

УДК 621.315.592:539.213

**Т.Г. Авачёва, Е.В. Балашов, С.П. Вихров,
Н.В. Бодягин, С.М. Мурсалов, П.Е. Старов**

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕОРИИ САМООРГАНИЗАЦИИ И АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Проведен анализ современных методов исследования поверхности материалов. Описан алгоритм расчета средней взаимной информации между точками поверхности материала. С помощью разработанной методики исследованы поверхности кристаллического, поликристаллического и аморфного кремния. Сделаны выводы о том, что данная методика позволяет различать поверхности материалов различной структурной организации, выявлять дальнедействующие корреляции в этих структурах.

Введение. За последние годы неупорядоченные полупроводниковые материалы, благодаря своим уникальным свойствам, стали базой многих устройств и приборов твердотельной электроники. Наиболее важными и перспективными среди них являются аморфные соединения кремния, такие как аморфный гидрогенизированный кремний (α -Si:H).

Знание механизмов и динамики образования твердотельного состояния позволяет прогнозировать появление тех или иных структур, а также управлять их свойствами.

В этой связи целью данной работы явилось исследование структуры кристаллических, поликристаллических и аморфных полупроводниковых материалов с применением атомно-силовой микроскопии и с использованием теории самоорганизации и теории информации. Главная задача исследования – экспериментальное подтверждение возможности применения разработанной методики расчета средней взаимной информации для анализа степени упорядочения структуры [1].

Существуют некоторые особенности исследования неупорядоченных полупроводников. Во-первых, сложность объекта исследования и отсутствие строгой методологии описания процессов роста требуют комплексного подхода к изучению процесса формирования структуры. Во-вторых, динамика системы роста может быть частично восстановлена по уже сформированной структуре. В-третьих, применение методов нелинейной

динамики и теории информации к анализу процессов самоорганизации в структуре неупорядоченных материалов открывает принципиально новые возможности для моделирования аморфного состояния и управления свойствами материалов микро- и нанoeлектроники.

Теоретические основы. В материалах самоорганизация представляет собой процесс спонтанного образования пространственной структуры, между удаленными частями которой возникают и поддерживаются корреляции.

Закономерности процессов самоорганизации при формировании неупорядоченных материалов можно изучать средствами исследования их поверхности, так как распределение вещества по поверхности представляет собой “замороженный” мгновенный снимок процессов роста.

Для анализа поверхности применяются Фурье-преобразование, корреляционный и вейвлет анализ, теория фракталов. Однако все они имеют серьезные недостатки. Так, Фурье-анализ не приносит существенной ясности в понимание поведения нелинейной самоорганизующейся системы, т.к. для нерегулярных систем спектры Фурье, как правило, широкие и сплошные и не содержат полезных для моделирования компонент в виде резонансных частот [2].

Корреляционный анализ и основанный на нем вейвлет-анализ позволяют фильтровать сигнал, искаженный шумом, а при анализе поверхности материала выявляют характерные структуры, однако не позволяют точно

определить размеры характерных структур, не дают оценку степени упорядоченности структуры, обусловленной динамическими особенностями процессов синтеза материалов. Входную информацию для построения базового вейвлета дает автокорреляционная функция, которая описывает статистические свойства сигнала, а не корреляции в нелинейной системе, тогда как именно корреляции в структуре являются результатом процессов самоорганизации [3]. Те же недостатки присущи и фрактальной параметризации [4].

Сложное строение вещества описывается без учета важнейшего качества структуры – ее целостности. Такие подходы недостаточны при исследовании систем со сложной и неоднородной структурой, какими являются поверхности материалов.

Поэтому применяемые нами математические методы используют, с одной стороны, основной метод анализа нелинейных самоорганизующихся систем – метод вложения Ф. Такенса [5], с другой – теорию информации, приводящую к нелинейным представлениям о зависимости между различными частями системы.

Согласно методу вложения Такенса поведение системы можно расшифровать по измерениям любой динамической характеристики. В качестве измеряемой переменной была выбрана высота профиля поверхности, отсчитываемая от некоторого уровня, принятого за нулевой. Она однозначно характеризует распределение вещества по поверхности, которая представляет собой мгновенный снимок процессов роста, а значит, отражает процессы пространственно-временной эволюции.

Основной характеристикой корреляций в нелинейных системах является *средняя взаимная информация* (СВИ). СВИ – характеристика нелинейной динамики, выявляющая наличие корреляций в структуре поверхности, которые в свою очередь свидетельствуют о наличии упорядоченности в структуре материала.

Пусть h – случайная величина – высота профиля поверхности материала в точке с координатами (x, y) , D – область определения случайной величины h (плоскость образца), Z – область значений (z -координаты точек поверхности). Определим СВИ между произвольной парой точек A и B :

$$\forall A(x_1, y_1), B(x_2, y_2) \in D, \\ I(A, B) = \iint_{z^2} P_{AB}(z_1, z_2) \log_2 \left[\frac{P_{AB}(z_1, z_2)}{P_A(z_1) \cdot P_B(z_2)} \right] dz_1 dz_2, \quad (1)$$

где $I(A, B)$ – средняя взаимная информация между точками A и B , $P_A(z_1)$, $P_B(z_2)$ – вероятности того, что случайная величина, отвечающая высоте профиля, принимает в точках A и B значение z_1 и z_2 соответственно; $P_{AB}(z_1, z_2)$ – совместная вероятность одновременного принятия заданных значений в двух данных точках.

Исходными данными для расчета СВИ является распределение высот профиля поверхности материала, полученное средствами атомно-силовой микроскопии.

Расчет проводился для СВИ по ненаправленному вектору между двумя точками. Распределение СВИ при этом представляет собой поверхность в декартовой системе координат, что удобно и понятно для восприятия. При этом СВИ нормировалась по максимально возможной взаимной информации, поэтому значение СВИ для любого вектора лежит в диапазоне от 0 до 1. В программной реализации методики для каждого вектора значение СВИ отображалось яркостью соответствующей точки на распределении этих значений. При этом X и Y соответствуют пространственным координатам поверхности образца или модельной поверхности.

Критерием присутствия корреляции между точками исследуемого образца считаем наличие максимумов на графике распределения СВИ. Также выводятся значения максимального, минимального и среднего (с учетом статистики появления), а также конкретного для определенной точки значения высоты профиля, распределений СВИ. Это позволяет оценивать не только качественно, но и количественно рассчитанные характеристики.

Для оценки влияния сигнатуры на распределение СВИ в программе предусмотрен вывод СВИ со скрытой сигатурой (область вблизи начала координат, в которой выводятся значения СВИ для близлежащих точек поверхности), так как в некоторых случаях именно сигнатура не позволяет оценить особенности СВИ на больших расстояниях (из-за равномерности масштаба).

Эксперимент. При исследовании процессов роста полупроводников главное внимание уделяется механизмам образования различных структурно-химических элементов. Поэтому в данной работе исследуются три совершенно различные технологические структуры: кристаллический, поликристаллический и аморфный гидрогенизированный кремний.

Для выявления порядка в структуре поверхности и анализа динамики роста по

измерению характеристик поверхности использовались экспериментальные данные о характеристиках пленочных структур, полученные с помощью атомного силового микроскопа (АСМ) «Solver Pro».

Для исследования поверхности структуры образцов, полученных при различных режимах осаждения нелегированных пленок α -Si:H и α -SiC:H, были выбраны стеклянные подложки марки «Corning Glass 7059» размером 15×15 мм и толщиной 1,2 мм. Пленки α -Si:H были получены методом тлеющего разряда на установке «Mini Goupyl» (Франция) с частотой возбуждающего генератора 55 кГц. Технологические параметры получения образцов α -Si:H представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Условия синтеза образцов

Обозначение серии образцов	Технология		Толщина Дпл, нм	Ск. осаждения $V_{ос}, \text{Å/с}$
	T, °C	P, Па		
4К	250	220	710	9,86
5К	325	252	717	9,96

В качестве образцов поликристаллического кремния были выбраны отожженные образцы α -Si:H. После того как с поверхности образцов α -Si:H были сняты снимки поверхности, образцы поместили в диффузионную печь марки «Kemps», в которой производился комплекс процедур:

- нагревание в течение одного часа от комнатной температуры до 600°C , т.е со скоростью нагрева около 10°C/мин .

- выдержка образцов в течение двух часов при температуре 600°C .

- самопроизвольное остывание до комнатной температуры.

Медленный разогрев способствовал нагреванию образца до заданной температуры без термического удара. В работе [6] показано, что в процессе отжига при температуре 600°C из образцов α -Si:H происходит эффузия водорода H и материал частично кристаллизуется.

В качестве образца монокристаллического кремния был выбран образец, представляющий собой эпитаксиальный слой, выращенный на поверхности монокристаллической подложки.

По экспериментальным данным о профиле поверхности с помощью разработанной методики была рассчитана СВИ для каждого из образцов.

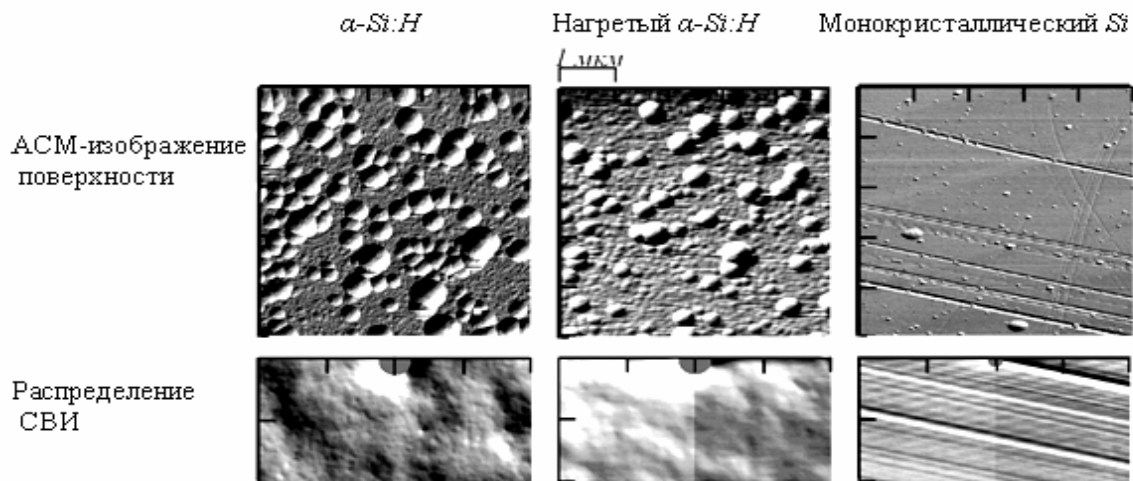
Результаты и обсуждение. На рисунке и в таблице 2 представлены результаты расчета СВИ α -Si H, поликристаллического и монокристаллического кремния.

Для образцов α -Si:H нет явных максимумов СВИ (на рисунке слева). Значения СВИ распределены равномерно, причем анализ максимальных значений СВИ для поля с сигнатурой и без ее учета показывает, что за пределами центрального пика СВИ составляет сотые доли единиц. В дальнейшем сравнении с упорядоченными поверхностями будет показано, что это значение следует считать малым. Эти результаты соответствуют теоретическим расчетам для аморфного материала, структура которого является неупорядоченной.

Исследование образцов α -Si:H, нагретых до 600°C с целью приближения их структуры к поликристаллическому Si, показало, что максимальное и минимальное значения СВИ имеют довольно большой разброс, но практически на всей области значений СВИ распределены равномерно и явных скачков не наблюдается. По сравнению с α -Si:H значение СВИ увеличилось для всех серий образцов, что указывает на появление после термического воздействия корреляций в системе, а структура стала более упорядоченной.

Таблица 2 – Средние значения СВИ

Тип образца	СВИ, отн. ед.	D_{mean} , МКМ
α -Si:H	0,06	0,059
Нагретый α -Si:H	0,23	0,189
Монокристаллический Si	0,58	0,239



АСМ изображения поверхности материалов различной структурной организации и распределение СВИ (значения СВИ соответствуют степени освещенности)

Результаты по исследованию образцов монокристаллического кремния показывают достаточно высокие значения СВИ. Для одного из образцов (на рисунке справа) наблюдаются довольно четкие «горки» СВИ в направлении $(0,0) \rightarrow (-1,0.25)$. Этот факт можно объяснить наличием борозд на изображении исходной поверхности, что может быть обусловлено действием иглы микроскопа на поверхность. Высокие значения СВИ говорят о присутствии дальнедействующих корреляций в системе, которые, в свою очередь, могут быть свидетельством порядка, являющегося результатом процессов самоорганизации.

Необходимо также отметить, что значения среднего диаметра D_{mean} характерных структур на поверхности материала подтверждают выводы о степени упорядочения исследуемых образцов.

Закключение. С применением разработанной методики расчета СВИ были исследованы пленочные структуры слоев кристаллического, поликристаллического и аморфного гидрогенизированного кремния. Для выявления порядка в структуре поверхности и анализа динамики роста по измерению информационных характеристик поверхности использовались АСМ - изображения поверхностей материалов. Получены значения СВИ для всех структур, характеризующие поверхности материала.

По результатам проведенных исследований можно сделать вывод, что методика расчета двумерного распределения средней взаимной информации выявляет дальнедействующие корреляции в структуре поверхности

неупорядоченных материалов [1]. Данная методика позволяет также определять размеры характерных структур и их взаимное расположение. Однако для более точной оценки типа динамики необходим комплексный анализ системы роста материала, включающий также построение вложения Такенса, расчет фрактальной размерности и других инвариантов нелинейной динамики.

Библиографический список

1. Бодягин Н.В., Вихров С.П., Ларина Т.Г., Мурсалов С.М. Методика исследования самоорганизации неупорядоченных материалов с применением теории информации // Сборник трудов V Междунар. конф. «Аморфные и микрокристаллические полупроводники (АМП)». – СПб., 2006. – С. 163.
2. Бодягин Н.В., Вихров С.П., Ларина Т.Г., Мурсалов С.М., Тимофеев В.Н. Природа невозпроизводимости структуры и свойств материалов для микро- и наноэлектроники. – Рязань: РГРТА, 2004. – 64 с.
3. Востовский Г.В., Колмаков А.Г., Бунин И.Ж. Введение в мультифрактальную параметризацию структур материалов. – М.; Ижевск: РХД, 2001. – 124 с.
4. Вихров С.П., Бодягин Н.В., Ларина Т.Г., Мурсалов С.М. Процессы роста неупорядоченных полупроводников с позиций теории самоорганизации // Физика и техника полупроводников. 2005. Т. 39. Вып. 8. – С. 953-959.
5. F. Takens. Lectures Notes in Mathematics, Warwick 1980 / Eds Rand D., Young L.-S. N.Y.: Springer-Verlag, 1981. P.366.
6. Айвазов А. А., Будагян Б. Г., Вихров С. П., Попов А.И. Неупорядоченные полупроводники. – М.: Изд-во МЭИ, 1995. – 352 с.