

На правах рукописи



Рыбина Наталья Владимировна

**ИССЛЕДОВАНИЕ САМООРГАНИЗАЦИИ В СТРУКТУРЕ
ПОВЕРХНОСТИ АМОРФНОГО ГИДРОГЕНИЗИРОВАННОГО
КРЕМНИЯ МОДИФИЦИРОВАННЫМ МЕТОДОМ
ФЛУКТУАЦИОННОГО АНАЛИЗА**

01.04.10 – Физика полупроводников

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Рязань 2013

Работа выполнена на кафедре биомедицинской и полупроводниковой электроники ФГБОУ ВПО "Рязанский государственный радиотехнический университет"

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор
Вихров Сергей Павлович

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор
Шерченков Алексей Анатольевич

доктор технических наук, профессор
Андреев Владимир Викторович

Ведущая организация: Учреждение Российской академии наук
Институт общей и неорганической химии
им. Н.С. Курнакова (г. Москва)

Защита диссертации состоится “ 26 ” ноября 2013 года в 11 часов на заседании диссертационного совета Д 212.211.03 в ФГБОУ ВПО "Рязанский государственный радиотехнический университет" по адресу: 390005, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке университета.

Автореферат разослан “ 9 ” октября 2013 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,  д.ф.-м.н., проф. Чиркин М.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность

В настоящее время для производства большого количества приборов микро- и нанoeлектроники используется кристаллический кремний. Но несмотря на наличие ряда преимуществ и хорошо отработанной технологией производства, возможности использования его в качестве элементной базы будущих технологий ограничены. К недостаткам кристаллического кремния относится отсутствие возможности производства на его основе элементов с размерами активных областей меньше 10 нм вследствие эффекта туннелирования, в области солнечной энергетики – высокая стоимость монокристаллического кремния.

Поэтому широкое применение в электронике получил аморфный гидрогенизированный кремний (a-Si:H), лишенный указанных недостатков. Перспективы использования неупорядоченных полупроводников в целом и a-Si:H в частности при производстве электронных и фотоэлектрических устройств обуславливается наличием у них ряда уникальных свойств, возможностью низкотемпературных процессов осаждения при получении, а также относительно небольшой стоимостью готовых приборов. Поскольку неупорядоченные материалы представляют собой диссипативные структуры, формирующиеся в неравновесных условиях с нарушением симметрии, в термодинамически открытой нелинейной системе, то в будущем на их основе можно создавать самоорганизующиеся гетерогенные системы, обладающими широкими функциональными возможностями.

В этой связи исследование неупорядоченных материалов представляет значительный интерес. Одной из актуальных научных задач является выявление корреляционных зависимостей между структурой материала и параметрами технологических режимов. Это связано с тем, что в технологии производства неупорядоченных полупроводников остается ряд нерешенных проблем, а именно – невозпроизводимость свойств и деградация структурных параметров со временем.

Зачастую заданные характеристики материалов получаются при длительном подборе параметров технологических режимов. Причина данной проблемы – в отсутствии определенных знаний о механизмах структурообразования в процессе роста материалов. Поэтому для ее решения требуется использование методов исследования структуры материала, методов выявления корреляций между структурой и условиями получения материала.

В настоящее время существует достаточно много методов исследования структуры материалов, среди которых можно отметить дифракционные методы, рентгеноспектральный анализ, методы колебательной спектроскопии, просвечивающую электронную микроскопию. Исследовать поверхностные особенности структуры можно зондовыми методами: сканирующей зондовой микроскопией и растровой электронной микроскопией.

Однако указанные методы наиболее эффективны для исследования материалов, полученных в равновесных условиях. Они позволяют хорошо оценивать структурные особенности на уровнях ближнего и дальнего порядка, но являются неинформативными на уровне среднего порядка, характерного для неупорядоченных систем.

Синтез неупорядоченных полупроводников происходит при неравновесных условиях, поэтому здесь требуется использование других, принципиально новых подходов. Одним из перспективных подходов представляется рассмотрение процессов структурообразования неупорядоченных полупроводников как самоорганизующихся. Правомерность применения данного подхода обуславливается наличием сильнонеравновесных условий формирования структуры, с нарушением симметрии, в термодинамически открытой нелинейной системе.

Поскольку поверхность материалов несет в себе информацию о структуре в объеме, если поверхность сформирована в процессе роста, то одним из информативных методов контроля свойств является анализ структурной сложности профиля поверхности материалов. При этом необходимо учитывать, что во время роста материала на формируемый рельеф оказывает влияние подложка, на которую материал осаждается.

Поиск корреляций в структуре поверхности ранее осуществлялся путем обработки результатов исследования поверхности такими методами, как Фурье-анализ, вейвлет-преобразование и др. Однако данные методы являются информативными только для линейных систем.

Наиболее результативной в этой области оказалась методика исследования порядка в структуре поверхности материалов, построенная на основе теории информации и методе вложения Ф. Такенса. Суть данной методики заключается в расчете средней взаимной информации (СВИ) по ненаправленному вектору, в результате чего получается распределение СВИ. Векторы, характеризующие расположение пиков на распределении СВИ, соответствуют наличию корреляций в структуре поверхности. Но определить тип корреляций на различных пространственных масштабах данная методика не позволяет. Поэтому в диссертационной работе предложено использовать метод двумерного флуктуационного анализа с исключенным трендом (detrended fluctuation analysis, далее – 2D DFA) для выявления корреляций в структурах, синтезированных в неравновесных условиях, на уровнях ближнего, среднего и дальнего порядка.

Цель диссертационной работы – исследование самоорганизации в структуре поверхности тонких пленок аморфного гидрогенизированного кремния в зависимости от параметров технологических режимов их получения модифицированным методом флуктуационного анализа.

Основные задачи:

1. Анализ методов исследования структуры неупорядоченных полупроводников и методов обработки изображений поверхности материалов, позволяющих изучать процессы структурообразования.
2. Разработка методики исследования самоорганизации в структуре поверхности неупорядоченных материалов.
3. Создание модельных поверхностей с различной степенью упорядоченности и их обработка с помощью модифицированного метода 2D DFA для разработки шкалы значений скейлингового показателя.
4. Исследование шероховатости поверхности образцов a-Si:H зондовыми методами и анализ ее изменения в зависимости от параметров технологических режимов получения образцов.
5. Исследование корреляционных свойств структуры поверхности образцов a-Si:H с помощью модифицированного метода 2D DFA в зависимости от параметров технологии их получения.

Основными объектами исследований являлись тонкопленочные полупроводниковые структуры на основе аморфного гидрогенизированного кремния, полученные методами тлеющего разряда (ТР) и импульсного лазерного напыления (в англоязычной литературе pulsed laser deposition – PLD), и тетраэдрического аморфного углерода (ta-C), полученные методом PLD.

Научная новизна представленных в работе результатов заключается в следующем:

1. Впервые предложена методика определения степени упорядоченности структуры материалов, полученных в неравновесных условиях в результате процессов самоорганизации, заключающаяся в нахождении функции корреляций по величине скейлингового показателя и корреляционных векторов по перегибам на зависимости флуктуационной функции от масштаба.
2. Разработана шкала скейлингового показателя для диагностики корреляционных свойств структуры поверхности материалов по результатам исследования модельных поверхностей с различной степенью упорядоченности методом 2D DFA.
3. Выявлены тип корреляций, длины корреляционных векторов на различных масштабах, степень упорядоченности структуры поверхности образцов a-Si:H, выращенных методами ТР и PLD, при совместном использовании модифицированного метода 2D DFA и расчета СВИ.
4. Установлены корреляционные зависимости между структурой поверхности образцов a-Si:H и параметрами технологических режимов их получения (температурой подложки, временем осаждения).

Положения и результаты, выносимые на защиту

1. Методика исследования самоорганизации в структуре поверхности, сформированной в процессе роста неупорядоченных полупроводников, на

уровнях ближнего, среднего и дальнего порядка, основанная на методе флуктуационного анализа с модифицированной двухмерной реализацией, заключающаяся в нахождении функции корреляций по величине скейлингового показателя и корреляционных векторов по перегибам на зависимости флуктуационной функции от масштаба.

2. Шкала скейлингового показателя, полученная на основе модельных поверхностей от полностью хаотической до упорядоченной, позволяющая оценивать степень организации структуры поверхности неупорядоченных твердотельных материалов путем сопоставления с ней результатов исследования.

3. Экспериментальные результаты по исследованию процессов самоорганизации в структуре поверхности образцов a-Si:H, полученных методом тлеющего разряда, показывающие, что в структуре поверхности присутствует гармоническая составляющая с наложением коррелированного шума; длина вектора корреляций менялась от 170 нм (для образца, полученного при температуре подложки $T_{подл}=170^{\circ}\text{C}$) до 770 нм (для образца, полученного при $T_{подл}=220^{\circ}\text{C}$).

Достоверность научных результатов работы обеспечивается использованием независимых методов исследования (атомно-силовая микроскопия (АСМ), растровая электронная микроскопия (РЭМ), рамановская спектроскопия), а также метода обработки изображений поверхности, позволяющего исследовать процессы самоорганизации (расчет СВИ), проведением экспериментальных исследований на сертифицированном научном оборудовании и отсутствием противоречий с общепринятыми физическими законами.

Личный вклад автора. Результаты диссертационной работы получены автором лично на кафедре биомедицинской и полупроводниковой электроники и в РЗЦМкп РГРТУ, а также в ходе научно-исследовательских стажировок в лабораториях Университета прикладных наук (Hochschule Mittweida, Германия), в центре коллективного пользования «Диагностика структуры и свойств наноматериалов» Белгородского государственного университета.

Практическая значимость работы заключается в следующем:

– Разработана методика исследования самоорганизации в структуре поверхности неупорядоченных твердотельных материалов на основе модифицированного метода 2D DFA, которая позволяет изучать механизмы структурообразования материалов, получаемых в неравновесных условиях, на уровнях ближнего, среднего, дальнего порядков.

– Разработана шкала скейлингового показателя для определения степени упорядоченности структуры поверхности по виду получаемых с помощью модифицированного метода 2D DFA зависимостей флуктуационной функции от масштаба разбиения изображения исследуемой поверхности.

– Результаты экспериментально исследованных методом 2D DFA поверхностей образцов неупорядоченных полупроводников, полученных методами тлеющего разряда и импульсного лазерного напыления, позволили провести анализ зависимости корреляционных свойств структуры поверхности от параметров технологических режимов роста. Это дает возможность выбора параметров технологических режимов при получении неупорядоченных полупроводников для определенных целей.

Апробация. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на VII и VIII международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники» (г. Санкт-Петербург, 2010, 2012), школе молодых ученых «Современные проблемы наноэлектроники, нанотехнологий, микро- и наносистем» (г. Абрау-Дюрсо, 2010), III всероссийской школе-семинаре студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению «Наноматериалы» (г. Рязань, 2010), II международной конференции «Образование для сферы нанотехнологий: современные подходы и перспективы» (г. Долгопрудный, 2011), XIII международной конференции «Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы» (г. Ульяновск, 2011), всероссийской школе-семинаре студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению “Диагностика наноматериалов и наноструктур” (г. Рязань, 2011), научно-практической конференции «Инновации в науке, производстве и образовании» (г. Рязань, 2011), V Всероссийской школе-семинаре студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению “Диагностика наноматериалов и наноструктур” (г. Рязань, 2012).

Публикации. Основные результаты опубликованы в 22 научных работах, из них 7 статей (по специальности) в журналах из списка ВАК, 3 статьи в других изданиях, 12 тезисов докладов на российских и международных конференциях.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из списка сокращений, введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 98 наименований. Диссертация изложена на 144 страницах машинописного текста, содержит 14 таблиц и 53 рисунка.

Внедрение результатов. Полученные экспериментальные результаты использованы при подготовке отчетов о научно-исследовательских работах НИР 22-12Г, 13-09Г, 6-09, 15-11, 19-12, 17-12.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулированы цель и задачи диссертации, отражены новизна и практическая значимость работы, представлена структура диссертации.

В **первой главе** рассмотрены перспективы использования неупорядоченных полупроводников для создания самоорганизующихся систем. Рассмотрены проблемы современных технологий получения неупорядоченных материалов: невоспроизводимость структуры и свойств, метастабильность структуры, несовершенство алгоритмов оптимизации технологий.

Проведен анализ методов исследования структуры неупорядоченных полупроводников и методов обработки изображений поверхности материалов, позволяющих изучать процессы структурообразования. Было показано, что в лучшем случае эти методы несут информацию о ближнем и дальнем порядке в расположении атомов, но не содержат исчерпывающих данных о среднем порядке, характерном для неупорядоченных систем.

Рассмотрены процессы структурообразования неупорядоченных полупроводников с позиций теории самоорганизации. Использование теории самоорганизации основывается на том, что структура неупорядоченных материалов формируется в сильнонеравновесных условиях с нарушением симметрии в термодинамически открытой нелинейной системе.

Вторая глава посвящена разработке модифицированного метода флуктуационного анализа для диагностики корреляционных свойств структуры поверхности материалов.

Основным недостатком традиционных методов исследования структуры поверхности материалов является то, что они не учитывают важный параметр – пространственный масштаб, или дают ему точечную оценку без учета близлежащих областей, поэтому не способны полностью описать и классифицировать структурную сложность профиля поверхности материалов.

Лишенным указанных недостатков является метод флуктуационного анализа с исключенным трендом (DFA). Использование данного метода применительно к неупорядоченным материалам основано на идее, что их поверхность обладает фрактальными свойствами. В диссертационной работе предложено использовать метод DFA к исследованию изображений двумерных поверхностей неупорядоченных полупроводников, полученных средствами электронной сканирующей и атомно-силовой микроскопии.

Модифицированный для исследования корреляционных свойств структуры поверхности неупорядоченных полупроводников метод 2D DFA заключается в следующем:

1. Имеется самоподобный или самоаффинный интерфейс поверхности, представленный матрицей высот $H(i,j)$, где $i=1,2,...M$, и $j=1,2,...N$. Вычисляется кумулятивная поверхность $Y(i,j)$:

$$Y(i, j) = \sum_{n=1}^i \sum_{m=1}^j H(i, j). \quad (1)$$

2. Кумулятивная поверхность разбивается на $M_s \times N_s$ непересекающихся квадратных сегментов (рис. 1) размером $s \times s$, причем $M_s = M/s$ и $N_s = N/s$. В каждом сегменте формируется поверхность вида $Y_{u,w}(i,j)=Y(l1+i,l2+j)$, для $1 \leq i,j \leq s$, где $l1=(u-1)s$ и $l2=(w-1)s$, где u, w – номера сегментов.



Рисунок 1 – Иллюстрация разбивки изображения поверхности на сегменты различного размера

3. В каждой поверхности $Y_{u,w}(i,j)$ вдоль всех профилей по любой из осей или по оси быстрого сканирования для случая АСМ вычисляется полиномиальная функция тренда первого порядка вида:

$$\tilde{Y}_{u,w}(i, j) = a \cdot i + b \quad (2)$$

$$\text{или } \tilde{Y}_{u,w}(i, j) = a \cdot j + b. \quad (3)$$

4. Вычисляется функция остатка (*detrending surface*):

$$\varepsilon_{u,w}(i, j) = Y_{u,w}(i, j) - \tilde{Y}_{u,w}(i, j). \quad (4)$$

5. Вычисляется локальная среднеквадратическая флуктуационная функция, имея в виду, что $\langle \varepsilon_{u,w}(i, j) \rangle = 0$:

$$F(s, u, w) = \sqrt{\frac{1}{s^2} \sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^s \varepsilon_{u,w}(i, j)^2}. \quad (5)$$

6. Вычисляется полная среднеквадратическая флуктуационная функция путем усреднения всех значений (5):

$$F(s) = \frac{1}{M_s \cdot N_s} \sum_{u=1}^{M_s} \sum_{w=1}^{N_s} F(s, u, w). \quad (6)$$

7. Далее масштаб s изменяется в диапазоне от $s_{\min} \approx 4$ до $s_{\max} \approx \min(M, N)$ или $s_{\max} \approx \min(M, N)/4$ и вычисляется $F(s)$, причем для широких диапазонов значений s справедлива следующая зависимость $F(s) \sim s^a$.

Была проведена апробация метода 2D DFA на модельных поверхностях с целью интерпретации полученных графиков для определения степени упорядоченности структуры. Один из примеров апробации приведен на рис. 2.

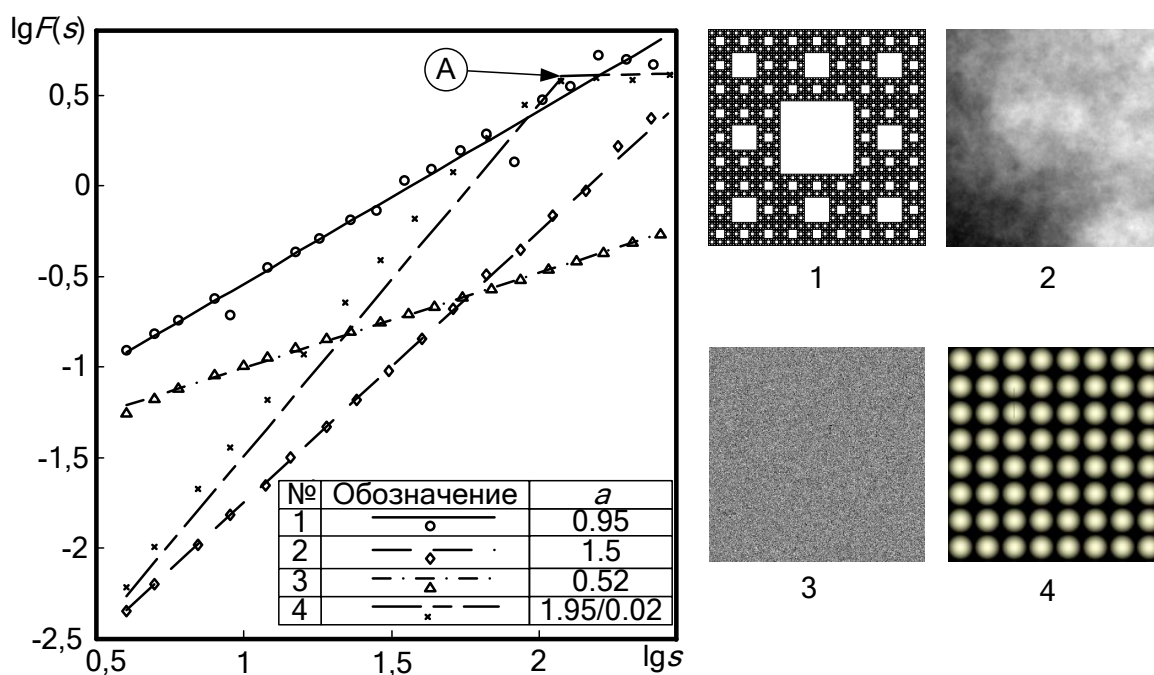


Рисунок 2 – Расчет скейлингового показателя для модельных поверхностей: 1 – ковер Серпинского, 2 – броуновская поверхность, 3 – гауссов шум; 4 – кластеры

Как видно, для первых трех поверхностей характерна монофрактальность, то есть зависимость $\lg F(s)$ от $\lg s$ – прямая линия. Это типично для регулярных фракталов, поскольку при изменении масштаба структура поверхности не меняется. Для моделей «Броуновская поверхность» и «Гауссов шум» визуально хоть и наблюдается зашумленность поверхности, однако этот шум является фрактально однородным, и поэтому для них характерна монофрактальность. При этом получились типичные значения скейлингового показателя: 1.5 для броуновской поверхности и 0.52 для гауссова шума. Для модели «Кластеры» наблюдается перегиб на зависимости $\lg F(s)$ от $\lg s$: сначала значение a приближается к 2, а далее переходит в 0, что говорит об отсутствии любых флуктуаций выше указанного масштаба, т.е. произошла фиксация амплитуды периодического процесса. Таким образом, такой вид зависимости $\lg F(s)$ от $\lg s$ будет характерен для всех поверхностей, обладающих дальним порядком (например, идеальный монокристалл).

Для объяснения эффекта кроссовера в случае исследования двумерных поверхностей рассмотрим, что будет происходить при сложении двух синтезированных поверхностей: белого шума и синусоидальной решетки (рис. 3). Точками кроссовера здесь будут квадратные фрагменты с длиной ребра, соответствующей длине колебаний T синусоидальной решетки.

Синтетическую поверхность можно представить в виде простого выражения:

$$S = k_1 \cdot S_{\sin} + k_2 \cdot S_{\text{noise}} \quad (7)$$

где $S_{\sin}$ – периодическая составляющая, S_{noise} – шумовая составляющая, k_1 , k_2 – коэффициенты, определяющие соотношение амплитуд смешиваемых процессов (в данном случае 1:1).

При увеличении амплитуды шума кроссовер размывается, пока полностью не пропадет и, наоборот, при росте периодической составляющей на определенных соотношениях коэффициентов кроссовер начинает фиксироваться и левый наклон скейлинга стремится к 2. Такую тенденцию можно интерпретировать как рост упорядоченности профиля поверхности.

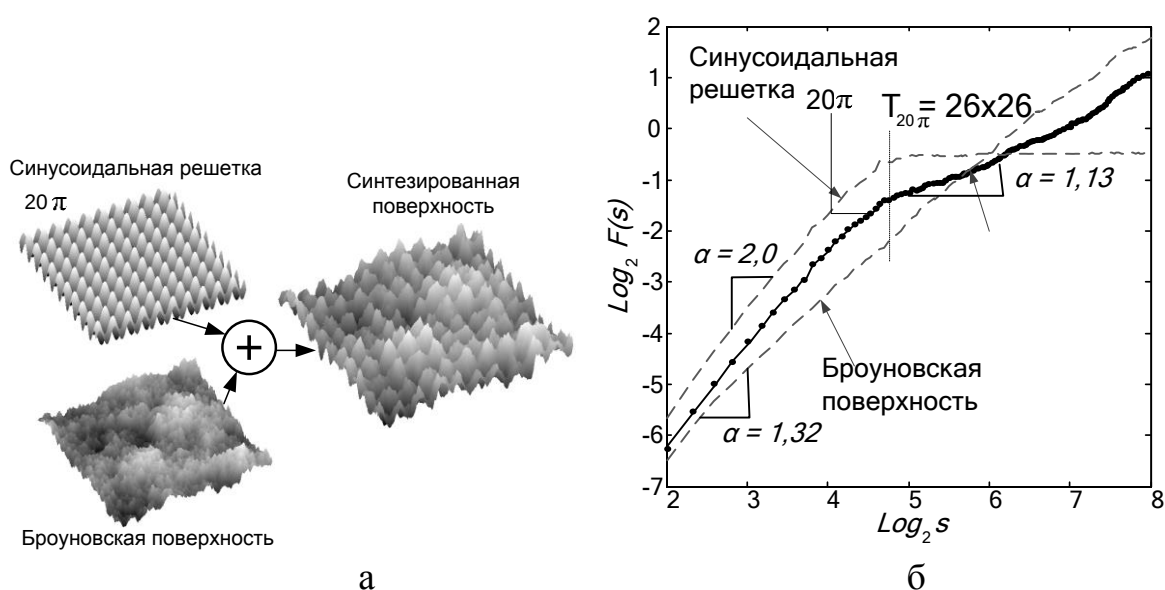


Рисунок 3 – Пример формирования кроссовера при сложении двух поверхностей с различными скейлинговыми показателями: а – исходные поверхности: синусоидальная решетка с кроссовером на $T=26 \times 26$ пикселей и броуновская поверхность с $\alpha=1,3$; б – флуктуационные функции всех процессов

Таким образом, метод 2D DFA позволяет исследовать обширный класс материалов, оценить степень упорядоченности структуры, исследовать процессы самоорганизации.

В третьей главе исследована шероховатость поверхности образцов неупорядоченных полупроводников зондовыми методами и проведен анализ ее изменения в зависимости от технологических параметров получения

образцов. В качестве экспериментальных образцов были выбраны: a-Si:H, полученный методом TP; a-Si:H, полученный методом PLD; ta-C, полученный методом PLD.

Поверхность образцов a-Si:H, полученных методом TP, исследовалась с помощью атомно-силового микроскопа NTegra Aura в полуконтактном режиме и с помощью растрового электронного микроскопа QUANTA 600. На поверхности наблюдались островки различных диаметров. С ростом температуры (от 170°C до 230°C) поверхность становилась более однородной. При увеличении времени осаждения наблюдалось небольшое уменьшение среднего диаметра островков.

Поверхность образцов a-Si:H, полученных методом PLD, исследовалась с помощью растровых электронных микроскопов JEOL JSM-6600F в режиме высокого вакуума и JEOL JSM-6610LV в режиме низкого вакуума и с помощью атомно-силового микроскопа Solver Pro в полуконтактном режиме. РЭМ-изображения демонстрировали наличие на достаточно гладкой поверхности образований в виде капель, появляющихся из расплавленной абляционной зоны от разбрызгивающего эффекта лазера. Пленки, осажденные при низких температурах подложки, обладали более шероховатой поверхностью, в то время как повышение температуры способствовало уменьшению диаметра зерен на поверхности и, соответственно, увеличению гладкости пленки. От выбора подложки морфология поверхности практически не зависела. При увеличении времени осаждения формировалось значительно больше зерен на поверхности. Пленки, осажденные при низких давлениях водорода, обладали малой шероховатостью, в то время как повышение давления водорода приводило к формированию зерен.

С целью выявления фазового состава исследуемых образцов использовалась рамановская спектроскопия. Для пленок a-Si:H, полученных методом PLD, пик аморфной фазы регистрировался при рамановском сдвиге в диапазоне 470-480 см^{-1} в зависимости от технологических параметров получения образцов.

Поверхность образцов ta-C, полученных методом PLD, исследовалась с помощью атомно-силового микроскопа Solver Pro в полуконтактном режиме и с помощью растрового электронного микроскопа JEOL JSM-6610LV в режиме высокого вакуума. Для образца ta-C, полученного при более низкой плотности энергии лазерного излучения, морфология поверхности является значительно более шероховатой.

Четвертая глава посвящена диагностике корреляционных свойств структуры поверхности экспериментальных образцов методами 2D DFA и расчета СВИ. Результаты исследования экспериментальных образцов a-Si:H, полученных методом TP, методом 2D DFA представлены на рис. 4.

Отметим, что на графиках 2D DFA четко замечен перегиб (точки A₁-A₇), подтверждающий, что поверхность исследованных образцов не является монофрактальной. На малых масштабах значения скейлингового по-

казателя получились близкими к 2, а на больших – меньше 1. Это объясняется тем, что на малых масштабах фиксируется гармоническая составляющая интерфейса, поскольку при сканировании образца присутствует эффект свертки (то есть кантилевер оказывает сглаживающее воздействие на реальную картину структуры поверхности). На больших масштабах значение скейлингового показателя попадает в категорию от 0.5 до 1.5, что говорит о наличии коррелированного шума.

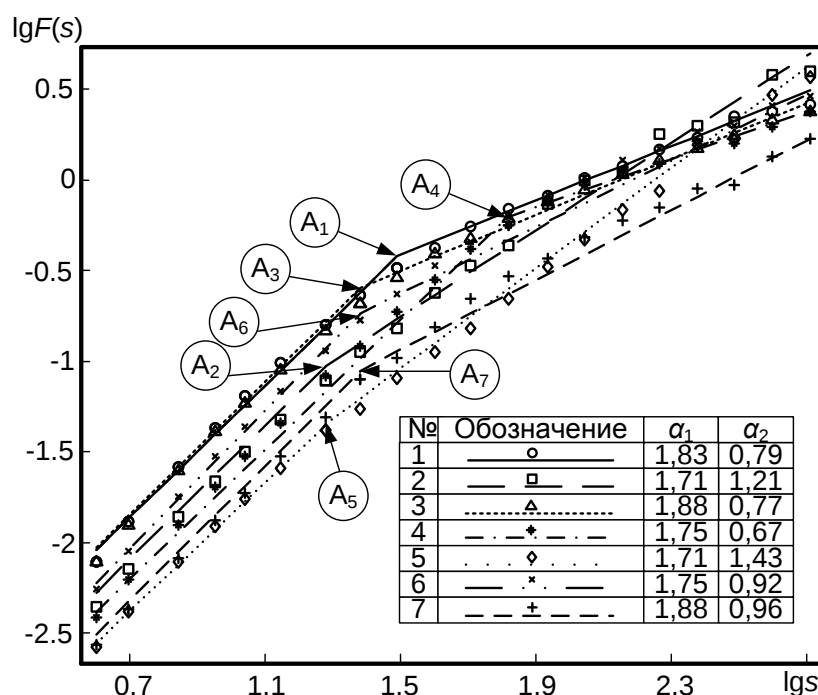


Рисунок 4 – Графики 2D DFA для ACM-изображений поверхностей образцов a-Si:H, полученных методом TP

Пересчет масштабов в единицы длины показал, что изменение типа корреляций структуры поверхности происходит при достижении размера 170-770 нм (в зависимости от образца a-Si:H). Эти величины соответствуют периоду гармонической составляющей профиля поверхности (вектору корреляций) исследуемых образцов a-Si:H, полученных методом TP. Длина наименьшего вектора корреляций (170 нм) соответствует образцу, полученному при $T_{подл}=170^{\circ}\text{C}$ и $t_{осажд}=5\text{ч}$, наибольшего (770 нм) – образцу, полученному при $T_{подл}=220^{\circ}\text{C}$ и $t_{осажд}=5\text{ч}$.

Расчет СВИ выявил наличие хаотической структуры поверхности образцов a-Si:H, полученных методом TP: $\text{СВИ}_{\min}<0.01$, $\text{СВИ}_{\max}<0.1$, $\text{СВИ}_{\text{авг}}<0.03$. При увеличении температуры подложки от 170 до 230 °C СВИ увеличивалась (примерно в 2 раза), что свидетельствует об увеличении упорядоченности структуры поверхности.

В таблице 1 представлены значения скейлинговых показателей для образцов a-Si:H, полученных методом PLD, и рассчитанные длины корреляционных векторов. Значения α менялись от 0,75 до 1.71. Это соответствует

наличию длительных корреляций ($0.5 < a < 1$) и нестепенных корреляций ($a > 1$), что полностью соответствует структуре аморфного материала.

Зависимости флуктуационной функции от масштаба представляли собой ломаные линии, содержащие несколько перегибов. Это означает, что поверхность исследуемых образцов не является монофрактальной. Очевидно, что перегибы на больших масштабах связаны с капельными образованиями на поверхности, поэтому для анализа корреляционных свойств поверхности рассчитывался скейлинговый показатель только на малых масштабах.

Таблица 1 – Значения скейлингового показателя для образцов a-Si:H, полученных методом PLD

№ образца	Значение α до перегиба флуктуационной функции	Длина корреляционного вектора, нм
1	1.63	109
2	1.5	154
3	0.75	257
4	1.71	308
5	1.25	389
6	1.23	234
8	1.58	223
9	0.95	153
10	1.1	976
11	0.85	123
13	1.13	224
15	1.24	191
16	1.13	151

Для образцов, полученных при разной температуре подложки, наблюдалась тенденция к сдвигу перегиба флуктуационной функции в сторону больших масштабов с повышением температуры. Это связано с тем, что с повышением температуры образовывалось меньше капель на поверхности и поэтому они вносили меньший вклад в гармоническую составляющую морфологии поверхности. А при невысоких температурах подложки капельные образования различного диаметра на поверхности приводили к увеличению количества перегибов на графиках 2D DFA.

Для образцов a-Si:H, при синтезе которых использовались разные подложки, не наблюдалось значительных различий на графиках 2D DFA.

Для пленок, при получении которых варьировалось время осаждения, наблюдалось увеличение количества капель на поверхности с ростом времени осаждения, поэтому на графиках 2D DFA уменьшалась длина прямолинейного участка на малых масштабах, а на больших – увеличивалось количество перегибов.

Результаты расчета СВИ показали, что на распределении СВИ нет выраженных максимумов, однако значения СВИ попадали во все категории критериев степени порядка: хаотическая структура поверхности (<0.03), структура поверхности с элементами организации ($0.03 < \text{СВИ} < 0.1$), упорядоченная структура поверхности ($\text{СВИ} > 0.1$).

В работе было показано, что наиболее гладкие поверхности с минимальным содержанием капель мишени были у образцов a-Si:H, при синтезе которых использовались невысокие температуры подложки ($100-200^\circ\text{C}$), небольшие времена осаждения и небольшие плотности энергии лазерного излучения. Следовательно, такие пленки являются более перспективными при создании фоточувствительных и стабильных солнечных элементов.

В данной главе также представлены перспективы развития технологии неупорядоченных материалов для получения заданных свойств.

Известно, что управлять свойствами твердотельных материалов можно на следующих уровнях: химический состав, структура, дисперсионность. Наибольший интерес представляет структурная модификация свойств неупорядоченных материалов. Были сформулированы возможные пути воздействия на формирование структуры неупорядоченных полупроводников с целью поиска закономерностей воспроизводимости структуры и свойств от процесса к процессу на примере a-Si:H.

На начальной стадии – стадии зарождения – можно непосредственно оказывать влияние на скорость зарождения. В процессе роста могут образовываться различные соединения элементов, обладающие определенными собственными частотами. Если рассматривать получение a-Si:H методом Chemical Vapor Deposition (CVD), то между газовой и твердой фазой существует область с совершенно отличающимися от них свойствами – область промежуточного слоя (ПС). Именно здесь идут процессы структурообразования. Поэтому, воздействуя на ПС излучением определенной частоты, можно разрушать или, наоборот, способствовать формированию тех или иных структур.

На стадии роста частицы простых веществ растут за счет присоединения в основном отдельных атомов (для a-Si:H также за счет радикалов). Поэтому рост структуры можно моделировать с учетом таких явлений, как эффекты затенения, переземиссия, поверхностная диффузия и шумовые эффекты.

На стадии агломерации, отвечающей за процессы упорядочения структуры, можно оценить такие параметры, как время упорядочения, скорость изменения состояния агломератов. На данной стадии целесообразно частотное или температурное воздействие на процессы структурообразования в промежуточном слое.

В заключении сформулированы основные выводы.

Основные выводы

1. Разработан метод 2D DFA исследования корреляционных свойств структуры поверхности неупорядоченных материалов, заключающийся в определении величины скейлингового показателя, положения и количества перегибов на зависимости флуктуационной функции от масштаба. Основным преимуществом данного метода является то, что он учитывает пространственный масштаб морфологических особенностей исследуемых изображений поверхностей и позволяет определять корреляции в структуре поверхности на уровнях ближнего, среднего и дальнего порядка.

2. Разработана шкала данных для диагностики корреляционных свойств структуры поверхности материалов по результатам исследования модельных поверхностей различной степени упорядоченности методом 2D DFA. Таким образом, модифицированным методом 2D DFA можно исследовать различные виды материалов, классифицируя их по корреляционным свойствам поверхности и изучая процессы самоорганизации структуры.

3. Исследована шероховатость поверхности экспериментальных образцов по изображениям, полученным методами АСМ и РЭМ. Для образцов a-Si:H, выращенных методом ТР, при увеличении температуры подложки структура поверхности становилась более однородной, а при увеличении времени осаждения уменьшался средний диаметр "островков". Для образцов a-Si:H, полученных методом PLD, при повышении температуры подложки наблюдалось уменьшение шероховатости пленки; от выбора подложки морфология поверхности практически не зависела; увеличение времени осаждения и повышение давления водорода в камере приводило к увеличению количества зерен на поверхности. Для образцов ta-C, полученных методом PLD, наблюдалось увеличение количества капель на поверхности при уменьшении плотности энергии лазерного излучения.

4. По результатам исследования образцов a-Si:H, полученных методом ТР, методом 2D DFA значение скейлингового показателя на малых масштабах (до 170-770 нм) составило 1,7-1,9, что соответствует наличию гармонической составляющей в структуре поверхности; на больших масштабах (от 170 нм до 5 мкм) значение скейлингового показателя было меньше 1, что говорит о наличии коррелированного шума. Рассчитанные значения СВИ попадают в категорию критериев степени порядка, соответствующую хаотической структуре поверхности. Выявлено, что при увеличении температуры подложки для образцов на подложке ЭКДБ-0.03 СВИ увеличивалась (примерно в 2 раза), т.е. упорядоченность структуры поверхности возрастала.

5. Для образцов a-Si:H, полученных методом PLD, значение скейлингового показателя составило 0,75-1,70, что соответствует наличию в структуре поверхности длительных и нестепенных корреляций. Повышение температуры подложки приводило к сдвигу перегиба флуктуационной

функции в сторону больших масштабов и, соответственно, к большей упорядоченности структуры, повышение давления водорода в камере – к уменьшению длины прямолинейного участка на графиках 2D DFA, что означает увеличение количества зерен различного диаметра на поверхности. Рассчитанные значения СВИ попадали во все категории критериев степени порядка. С повышением температуры подложки значения СВИ и упорядоченность структуры увеличивались. Наиболее гладкие поверхности с минимальным содержанием капель мишени были у образцов a-Si:H, при синтезе которых использовались невысокие температуры подложки (100-200°C), небольшие времена осаждения (около 7 мин) и небольшие плотности энергии лазерного излучения (8-9 Дж/см²).

6. Результаты исследования зависимости флуктуационной функции от масштаба для образцов ta-C, полученных методом PLD, показали, что $a > 1$, что соответствует наличию в структуре поверхности нестепенных корреляций. Значения a и СВИ уменьшались с уменьшением плотности энергии лазерного излучения.

Список основных публикаций

1. Гришанкина Н.В., Литвинов В.Г., Гудзев В.В., Рыбин Н.Б. Исследование диодных структур на основе Si и a-Si:H методом токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней в режимах эмиссии и захвата // Вестник РГРТУ. 2011. № 3. Вып. 37. С. 72-80.

2. Авачева Т.Г., Гришанкина Н.В., Литвинов В.Г. Изучение особенностей структурообразования пленок a-Si:H с позиций теории самоорганизации // Вестник Тамбовского университета. Сер. Естественные и технические науки. 2011. Т. 16. Вып. 3. С. 817-820.

3. Вихров С.П., Авачева Т.Г., Бодягин Н.В., Гришанкина Н.В., Авачев А.П. Установление степени упорядочения структуры материалов на основе расчета информационно-корреляционных характеристик // Физика и техника полупроводников. 2012. Т. 46. Вып. 4. С. 433-438.

4. Vikhrov S.P., Avacheva T.G., Bodyagin N.V., Grishankina N.V., Avachev A.P. Determination of the degree of ordering of materials' structure by calculating the information-correlation characteristics // Semiconductors. 2012. Vol. 46. No. 4. P. 415-421.

5. Алпатов А.В., Вихров С.П., Гришанкина Н.В. Выявление корреляций поверхностного интерфейса пленок a-Si:H методом двумерного флуктуационного анализа // ФТП. 2013. Т. 47. Вып. 3. С. 340-347.

6. Alpatov A.V., Vikhrov S.P., Grishankina N.V. Revealing the surface interface correlations in a-Si:H films by 2D detrended fluctuation analysis // Semiconductors. 2013. Vol. 47. No. 3. P. 365-371.

7. Алпатов А.В., Вихров С.П., Гришанкина Н.В., Мурсалов С.М. Исследование структурной сложности профиля поверхности материалов с применением метода 2D флуктуационного анализа с исключенным трендом // Вестник РГРТУ. 2012. № 4. Вып. 42. Ч. 2. С. 12-20.

8. Гришанкина Н.В., Литвинов В.Г., Рыбин Н.Б. Исследование полупроводниковых барьерных структур методом токовой релаксационной спектроско-

пии глубоких уровней в режиме захвата // Физика полупроводников. Микроэлектроника. Радиоэлектронные устройства: Межвуз. сб. науч. тр. Рязань: РГРТУ, 2010. С. 59-67.

9. Гришанкина Н.В. Исследование полупроводниковых барьерных структур методом токовой релаксационной спектроскопии глубоких уровней в режиме захвата // Инновационные технологии: под ред. Булярского С.В. Ульяновск: УлГУ. 2010. №3. С. 130-143.

10. Авачева Т.Г., Гришанкина Н.В. Изучение закономерностей структурообразования в аморфном гидрогенизированном кремнии Физика полупроводников. Микроэлектроника. Радиоэлектронные устройства: Межвуз. сб. науч. тр. Рязань: РГРТУ, 2011. С. 24-28.

11. Гришанкина Н.В., Литвинов В.Г., Рыбин Н.Б., Гудзев В.В. Исследование процессов эмиссии и захвата носителей заряда в р-і-п структуре а-Si:H методом токовой DLTS // Сб. трудов VII Международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники». Санкт-Петербург, 2010. С. 237-238.

12. Авачева Т.Г., Гришанкина Н.В. Исследование пленок а-Si:H с применением теории самоорганизации // Сб. трудов XIII международной конференции "Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы". Ульяновск: УлГУ, 2011. С. 258-260.

13. Алпатов А.В., Авачева Т.Г., Вихров С.П., Гришанкина Н.В., Коньков О.И. Применение метода 2D DFA для выявления корреляций поверхностного интерфейса пленок а-Si:H // Сб. трудов VIII Международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники». Санкт-Петербург, 2012. С. 32-33.

Р ы б и н а Наталья Владимировна

ИССЛЕДОВАНИЕ САМООРГАНИЗАЦИИ В СТРУКТУРЕ
ПОВЕРХНОСТИ АМОРФНОГО ГИДРОГЕНИЗИРОВАННОГО
КРЕМНИЯ МОДИФИЦИРОВАННЫМ МЕТОДОМ
ФЛУКТУАЦИОННОГО АНАЛИЗА

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 02.10.2013 Формат бумаги 60×84 1/16.
Усл. печ. л. 1,0. Тираж 100 экз.
Рязанский государственный радиотехнический университет
390005, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

