоднородностей. Напротив, в жидкости положение молекул и параметры межмолекулярных сил достаточны, чтобы определить вероятные местоположения других близлежащих молекул. Но нет корреляций вне нескольких молекулярных диаметров. Газ же беспорядочен в том смысле, что нет никакой корреляции между местоположением двух любых молекул.

Разумеется, осознание, что твердотельная структура есть результат самоорганизации огромного числа атомов или молекул, кроме эстетического созерцательного удовлетворения, должно в итоге породить принципиально новые технологии выращивания и исследования материалов.

Как уже говорилось, главная надежда при изучении сложных систем в том, что в результате самоорганизации исходная сложность «сжимается» до состояния, которое может быть описано конечномерным аттрактором. Степень компрессии определяется как отношение размерностей начальной и конечной структур. Если она недостаточно велика, то применение методов, разработанных для изучения Нелинейных систем, становится не эффективным.

Вещество, находящееся непосредственно в стадии отвердевания, представляет собой систему, неравномерно распределенную в пространстве и во времени. Физическими причинами этого могут быть: неоднородности пограничных областей, колебания энергетических и вещественных параметров, обусловленные как флуктуациями различной природы, так и управляющими параметрами и многое другое. Это приводит к образованию множества областей, в которых процессы эволюции протекают по-разному. Но эти области связаны между собой транспортными явлениями типа теплопроводности, диффузии или конвекции. В математических моделях такие процессы описываются оператором Лапласа с некоторым коэффициентом. Чем выше номер гармоники (номер собственной функции), тем меньше собственные значения этого оператора. Поэтому

высшие гармоники должны сильно убывать, быть малыми по величине и не оказывать существенного влияния на динамику системы. Остается относительно небольшое число «не вымерзших» нижних гармоник. Основываясь на этих интуитивных физических соображениях, можно предположить, что в таких системах происходит компрессия начальной сложности и должен возникнуть аттрактор с размерностью, существенно меньшей, чем исходное состояние.

Особенности экспериментального исследования эволюции вещества при отвердевании. Вывод о том, что отвердевание есть процесс самоорганизации позволяет рассчитывать на успешность использования для его изучения идеологии и инструментария метода вложения. Ниже рассмотрены особенности его применения к технологическим процессам, а также маленькие хитрости, при помощи которых можно преодолевать недостатки и ограничения самого метода.

1. Локальность.

Процесс непосредственного образования твердотельной структуры, как и вообще любой процесс самоорганизации, локализован в пространстве. Он протекает в промежуточном слое (ПС) между фазами (твердой, жидкой и газообразной). Поэтому исследовать динамику роста надо по измерениям какой-либо характеристики ПС. Но это не просто: ПС постоянно перемещается, он окружен пограничными областями, толщины которых значительно больше. Толщина же ПС весьма незначительна. Это сужает круг методов, с помощью которых можно вести наблюдение, и осложняет их практическое использование.

Эти трудности можно частично устранить несколькими способами. В частности, можно использовать для исследований большие объемы вещества, помещенного в критические условия, соответствующие точке фазового перехода. В этом случае возникнет проблема точного поддержания этих условий, т.к. структура вещества будет чрезвычайно чувствительна к их колебаниям. Для измерения необходимо использовать характеристики, позволяющие одновременно исследовать большие объемы, например, электропроводимость, оптическое поглощение и др. Другой вариант - измерять динамику на неподвижной границе фаз в стационарных условиях. Разумеется, получаемые в обоих случаях результаты не будут полностью совпадать с данными от движущегося в реальных технологиях ПС. И это очень важно. Но как предварительные методы изучения жизни мезофазы они вполне сгодятся.

2. Пространственная неоднородность.

Процесс отвердевания протекает во времени и в пространстве. Поэтому динамика процесса в различных точках и на разных пространственных масштабах может быть различной. Пример этого разнообразия неоднородности структуры, характеристики которых существенно отличаются от окружающих областей. Поэтому одних только временных серий (t-серий) измерений какой-либо характеристики вещества может оказаться недостаточно для восстановления полной картины эволюции. В идеале необходимо исследовать методом t-серий все пространственные области. Однако этот подход практически несовместим не только с современными вычислительными мощностями, но, прежде всего, совершенно не ясно каким образом он может быть исполнен экспериментально. Причина – чрезвычайно большая размерность системы, связанная с пространственной степенью свободы.

Возможный выход - уменьшить размерность пространства путем некоторых упрощений. Это можно сделать, учитывая особенности структуры выращенного материала, а также из практических потребительских соображений. Так, например, при изучении процессов возникновения периодических неоднородностей в кристаллах вдоль плоскости роста или вдоль направления роста можно пренебречь одной из координат.

Важен также выбор пространственного масштаба измерения. Это может оказать существенное влияние на результаты реконструкции. Выбор должен исходить из существующих правил реконструкции динамики и размеров исследуемых структурных особенностей. Если стоит задача изучения динамики системы в целом, т.е. на всех допустимых масштабах, то выбор пространственной области для измерения придется делать, основываясь на физической интуиции, поскольку не существует алгоритмических решений.

3. Выбор характеристики для исследования.

В эксперименте предпочтительно использовать характеристики, изменения которых относительно велики и могут быть уверенно зафиксированы. К ним можно отнести: скорости атомов (молекул) в ПС, измеряемые методом рассеяния света, электропроводность и др.

Другой вопрос заключается в том: «Может ли один измеренный параметр, как это принимается в методе реконструкции, характеризовать систему целиком?» Прямых доказательств этому нет, поскольку не было проведено экспериментов по сопоставлению ди-

намики разных характеристик системы. По-видимому, когда мы пользуемся услугами одного параметра, то получаем достоверную информацию только о его динамике. Но само проведение такого эксперимента представляется очень интересным.

Кроме того, измеряя достаточное число различных характеристик вещества, можно использовать их для построения фазовых векторов, т.е. можно строить векторный временной ряд из нескольких наблюдаемых вместо скалярного временного ряда. В этом случае возникает проблема сопряжения результатов от разных характеристик, т.е. как из метров, литров, килограммов получить одно число – расстояние. Однако она вполне разрешима.

Рецепт, прописанный в методе реконструкции, не стоит воспринимать как догму. Ведь возможны самые разнообразные способы вложения. Все определяется фантазией и интуицией исследователя.

4. Восстановление динамика по структуре.

Очень заманчивой является возможность частичного восстановления динамики роста по результатам исследования сформированной структуры (t-серий). Это связано с тем, что структура «хранит» информацию о своей пред истории.

Реконструкция динамики по структуре имеет важные преимущества по сравнению с «классическим» методом по временному ряду. Структура материала является "замороженным" снимком динамических процессов, поэтому не подвержена шуму и не возникает проблема стационарности данных. Что касается определения фрактальной размерности аттрактора пространственного распределения, то в некоторых случаях она может быть определена по физическим свойствам материала и процедуры встраивания не требуется вообще.

Использование t-серий более целесообразно для технологий выращивания материала из газовой фазы или другим подобным способом. В этом случае граница роста является поверхностью. Использование t-серий более предпочтительно для технологий, использующих переход расплав - твердое тело, поскольку трудно идентифицировать пространственную структуру непосредственно на границе роста.

Для технологий важнейшее значение имеет исследование динамики и структуры растущих или обрабатываемых каким-либо образом поверхностей материалов или разделов фаз, которые представляют собой «сердце» большинства технологических процессов. Эти поверхности в виде двухмерных цифровых массивов могут

быть достаточно просто получены с помощью современных аналитических средств, в частности электронной микроскопии. Исследование этих данных с помощью описанных алгоритмов позволяет:

во-первых, идентифицировать структурную организацию поверхностей, т.е. выявлять порядок. При этом данный метод по сравнению с традиционными способами изучения структуры обладает принципиально иной «разрешающей способностью»;

во-вторых, для многих технологий выращивания материалов в виде пленок сформированная верхняя поверхность представляет собой «замороженный» мгновенный снимок процессов роста. Из него можно извлекать информацию о динамике этих процессов. А это очень важно для организации эффективного управления.

Промежуточные слои на границе газ (расплав) – твердое тело как области сложного поведения. Физический смысл результатов исследования динамики образования твердотельной фазы заключается в том, что кроме газообразной, жидкой и твердой фаз существует еще одно состояние вещества, отличное по своим свойствам от пограничных слоев. Это состояние возникает и существует или на границе раздела газообразной (жидкой) и твердой фаз в виде промежуточного слоя (ПС) или в больших объемах вещества, находящихся в локализованной области пространства, где непосредственно протекает фазовый переход. Именно здесь протекают процессы структурообразования.

Предположение о существовании неких областей с аномальными свойствами, очевидно, следует из факта того, что все экспериментально наблюдаемое в структуре твердого тела (дальний порядок, структурно-химические неоднородности и т.д.) должно где-то образовываться [4]. При этом совершенно ясно, что особенности структуры материалов изначально не содержатся в рабочем объеме, куда доставляются компоненты для роста. Действительно, эти среды находятся в жидком или газообразном состоянии и подчиняются закону больших чисел. Это свидетельствует о том, что в них нет сильных взаимосвязей между атомами вне нескольких атомарных радиусов и изначально не заложена структура получаемого материала. Трудно предположить, что атомы газа или жидкости заранее «знают» где, когда и какую конфигурацию образовать. Они неразличимы в исходном состоянии. Однако в ПС, благодаря нелинейностям и неравновесным

условиям, они становятся чувствительными к окружающей среде и спонтанно организуют область пространства, т.е. собственно ПС со свойствами, отличными от пограничных объемов. В ПС происходят процессы непосредственного образования твердотельной структуры [2].

Невозможно, чтобы структура формировалась в слоях твердотельного материала, пограничных с ПС, так как диффузионная подвижность атомов в этом состоянии не позволяет им менять местоположения и образовывать упорядоченные структуры с размерами больше нескольких межатомных расстояний. Исключения составляют некоторые виды релаксационных процессов. Однако в любом случае корреляция, т.е. собственно структура, возникает в ПС.

В работе [17] описаны прямые эксперименты по исследованию ПС на границе растущего кристалла и расплава, проводимые методом рассеяния света. Для эксперимента использовались вода и соль. Исследовались физические характеристики ПС и динамика вещества в нем. Сложная оптическая система позволяла исследовать именно процессы, протекающие непосредственно в ПС, а не пограничные области.

В результате экспериментов на соли были обнаружены два различных динамических процесса в ПС. Первый связан с релеевским рассеянием и обусловлен флуктуациями в ПС. На основании расшифровки экспериментальных данных были сделаны следующие выводы:

- толщина ПС составляет примерно 1 мкм. Это значительно больше, чем постоянная решетки;

- коэффициент диффузии в ПС $D=(1\pm 0,25)\cdot 10^{-9}$ см²с⁻¹. Эта величина на шесть порядков меньше, чем коэффициент диффузии в жидкой соли. Это означает, что температурные флуктуации в ПС затухают чрезвычайно медленно, и это можно рассматривать как указание на критическое состояние вещества, которое имеет место вблизи точки бифуркации. В ПС поддерживается неравновесное состояние вещества, которое можно назвать мезофазой.

Второй процесс рассеяния связан с рассеянием на растущей почти эквидистантными шагами твердотельной структуре. Рост предположительно осуществляется в виде спирали. Скорость шага роста измерялась из доплеровского сдвига и составила величину, примерно в сто раз большую чем скорость роста кристалла. Из зависимости автокорреляционной функции от

времени в разных масштабах в случае доплеровского рассеяния можно сделать следующие выводы:

- в основе динамики роста лежит динамический малоразмерный хаос (это следует из неидеальности формы колебаний автокорреляционной функции, несмотря на внешнюю периодичность колебаний, она стохастична);

- колебания автокорреляционной функции обусловлены разницей в скоростях роста кристалла и ступеней. Это можно объяснить тем, что вещество в ПС представляет собой самоорганизующуюся систему. Самоорганизация, т.е. собственно структурообразование, происходит только тогда, когда сложность системы превосходит определенный критический предел. Им может быть, например, число атомов в ПС. После самоорганизации ресурсы системы оказываются исчерпанными, и требуется время для их накопления. Затем процесс повторяется снова. Эти физические механизмы присущи всем самоорганизующимся системам.

Следует добавить, что аналогичные данные были получены для системы вода-лед.

Если рассматривать материалы, получаемые из газообразной фазы, то ПС для них представляет поверхность. Точнее говоря, структура поверхности твердого тела является “замороженным” снимком процессов, происходивших в ПС. Есть все основания полагать, что свойства поверхности во время роста в принципе аналогичны свойствам вещества в ПС на границе твердое тело - расплав. Действительно, толщина поверхности значительно превосходит межатомные расстояния, а ее физические свойства отличаются от объемных [7].

Таким образом, можно сделать вывод о том, что практически во всех нам известных технологиях получения твердотельных материалов на границе раздела фаз существуют промежуточные слои (рисунок 3), которые имеют следующие особенности [2, 18]:

- физические характеристики вещества в ПС аномально отличаются от свойств пограничных объемов;

- вещество в ПС находится в неустойчивом, критическом состоянии, а флуктуации имеют порядок средних величин и затухают медленно;

- свойства ПС зависят от скорости подачи, энергии и качественного состава вещества, пограничных слоев, скорости движения, окружающей среды, подложки и других внешних воздействии;

- толщина ПС превышает несколько атомарных слоев.

Следует отметить, что состояние вещества, образующего ПС, - это принципиально «новое» состояние вещества. Оно не может быть отождествлено ни с одним известным агрегатным состоянием: твердым, жидким, газообразным или плазмой. По степени своей неустойчивости, специфичности условий возникновения и существования оно ближе к плазме, хотя, разумеется, физически ничего общего с плазмой не имеет. И хотя без этих состояний или ПС не обходится практически ни одно явление образования твердотельной структуры, например переход вода-лед, это состояние вещества с уникальными физическими характеристиками наблюдается исключительно редко. Причем эти наблюдения зачастую организованы искусственно с применением современных физических методов исследования. Только, пожалуй, в случае снежинок и узоров на стекле в сильный мороз мы можем наглядно видеть фотографии образов такого рода сильнонеравновесных процессов, происходивших в веществе. И эти наблюдения действительно поражают нас своей красотой, гармонией и скрытой в неорганическом веществе разумностью. По-видимому, фрактальная геометрия, которая описывает эти образы, имеет скрытую возможность передачи информации о микроскопических динамических процессах путем их фотографирования и визуального увеличения.

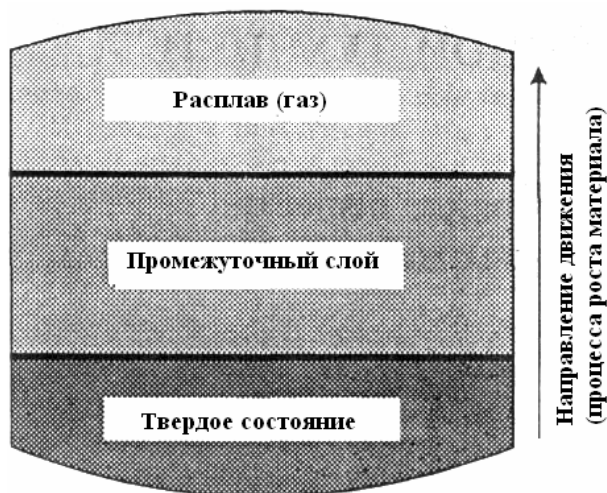


Рисунок 3 – Промежуточный слой в процессах роста твердотельных материалов

Трудности наблюдения «переходного» состояния вещества, хотя существует оно совершенно самостоятельно, связаны в первую очередь с тем, что в обычных условиях мы наблюдаем, как правило, равновесные или слабонеравновесные состояния газов жидкостей или твердых тел, в которых эти состояния не

возникают вообще. Даже в случае наблюдения сильнонеравновесных процессов, например кристаллизации воды, толщина ПС настолько мала (несколько десятков межатомных расстояний), что обнаружить их визуально не представляется возможным. Кроме того, они локализованы, как правило, на внутренних границах больших объемов вещества. Только с развитием физических методов исследования можно раздвинуть занавесь нашего привычного мировосприятия и увидеть, как бьется «сердце» живой материи.

Кроме того, только в последнее время с помощью современных методов нелинейной динамики и теории самоорганизации стало возможным теоретически обосновать самостоятельное существование промежуточных состояний вещества. Исходя из этого сегодня очевидно, что информация о физических характеристиках этих областей имеет важнейшее значение для понимания, моделирования и управления процессами роста материалов [19].

Эволюция вещества в промежуточном слое. Возможная физико-математическая модель процесса эволюции вещества в ПС показана на рисунке 4 [7]. Время t_0 соответствует начальному моменту попадания вещества в ПС или началу ПС. Вход ПС определяется случайными, стохастическими процессами в фазе, из которой идет рост (область 1). В ПС поведение вещества приобретает нелинейный, неустойчивый характер. Неустойчивости могут иметь различную природу: химические, вызываемые катализом и диффузией, гидро- и газодинамические неустойчивости смешанного типа.

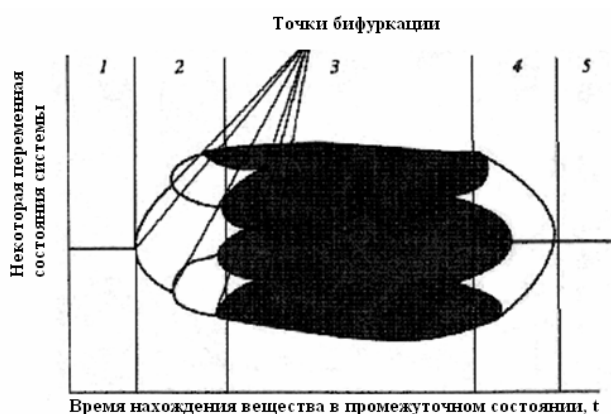


Рисунок 4 – Возможный сценарий эволюции вещества к твердотельному состоянию. Временная область состояния вещества:

1 - квазиравновесный тепловой хаос (газ, расплав); **2** — каскад бифуркаций; **3** - переходной режим детерминированного хаоса; **4** - простые аттракторы - циклы, точки и т.д.; **5** - глобальный аттрактор

Вещество, попадая в ПС, претерпевает последовательность трансформаций структуры - бифуркаций (область 2). Физически это означает возникновение новых структур в изначально неупорядоченном веществе в виде зародышей твердой фазы. С продвижением в ПС и корреляций между этими зародышами усиливаются и со временем завладевают всей системой. На языке динамики это соответствует увеличению числа бифуркаций. Далее возникает хаотический режим, который эволюционирует в соответствии с внешними условиями. По мере усиления корреляций между различными областями его размерность уменьшается. Он переходит в более простые режимы - предельные циклы, устойчивые точки (область 4). При $t \rightarrow \infty$ достигается равновесное, устойчивое состояние, соответствующее глобальному аттрактору (область 5).

Режим динамического хаоса аттрактором является по-видимому обязательной стадией процесса отвердевания [4, 7]. Он является переходным метастабильным режимом. В зависимости от внешних параметров продолжаться он может долго. Его не следует отождествлять с состоянием, соответствующим детерминированному хаотическому аттрактору, устанавливаемому при $t \rightarrow \infty$.

На рисунке 5 показан упрощенный возможный сценарий изменений: корреляций, конфигурации фазового объема, потенциальной энергии и распределения состояний для вещества, проходящего через ПС. Время "0" соответствует начальному моменту попадания вещества в ПС. Под временем можно понимать или реальное время, или пространственную координату в ПС, или критические значения управляющих параметров. Любой из этих параметров однозначно характеризует развитие процессов в ПС.

На «физической картине», отражающей состояние структуры вещества, темные участки соответствуют областям корреляций между атомами или молекулами вещества. Они постепенно расширяются и завладевают всем доступным пространственным объемом.

Фазовый объем состояния "0" в момент бифуркации "взрывается", приобретая форму фигуры со множеством "щупалец", которые соответствуют минимумам на потенциальной диаграмме. Физически это означает возникновение отличающихся друг от друга областей. Фазовый объем в процессе эволюции вещества в ПС сжимается вследствие усиления корреляций.

Физическая картина	Вид в фазовом пространстве	Вид на одномерной потенциальной диаграмме	Вид распределения состояний	Вид на бифуркационной диаграмме	Координаты и название слоя
					Момент времени "0"
					i -й момент времени управляющего параметра пространства, $i > 0$
					j -й момент времени управляющего параметра пространства, $j > i > 0$
					$t \rightarrow \infty$, конечный (глобальный) аттрактор достигнут

Рисунок 5 – Представление эволюции вещества в промежуточном слое с позиций теории сложных систем

На потенциальной диаграмме система обозначена черным квадратом. Ось ординат соответствует потенциалу системы, а ось абсцисс - времени пребывания вещества в ПС или расстоянию от его границы с фазой, из которой идет рост. Движение системы происходит по изрезанной фазовой поверхности с локальными минимумами, которые связаны с определенными метастабильными состояниями, с соответствующими аттракторами и структурами. Движущей силой эволюции является градиент некоторого управляющего параметра, например температуры.

Распределение состояний для системы имеет вид гауссовской кривой только в моменты времени "0" и "1". Момент "1" соответствует глобально устойчивому состоянию, достигаемому веществом, при времени эволюции, стремящемся к бесконечности.

На бифуркационной диаграмме ось абсцисс соответствует времени, ось ординат – переменной состояния системы. Система обозначена черным квадратом.

Рассмотрим механизмы процесса отвердевания [2]. Введем следующие обозначения: $x+$ - "замерзшие" (соответствующие твердому телу) состояния атомов вблизи границы ПС и твердого тела, $x-$ - состояния атомов тоже

вблизи этой границы, но отличные от $x+$. На границе существуют два конкурирующих процесса: диффузия и химическая реакция. Под химической реакцией понимается образование связей между атомами, соответствующих твердому телу. В стационарном режиме, когда отсутствует градиент управляющего параметра, скорости перехода $x+$ в $x-$ и обратно равны. Представим, что равновесие смещено в сторону процесса образования твердой структуры. В области, где преобладали состояния $x-$, увеличивается число зародышей $x+$. Наступает момент, когда скорость химической реакции становится больше скорости диффузии. Область, занимаемая $x-$, быстро сокращается в размерах и затем идет лавинообразный процесс образования состояний $x+$. Вещество "замерзает". Отвердевание можно рассматривать как результат нарушения равновесия между диффузией, разрушающей взаимосвязи между атомами, и химическими процессами, создающими их.

Структура получаемого материала определяется состоянием ПС, которое застает фронт "замерзания". Для достижения состояния глобального равновесия граница отвердевания должна двигаться со скоростью меньшей, чем внутренняя скорость выхода системы на него.

Для больших систем это время может быть очень длительным. По этой причине в реальных технологиях, когда число частиц порядка 10^{23} см³, т.е. сложность системы чрезвычайно велика, реализуется не чисто равновесное состояние "1", а множество неравновесных состояний. При достаточной длительности процесса большая часть из них может принадлежать области "1" (например, синтез кристаллов), а другая часть - состояниям внутри "0-1". При разных соотношениях состояний, принадлежащих областям "1" и "0-1", образуются: кристалл с дефектами, поликристалл, микрокристаллическая и аморфная структуры.

К природе невоспроизводимости структуры и свойств твердотельных материалов. Проблема неповторяемости выращиваемой структуры характерна для технологий многих некристаллических полупроводниковых материалов [7]. Это явление серьезно ограничивает возможности практического использования материалов. В кристаллах невоспроизводимость проявляется на уровне дефектов структуры, что ограничивает коэффициент выхода годных микроэлектронных элементов и устройств на их основе. Невоспроизводимость структуры и свойств - обычное явление и для материалов, формирующихся в естественных условиях. Формы снежинок, например, никогда не повторяются. Во всех случаях изменение степени повторяемости непредсказуемо.

В технологиях под воспроизводимостью обычно понимают степень повторения определенных характеристик материала от одного технологического процесса к другому при условии, что все регулируемые параметры этих процессов задаются одинаковыми с максимально возможной точностью.

Как правило, неповторяемость структуры материалов связывается с неточностью задания технологических условий от процесса к процессу. Поэтому главным способом ее улучшения является увеличение точности поддержания регулируемых параметров технологий. Сложность существующих технологических систем во многом обусловлена именно этим подходом. Однако такой принцип решения проблемы часто оказывается неэффективным и с его помощью невозможно реализовать современные требования, предъявляемые к материалам.

Наш подход к проблеме основан на рассмотрении вещества в процессе формирования твердотельной структуры как нелинейной самоорганизующейся системы. Предполагаем, что причины невоспроизводимости связаны не только с неточностью задания технологических

параметров, а прежде всего с особенностями динамики процессов роста.

Характерной особенностью хаотической динамики является неустойчивость и как следствие непредсказуемость и невоспроизводимость движения. Это означает, что начальные отклонения с течением времени нарастают, и в итоге малые причины приводят к большим следствиям. Именно неустойчивость движения в сочетании с неточностью поддержания параметров технологии и неустраняемыми флуктуациями является причиной невоспроизводимости структуры и свойств некристаллических, а в некоторых случаях и кристаллических материалов.

При увеличении точности задания управляющих параметров и начальных условий выше некоторого уровня самой главной и, причем, не устранимой причиной невоспроизводимости становятся флуктуации. К ним относятся неустраняемые полностью ни при каких обстоятельствах тепловые и квантовомеханические флуктуации, а также различные внешние поля и потоки (электромагнитные, гравитационные, нейтринные и др.), от воздействия которых нельзя полностью защитить растущий материал. Поскольку вещество в процессе отвердевания неустойчиво, то оно становится усилителем этих флуктуаций, т.е. по существу генератором случайности. Сочетание двух указанных факторов - наличие неустраняемых микрофлуктуаций, с одной стороны, и неустойчивости процесса отвердевания с другой, видимо следует считать фундаментальной причиной невоспроизводимости.

Невоспроизводимость возможна, потому что у каждого вещества существует большое число вариантов структуры. Например, структура микрокристаллических и аморфных материалов никогда не повторяется, по крайней мере, на микроуровне. Для них число вариантов структуры очень велико и сравнимо с числом составляющих ее атомов. Для многих веществ существуют различные модификации кристаллической решетки. Кроме того, в зависимости от условий роста в кристаллах возникают различные структурные неоднородности, а также меняется форма растущих кристаллов. Это означает, что существует большое число устойчивых модификаций структуры, которое с позиций динамики может рассматриваться как множественность аттракторов, к которым при тех или иных условиях роста стремится структура вещества. То, какая структура из множества возможных вариантов будет "выбрана" определяется внешними условиями и различными флуктуациями.

Таким образом, физическую схему явления невоспроизводимости можно представить следующим образом: флуктуации и неточность задания параметров технологии через неустойчивость динамики роста из-за наличия потенциала разнообразных вариантов структуры приводят к невоспроизводимости.

Все эти обстоятельства свидетельствуют о том, что случайность и вероятность являются необходимыми атрибутами процесса выращивания неупорядоченных и кристаллических полупроводников, например a-Si:H. Необходимо принять как объективность, а не проявление нашего временного незнания и не учета каких-либо факторов следующие обстоятельства:

- в точности воспроизвести структуру материала невозможно;

- появление той или иной структуры носит случайный, т.е. вероятностный характер. В результате переход от ансамблей в фазовом пространстве к индивидуальным траекториям становится невозможным. Статистические понятия перестают быть лишь приближениями к некоторой "объективной истине". Здесь происходит столкновение с весьма важным отклонением от классической теории: предсказуемы только вероятности, а не отдельные события [4].

Критерии воспроизводимости. Основная идея состоит в том, что поскольку структура аморфных материалов представляет собой "замороженный" динамический хаос, то критерии воспроизводимости должны быть связаны с инвариантами хаотической динамики. Наиболее привлекательными в этом смысле являются показатели Ляпунова, которые являются мерой неустойчивости движения [7, 20].

1. В качестве критерия можно использовать величину наибольшего положительного показателя Ляпунова или энтропию Колмогорова-Синяя (S_{KS}), равную сумме положительных показателей Ляпунова. Эти величины характеризуют среднюю скорость отклонения структуры вещества от того состояния, которое было реализовано в предыдущих технологических процессах.

2. Как уже говорилось, показатели Ляпунова характеризуют эволюцию траекторий системы в фазовом пространстве и определяют время корреляций в системе (τ_c). Но они мало что могут свидетельствовать о том, какова воспроизводимость в конечном итоге. Для этого необходим критерий, который связывал бы показатели Ляпунова и характеристики процесса со степенью невоспроизводимости.

Его можно получить из сравнения времени

нахождения вещества в промежуточном слое (ПС), т.е. собственно времени эволюции вещества при отвердевании t_{IL} с временем, в течение которого система еще хранит память о начальном состоянии, т.е. предсказуема или воспроизводима T_{max} .

Время пребывания вещества в промежуточном слое можно оценить следующим образом:

$$t_{IL} = d_{IL} / v_g, \quad (2)$$

где d_{IL} - толщина промежуточного слоя, v_g - скорость роста. T_{max} можно представить в виде [9]:

$$T_{max} = (\rho_D / \rho_S) \ln(1/\varepsilon), \quad (3)$$

где ρ_D - плотность фрактальной размерности, определяемой по алгоритму Грассбергера-Прокаччия [10], ρ_s - плотность энтропии, ε - точность задания начального состояния, определяемая отклонениями от нормы значений технологических параметров $\Delta\rho$ и флуктуациями различной природы f :

$$\varepsilon = \Delta\rho + f. \quad (4)$$

Если ε определяется только неточностью задания технологических параметров, то ее значение тоже можно определить экспериментально.

Формулу (3) можно записать иначе:

$$T_{max} = \frac{A}{\lambda_t} \ln\left(\frac{1}{\varepsilon}\right), \quad (5)$$

где A - константа, подлежащая вычислению, λ_t - наибольший временной показатель Ляпунова [7, 21]. Эти величины также могут быть определены экспериментально. В зависимости от соотношения t_{IL} и T_{max} возможны три варианта:

1) если $t_{IL} < T_{max}$, то структура вещества воспроизводится удовлетворительно;

2) если $t_{IL} \sim T_{max}$, то - частично;

3) если $t_{IL} > T_{max}$, то - плохо.

Из формул 4 и 2 следует, что T_{max} обратно пропорциональна v_g . Это обосновывает интуитивно найденный способ увеличения воспроизводимости характеристик кристаллов через уменьшение скоростей их выращивания. Наоборот, для аморфных материалов, в технологиях которых скорости роста сравнительно большие, воспроизводимость значительно хуже. И очевидным способом ее увеличения является уменьшение скорости роста.

3. Степень воспроизводимости можно охарактеризовать через среднюю взаимную информацию [22]. Этот критерий оказывается по смыслу близким к Ляпуновским показателям,

поскольку тоже используется для характеристики корреляций в нелинейных системах. Сущность его в следующем. Предположим, что в результате измерений какой-либо характеристики по поверхности материала, произведенного в первом технологическом процессе, получено множество $s(1)$, а во втором процессе - $s(2)$. (В качестве такой характеристики, например, может быть взята высота профиля поверхности, отсчитываемая от некоторого уровня, принятого за нулевой.) Средняя взаимная информация ($I(1, 2)$) между множествами $s(1)$ и $s(2)$, а именно среднее количество информации о $s(2)$, которое можно получить, имея $s(1)$, равно

$$I(1, 2) = \Sigma [P(s(1), s(2)) \times \log_2 [P(s(1), s(2)) / (P(s(1)) P(s(2)))]], \quad (6)$$

где $P(s(1))$ и $P(s(2))$ - функции вероятности для характеристик обоих материалов. $P(s(1), s(2))$ - совместная вероятность. Сумма берется по числу измерений [23].

Именно средняя взаимная информация, а не корреляционная функция, являющаяся средним по квадратичной полиномиальной статистике, описывает корреляции в нашей нелинейной системе. Средняя взаимная информация напрямую характеризует степень воспроизводимости и позволяет оценивать влияние на нее различных параметров. Экспериментально средняя взаимная информация может быть определена по профилю поверхности материала, гистограммам функции радиального распределения, спектрам оптического поглощения. И в этом смысле этот критерий можно достаточно просто вычислять для материалов, выращиваемых из расплава.

Критерии 1-3 могут быть рассчитаны с помощью методов и алгоритмов, используемых для определения характеристик нелинейных систем [10]. Они инвариантны относительно конкретных технологий и позволяют оценивать влияние на воспроизводимость различных факторов.

Следствием динамической неустойчивости процессов роста является существование предела воспроизводимости T_{lim} , который определяет предел точности задания параметров технологии, выше которого увеличение точности становится неэффективным. T_{lim} в определенном смысле аналогичен горизонту предсказуемости Дж. Лайтхилла, используемому в климатическом прогнозировании. Под пределом воспроизводимости будем понимать предельное время предсказуемого поведения формирующейся в промежуточном слое структуры, которое нельзя превзойти увеличением точности задания начальных условий роста и технологических параметров в

процессе роста. Другими словами T_{lim} отвечает пределу неустраимых флуктуации в процессах и может быть получен как предельное значение T_{max} при $\Delta p \rightarrow 0$

$$T_{lim} = \lim_{\Delta p \rightarrow 0} T_{max}. \quad (7)$$

Очевидно, что T_{lim} не может быть уменьшен. T_{lim} экспериментально определяется по зависимости T_{max} от Δp в тот момент, когда T_{max} перестает зависеть от Δp . Это означает, что f становится много больше Δp . По значению T_{lim} можно легко определить уровень неустраимых флуктуаций.

По пределу воспроизводимости можно оценить предел точности задания управляющих параметров технологического процесса, выше которого увеличение точности становится неэффективным и поэтому бессмысленным. Это позволяет экономить материальные и интеллектуальные ресурсы.

Предел воспроизводимости в некотором смысле аналогичен соотношению неопределенности Гейзенберга. И тот, и другой в физическом смысле означают, что все процессы и формы материи носят вероятностный характер. Соотношение Гейзенберга определяет это для субатомного уровня, а предел воспроизводимости - на уровне коллектива атомов. Оба соотношения отражают два различных уровня проявления одного и того же фундаментального закона Природы - существования иерархии неопределенностей.

В работе [24] доказано, что для показателей Ляпунова справедлива следующая зависимость от размера системы V

$$\lambda = C/V, \quad (8)$$

где C - константа. Под V можно понимать пространственный размер системы или число составляющих ее элементов. Из этого следует, что для меньших систем показатели Ляпунова и соответственно степень воспроизводимости, определяемая по соотношению T_{max} и t_{LL} (критерий 2) меньше, чем для больших систем той же природы.

Как показано в работе [24], в окрестности устойчивого состояния амплитуды внутренних флуктуаций ведут себя как $\frac{1}{V}$, а в критической точке они нарастают как величины порядка $V^{-1/2}$. Поэтому для больших систем, у которых число образующих их элементов велико, внутренние флуктуации чрезвычайно малы, а для малых систем они играют существенную роль наряду с внешними и тоже являются причиной уменьшения воспроизводимости. Другими словами, чем

меньший масштаб рассматривается, тем больше влияние флуктуационных, случайных сил. Если будем наблюдать поведение одного, двух, трех атомов, то вероятность определить по их поведению динамику системы чрезвычайно мала. При этом они могут находиться в составе большого ансамбля атомов, демонстрирующего когерентное упорядоченное движение, описываемое небольшим числом независимых переменных. Поэтому чем меньше масштаб рассматриваемого процесса, тем меньше шансов построить динамический прогноз [25].

Воспроизводимость можно оценить как величину обратно пропорциональную скорости нарастания возмущения в структуре вещества в процессе отвердевания R , которую можно определить по формуле:

$$R = \varepsilon \exp(\lambda t_{II}), \quad (9)$$

где ε определяется по формуле (4). С учетом проведенных выше рассуждений для R справедлива следующая зависимость от V :

$$R = (\Delta p + A/V^{1/2}) \exp(Ct_{II}/V). \quad (10)$$

Таким образом, уменьшение размеров системы приводит к уменьшению степени воспроизводимости.

Эта ситуация имеет отношение, например, к микроэлектронике, когда области материала микро- и наномасштабов являются элементами (приборами) и выполняют самостоятельные функции. При этом они интегрированы в единое целое, т.е. выполнены в едином объеме материала - подложке. Для таких структур проблема воспроизводимости будет острой и не сможет быть решена "классическими методами".

Факт, что невозможность воспроизводимости определяется неустойчивостью хаотической динамики, заставляет весьма скептически оценивать возможности использования традиционных приемов увеличения воспроизводимости через ужесточение точности задания управляющих параметров. Так, в соответствии с формулами (4) и (5) T_{\max} может быть увеличена, если уменьшать Δp . Однако, если пренебречь флуктуациями ($f = 0$), то уменьшение Δp на 5 порядков (практически очень трудно осуществить) увеличивает T_{\max} только в пять раз. Если учесть влияние флуктуации, то рост T_{\max} будет еще меньше.

Управление процессами роста твердотельных материалов с позиций нелинейной динамики. Поскольку, как было показано, вещество в процессе отвердевания представляет собой сложную самоорганизующуюся систему, то и управление им должно соответствовать принципам управления, выработанным приме-

нительно к такого рода объектам. В их основе должно лежать соответствие управляющих воздействий внутренним свойствам вещества, возникающим при отвердевании [2, 26].

Принцип совместимости отражает необходимость соответствия параметров управляющего воздействия внутренним свойствам вещества при отвердевании.

Управляющая система должна понимать и воспроизводить язык, на котором говорит управляемая система. При этом достигается максимальная эффективность управления. Важны не столько интенсивность и продолжительность воздействия, сколько соответствие свойствам среды.

Следует иметь в виду, что достичь 100 % эффективности невозможно из-за всегда присутствующей неопределенности в поведении сложной системы. Это фундаментальное свойство.

Из принципа совместимости следуют три важных вывода:

1) для того чтобы система могла воспринимать управляющие воздействия как информацию, понятную для себя, и генерировать на этой основе новую информацию, проявляющуюся в виде новых свойств материала, необходимо создание первичных условий для реализации сложного поведения, т.е. необходимо поддержание в системе условий для самоорганизации. В противном случае получим замкнутую систему, глухую ко всяким попыткам диалога с ней. Это означает, что предварительно система должна быть переведена в неравновесное неустойчивое состояние. Для этой цели вполне пригодны традиционные технологические системы, в которых эти условия уже созданы;

2) говоря о соответствии управляющих воздействий внутренним свойствам вещества, мы имеем в виду коллективные свойства системы, проявляющиеся как следствие самоорганизации;

3) система контроля должна быть построена на очень точном знании фазового пространства и динамики системы – вещества. Эти сведения могут быть собраны из наблюдений над системой по методу Такенса. Особенностью управления является то, что для достижения контроля над системой необходимо маневрирование незначительными изменениями параметров.

При этом необходимо исходить из того, что все процессы роста проходят через стадию пространственно-временного хаоса. Следовательно, возможно использование способов,

применяемых для управления нелинейными хаотическими системами: хаотического привода, увеличения внешнего шума, стабилизации неустойчивых орбит хаотического аттрактора, ускорения перехода через точку бифуркации [2].

Выбор метода определяется целями технологий. Например, если требуется вырастить совершенную кристаллическую структуру или воспроизвести какую-либо структурную неоднородность, то необходимо быстро преодолеть стадию хаоса и стабилизировать периодическую динамику системы, например, методом Грибожди – Отто – Йорке, с помощью которого стабилизируются нестабильные орбиты хаотического аттрактора [2]. Для синтеза аморфных материалов наоборот полезным будет хаотический привод. Если ставится задача устранения макро-неоднородностей, то необходимо разрушение нелинейной суперпозиции ограниченного числа мод. Во всех случаях характеристики этих управляющих воздействий должны формироваться на основе точного знания динамики вещества при отвердевании.

Принцип иерархии. Природа имеет иерархическое строение. Иерархичность строения – это предоставление относительной автономности различным уровням системы, подчиненным главному регулятору, но вместе с тем это и вынужденный отказ от контроля над всеми изменениями, происходящими в системе. Механизмы функционирования на разных уровнях могут значительно различаться. Это означает, что управление тоже должно быть построено по иерархическому принципу. Поэтому при постановке задачи управления должно быть проведено расчленение системы на уровни и выбран уровень, ответственный за требуемые нам свойства.

Для технологий материалов это означает, что для целей управления должен быть выбран определенный уровень: нано-, микро-, структурно-химических неоднородностей и т.д. Затем должна быть исследована динамика этого уровня и выработаны соответствующие управляющие воздействия. Затем, в соответствии с закономерностями динамической эволюции этого уровня, должны быть выработаны управляющие воздействия.

Поэтому возникает проблема неполного управления, т.е. управлять можно только некоторыми уровнями, ответственными за определенные свойства.

Принцип адекватности. Системы управления должны иметь, по-видимому, такой же порядок сложности, как и системы, которыми они управляют, т.е. набор возможных режимов

поведения управляющей системы должен быть не менее богатым. Вообще говоря, нужно устройство для управления такой сложности, чтобы оно самостоятельно могло непрерывно искать связи, статистические корреляции и оптимизировать состояния определенных сторон управляемой системы [2]. В противном случае управление как итеративный процесс для некоторых областей фазового пространства управляемой системы может оказаться неэффективным.

Между человеком как источником намерений и системой, производящей материал, должен существовать промежуточный блок (или собственно аппарат управления), позволяющий реализовать выработанные намерения в воздействии, понятные объекту управления и способные к синхронизации с режимами, которые могут возникнуть у этого объекта. При этом не требуется полной информации об этом блоке, т.е. необязательно знать, что и как там происходит. Важно лишь то, что он в состоянии перевести наши намерения на язык управляемой системы. Этот блок можно назвать “черным ящиком” (ЧЯ).

ЧЯ должен быть сконструирован по принципу природных сложных, самоорганизующихся систем. В качестве его могут быть использованы как искусственные, так и природные системы. Черный ящик сам по себе, с точки зрения человека, представляется как недетерминированный блок, то есть он привносит неопределенность во всю систему управления, но обойтись без него, по-видимому, нельзя.

Принцип локальности. Самоорганизация есть процесс, в течение которого системой можно управлять. Она имеет ограниченные пространственные и временные масштабы и протекает в промежуточном слое. Воздействия в пространстве и времени должны быть локализованы, т.е. ориентированы в конечном итоге на ПС. Этот принцип существенно упрощает процесс управления, т.к. все возможные факторы, влияющие на свойства получаемых материалов, сворачиваются или замыкаются в конечном итоге в ПС. Управление процессами в ПС равнозначно управлению системой в целом.

При этом наиболее эффективное и экономичное управление достигается при условии согласования, "резонанса" управляющих воздействий с внутренними динамическими процессами в ПС. Для этого необходимо знание динамики в ПС. Информация о ней может быть, в частности, получена в результате измерения временной последовательности любой харак-

теристики ПС *in situ* или фрактальной размерности различных иерархических уровней структуры материала.

Принцип неопределенности. В любом случае следует иметь в виду, что усилия, направленные на увеличение эффективности управления или воспроизводимости, не могут изменить вероятностного, случайного характера образования той или иной структуры. При этом следует отметить, что возможности методов управления на основе динамики на сегодня ограничены. Это связано с проблемами в проведении эксперимента и с трудностями построения модели и выработки управляющих воздействий. В этом смысле наиболее перспективным является использование для улучшения воспроизводимости методов биологической репродукции, которые с высокой точностью воспроизводят самые разнообразные формы, несмотря на существенные помехи со стороны окружающей среды.

Однако при этом существуют более глубокие физические причины, ограничивающие возможности воспроизведения структур, генерируемых в результате сложных нелинейных процессов. Рассмотрим их подробнее.

Неустойчивость в больших системах взаимодействующих частиц является неустрашимой и фундаментальной чертой. Она обусловлена существованием резонансов между степенями свободы.

Схема управления ростом материала. Исходя из этих принципов можно составить общую схему управления процессами роста материалов (рисунок 6) [2].

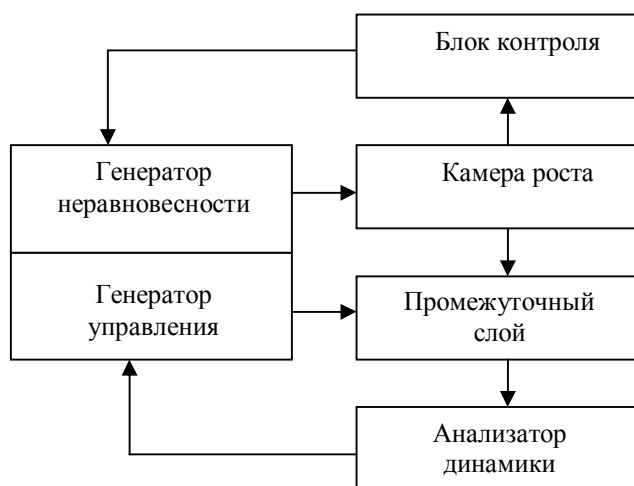


Рисунок 6 – Общая схема управления процессами роста материалов

Генератор среды создает и поддерживает неравновесные условия в технологической установке, необходимые для перехода от

жидкого (газообразного) состояния вещества к твердотельному. Блок контроля предназначен для регулировки параметров процесса.

Цепь генератор среды - технологическая установка - блок контроля образует первый контур управления, который, по существу, представляет собой блок-схему традиционной технологической установки. Второй контур управления включает принципиально новые элементы. Динамические сигналы непосредственно от вещества, находящегося в промежуточном слое, поступают в анализатор динамики. Последний сравнивает ее со своим исходным заданием и выдает сигнал на генератор управления. Само задание формируется на основе корреляций между динамическими характеристиками роста и свойствами выращенного материала.

Закключение. Природа невоспроизводимости выращиваемой структуры твердотельных элементов остается сегодня одной из самых острых проблем в микро- и нанoeлектронике. Ее существование обычно связывают с отклонениями от нормы некоторых технологических параметров, а главным способом улучшения воспроизводимости считается повышение точности их задания. Однако такой подход часто оказывается неэффективным. Одной из причин этого является отсутствие критериев, позволяющих оценивать влияние на воспроизводимость различных факторов. Проведенный анализ результатов исследований по данному вопросу позволяет сделать вывод, что проблема невоспроизводимости носит не технический, а фундаментальный характер и связана со сложным поведением вещества в процессе формирования твердотельной структуры. В рамках данной статьи показано:

- процесс роста слоев с позиций динамики соответствует режиму самоорганизации, который может быть описан ограниченным числом степеней свободы; распределение вещества по поверхности, представляющей собой “замороженный” мгновенный снимок процессов роста, имеет детерминированный хаотический характер;

- на границах раздела фаз в системах выращивания твердотельных материалов существуют промежуточные слои, свойства которых отличаются от свойств пограничных объемов. Вещество в ПС находится в сильно-неравновесном неустойчивом состоянии (бифуркации) и проходит через стадию динамического хаоса;

- в природе невоспроизводимости струк-

туры и характеристик твердотельных материалов лежит динамическая неустойчивость процессов роста, связанная с динамическим хаосом, в сочетании с неустраняемыми флуктуациями. Разработаны динамические критерии для оценки степени воспроизводимости, основанные на характеристиках нелинейных систем, определен ее фундаментальный уровень, на который не влияет увеличение точности задания параметров технологии, установлены возможные способы увеличения воспроизводимости.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования РФ, ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы.

Библиографический список

1. Лем С. Сумма технологий. – М.: Мир, 1968. 608 с.
2. Новая концепция технологии твердых материалов: учеб. пособие / Н.В. Бодягин, С.П. Вихров, А.А. Айвазов. Рязань: РГРТА, 1996. 64 с.
3. Бодягин Н.В., Вихров С.П. Проблемы технологий полупроводниковых материалов и закономерности формирования их структуры с позиций теории нелинейных систем и системного анализа // Вестник РГРТА. 2001. Вып. 9. С. 64-71.
4. Николис Г., Пригожин И. Познание сложного. – М.: Мир, 1990. 342 с.
5. Бодягин Н.В. Области критического состояния вещества в технологиях твердотельных материалов // Известия вузов. Сер. Электроника. 1997. № 2. С. 31-35.
6. Вихров С.П., Бодягин Н.В., Ларина Т.Г., Мурсалов С.М. Процессы роста неупорядоченных полупроводников с позиций теории самоорганизации // ФТП. 2005. Т. 39. Вып. 8. С. 953-959.
7. Природа невоспроизводимости структуры и свойств материалов для микро- и нанoeлектроники: учеб. пособие / Н.В. Бодягин, С.П. Вихров, Т.Г. Ларина, С.М. Мурсалов, В.Н. Тимофеев. Рязань: РГРТА, 2004. 64 с.
8. Вихров С.П., Айвазов А.А., Бодягин Н.В. Рост твердотельных материалов как явление самоорганизации // Вестник РГРТА. 1996. Вып. 1. С. 77-84.
9. Николис Дж. Динамика иерархических систем. Эволюционное представление. М.: Мир, 1989. 486 с.
10. Малинецкий Г.Г., Потапов А.Б. Современные проблемы нелинейной динамики. М.: Эдиториал УРСС, 2000. – 336 с.
11. Процессы самоорганизации в неупорядоченных материалах: учебное пособие // Т.Г. Авачева, Н.В. Бодягин, С.П. Вихров, С.П. Мурсалов. Рязань: РГРТУ, 2007. 56 с.
12. Бодягин Н.В., Вихров С.П., Айвазов А.А. Динамика роста твердотельных материалов // Известия вузов. Электроника. 1997. № 3-4. С. 7-10.
13. Ababanel H.D.I., Brown R., Sidorovich J.J., Tsimiring L.S. The Analysis of Observed Chaotic Data in Physical Systems. - Rev. Mod. Phys. 1993. V.65, №4, p.1331-1392.
14. Неопределенность и необратимость физических процессов: учеб. пособие/ С.П. Вихров, Н.В. Бодягин, Т.Г. Ларина. Рязань: РГРТА, 2005. 72 с.
15. Бодягин Н.В., Вихров С.П. Пространственно-временной хаос в процессе образования твердотельного состояния // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 23. Вып. 19. С. 77-80.
16. Bodyagin N.V., Vikhrov S.P., Mursalov S.M., Larina T.G. Diagnostics of the structure and amorphous materials growth process by nonlinear dynamics method // J. of optoelectronics and advanced materials. 2003. Vol. 5. No. 5. Pp. 1293-1298.
17. Bilgram J.H., Guttinger H., Kanzig W. Fluctuations of the ice-water interface during solidification. - Phys. Rev. Lett. v.40, №40, pp.1394-1397.
18. Айвазов А.А., Бодягин Н.В., Вихров С.П. Технология получения материалов с позиций теории систем // Электронная промышленность. 1995. № 4-5. С. 39-43.
19. Aivazov A.A., Bodyagin N.V., Vikhrov S.P. Intermediate layers in the a-Si:H growth processes. - 1996 Material Research Society USA Spring Meeting Proceedings, Amorphous Silicon Technology. 1996, v.420, pp.467-471.
20. Авачева Т.Г., Балашов Е.В., Вихров С.П., Бодягин Н.В., Мурсалов С.М., Старов П.Е. Исследование структуры поверхности неупорядоченных материалов с применением теории самоорганизации и атомно-силовой микроскопии. // Вестник РГРТУ. Вып. 23. Рязань, 2008. С. 118-121.
21. Bodyagin N.V., Vikhrov S.P., Mursalov S.M., Larina T.G. Diagnostics of the structure and amorphous materials growth process by nonlinear dynamics method // J. of optoelectronics and advanced materials. 2003. Vol. 5. No. 5. Pp. 1293-1298.
22. Авачева Т.Г., Бодягин Н.В., Вихров С.П., Мурсалов С.М. Исследование самоорганизации неупорядоченных материалов с применением теории информации // Физика и техника полупроводников. 2008. Т. 42. Вып. 5. С. 513-518.
23. Мурсалов С.М., Бодягин Н.В., Вихров С.П. О расчете корреляций в структуре поверхностей твердотельных материалов // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 26. Вып. 15. С. 53-57.
24. Grassberger P. Information content and predictability of lumped and distributed dynamical systems. - Physica Scripta. 1989, v.40, p.346-353.
25. Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы. - М.: Мир. 1987. 397 с.
26. Новый подход к построению технологических систем на примере роста слоев a-Si:H: учеб. пособие / С.П. Вихров, Н.В. Бодягин. Рязань: РГРТА, 1994. 108 с.