

На правах рукописи



АВАЧЕВА ТАТЬЯНА ГЕННАДИЕВНА

**ИССЛЕДОВАНИЕ САМООРГАНИЗАЦИИ
СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ**

Специальность 01.04.10 – Физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Рязань – 2009

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

Научный руководитель: доктор физико-математических наук
Бодягин Николай Викторович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Чиркин Михаил Викторович,

доктор технических наук, профессор
Шерченков Алексей Анатольевич

Ведущая организация: **Институт общей и неорганической химии РАН**
г. Москва

Защита состоится "15" декабря 2009 г. в 11 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.211.03 в ГОУВПО "Рязанский государственный радиотехнический университет" по адресу: 390005, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ГОУВПО "Рязанский государственный радиотехнический университет".

Автореферат разослан " " ноября 2009 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д212.211.03
доктор технических наук, профессор



Б.И. Колотилин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

В настоящее время одним из основных направлений развития микро- и нанoeлектроники является получение структур с заранее заданными свойствами. При создании наноструктур необходимо руководствоваться новыми физическими принципами управления структурообразованием, которые учитывают особенности сложного поведения системы в процессе роста и эволюции – процессов самоорганизации.

Процессы самоорганизации протекают в нелинейных системах, описываемых неравновесной термодинамикой. В этой связи особый научный интерес представляют неупорядоченные полупроводниковые материалы, т.к. их структура может формироваться посредством процессов самоорганизации, а сами они могут стать технологической базой многих новейших приборов нанoeлектроники.

Применение идей и методов теории самоорганизации для исследования процессов структурообразования в неупорядоченных материалах позволяет моделировать строение аморфных материалов, выявлять скрытый порядок структуры, описать динамику системы, что способствует эффективному управлению в технологиях микро- и наноструктур.

Актуальность работы связана также с тем, что применение неупорядоченных материалов в области нанoeлектроники невозможно без разработки специальных методик исследования пространственно-распределенных систем, выявляющих процессы самоорганизации, и характеристик, учитывающих системные свойства этих объектов.

Таким образом, исследования, проводимые в настоящей работе направлены на решение фундаментальных проблем физики неупорядоченных полупроводников и посвящены актуальным вопросам микро- и нанoeлектроники, а именно, развитию нового подхода к рассмотрению процессов самоорганизации при структурообразовании, а также разработке методики анализа порядка в структуре поверхности материалов.

Объектом экспериментальных исследований являются тонкие пленки аморфного гидрогенизированного кремния (a-Si:H), моно- и поликремния.

Цель и задачи работы

Цель работы – развитие теоретических представлений о процессах самоорганизации в неупорядоченных полупроводниковых материалах и разработка методики анализа порядка в структуре поверхности материалов для эффективного управления структурообразованием в технологиях нанoeлектроники.

Поставленная цель вызвала необходимость решения следующих задач:

1. Анализ закономерностей структурообразования неупорядоченных полупроводников с позиций теории самоорганизации.
2. Разработка методики исследования процессов самоорганизации в структуре поверхности неупорядоченных материалов по данным о топологии, полученным методами атомно-силовой микроскопии (АСМ).
3. Теоретико-экспериментальное установление критериев степени упорядоченности структуры поверхности материала.

4. Исследование взаимосвязи технологических режимов получения полупроводниковых структур на основе $a\text{-Si:H}$, свойств поверхности и инвариантов нелинейной динамики самоорганизующейся системы.
5. Анализ неупорядоченного состояния полупроводников как детерминированной хаотической системы. Анализ явления невоспроизводимости структуры с позиций теории самоорганизации и разработка принципов управления процессами формирования твердотельной структуры для воспроизводимого выращивания материалов с заданными свойствами.

Научная новизна

1. Разработан новый подход к рассмотрению процессов структурообразования в неупорядоченных полупроводниковых материалах, отличающийся от известных учетом особенностей процессов самоорганизации (термодинамическая открытость, локализация в пространстве, неравновесность, прохождение через стадию детерминированного хаоса).
2. Впервые предложен способ выявления дальнедействующих корреляций в структуре поверхности материала по построению двумерного распределения средней взаимной информации (СВИ) по ненаправленному вектору между точками поверхности. Это дает возможность по АСМ-данным о топологии поверхности оценить степень упорядочения наноструктур и установить взаимосвязь между информационными характеристиками и технологическими параметрами получения структур на основе $a\text{-Si:H}$.
3. Разработаны новые критерии определения степени упорядоченности структуры по результатам анализа АСМ-изображения поверхности, которые успешно опробованы для исследования кремниевых структур с различной степенью организации.
4. Впервые экспериментально обнаружено влияние технологических режимов на степень корреляций в структуре поверхности пленок $a\text{-Si:H}$, полученных методом НЧ разряда, что не выявлялось ранее используемыми методами.

Практическая значимость результатов работы

1. Разработана экспериментальная методика анализа порядка в структуре поверхности материала по расчету средней взаимной информации на основе АСМ изображения поверхности, позволяющая контролировать структуру пленок в технологическом процессе получения наноструктур. Разработаны критерии определения степени упорядочения структуры поверхности материала.
2. Создан аппаратно-программный комплекс, предназначенный для контроля характеристик структур микро- и нанoeлектроники в технологическом процессе, позволяющий проводить экспресс-контроль параметров приборных структур и расширить аналитические возможности зондовой микроскопии (результаты работы используются в ЗАО «НТ–МДТ», г. Зеленоград).
3. Получены экспериментальные результаты и проведен анализ причин невоспроизводимости структуры, что позволит улучшить качество выращиваемых материалов, уменьшить затраты на разработку новых приборов на неупорядоченных полупроводниках и отработку технологических режимов получения слоев с заданными электрофизическими параметрами.

Основные положения и результаты, выносимые на защиту

1. Метод обработки результатов исследования структуры поверхности неупорядоченных полупроводников, отличающийся использованием основ информационной теории систем, позволяет получить двумерное распределение корреляций по поверхности, которые являются главным признаком самоорганизации при структурообразовании материала.
2. Методика анализа порядка в структуре поверхности, основанная на алгоритме построения двумерного распределения средней взаимной информации (СВИ) по данным атомно-силовой микроскопии о профиле поверхности с применением методов нелинейной динамики, позволяет определять степень упорядоченности наноструктур на сравнительно больших (25 мкм^2) площадях полупроводников с достаточно высокой (погрешность 5 %) точностью.
3. Способ определения степени организации структуры поверхности с использованием численных критериев оценки дальнodelействующих корреляций обеспечивает высокую достоверность (с вероятностью 0,92) идентификации наноструктур хаотического, слабоорганизованного и упорядоченного типов. Численные критерии регламентируют значения минимальной, средней и максимальной СВИ и получены из сопоставления результатов исследования тестовых моделей и экспериментальных данных для аморфных, поли- и монокристаллических образцов на основе кремния.
4. Экспериментальные результаты по влиянию технологических режимов получения пленок на основе аморфного гидрогенизированного кремния (a-Si:H) в низкочастотном тлеющем разряде на степень организации структуры поверхности, полученные с применением методики расчета СВИ, показывающие, что при изменении температуры подложки от 40 °С до 325 °С и давления газов в камере от 133 Па до 266 Па степень упорядоченности структуры существенно снижается (СВИ уменьшается в 2 раза), несмотря на неизменность параметров микроструктуры, таких как шероховатость, средняя высота и диаметр островков.

Достоверность результатов исследований обеспечивается аргументацией полученных теоретических положений с использованием общепринятых физических законов; проведением экспериментов на сертифицированном научном оборудовании; корреляцией результатов, полученных с применением АСМ «Smena-B» и нанолаборатории «NTEGRA-Auga»; совпадением прогнозируемых и расчетных значений характеристик модельных поверхностей; а также широкой апробацией результатов исследования.

Личный вклад автора

Результаты, составляющие научную новизну диссертационной работы и выносимые на защиту, получены автором лично на кафедре биомедицинской и полупроводниковой электроники РГРТУ.

Авачевой Т.Г. непосредственно проведены все исследования структуры образцов на основе a-Si:H, разработан алгоритм, реализованный в программном обеспечении методики анализа поверхности материала (разработка методики расчета двумерного распределения СВИ между точками поверхности материала, построение тестовых поверхностей с различной степенью упорядочения структуры).

Апробация работы

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 15 конференциях: Romanian conference on advanced materials: ROCAM – 2003 (Romania, Constanta, 2003); the 2006, 2008 Spring Meeting of the Materials Research Society (USA, San Francisco CA, 2006, 2008); 2nd and 3rd International Conferences «Physics of Electronic Materials» (Kaluga, 2005, 2008); IV, V, VI Международные научно-технические конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники» (г. Санкт-Петербург, 2004, 2006, 2008); XII Международная научно-технических конференция аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» (г. Москва, 2005); IX, X международные конференции «Опто-, наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы» (г. Ульяновск, 2007, 2008); XI всероссийская научная конференция студентов - физиков и молодых ученых (г. Екатеринбург, 2005); Всероссийский молодежный научно-инновационный конкурс-конференция «Электроника-2006» (г. Москва, 2006); I, II Всероссийские научно-технические конференции студентов, аспирантов, молодых ученых и специалистов «Физика и технология аморфных и наноматериалов и систем» (г. Рязань, 2008, 2009).

Публикации

Основные научные результаты диссертации опубликованы в 41 работе, из которых 22 статьи, 12 тезисов докладов на всероссийских и международных конференциях, 3 учебных пособия, 3 отчета по НИР, 1 свидетельство о регистрации программы. Из них 3 статьи опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК для защиты кандидатских диссертаций.

Внедрение результатов

Полученные экспериментальные результаты использованы в Ярославском филиале ФТИ РАН (г. Ярославль) при разработке и оптимизации технологии получения полупроводниковых структур и приборов на их основе, ЗАО «Инструменты нанотехнологии» (г. Зеленоград) при разработке методов исследования средствами АСМ; при выполнении научно-исследовательских работ, в учебном процессе РГРТУ.

Исследования были поддержаны студенческим грантом Министерства образования и науки РФ в 2005 г. (НИР 8-05 Г «Исследование структурообразования в неупорядоченных полупроводниках с применением теории самоорганизации»), а также выполнялись в рамках АВНП Федерального агентства по образованию «Развитие научного потенциала высшей школы (2006-2008 гг.)» (НИР 9-06 Г «Исследование процессов самоорганизации и невоспроизводимости структуры неупорядоченных материалов для наноэлектроники»).

Зарегистрирована «Программа для обработки изображений профиля поверхности материала, полученных с применением АСМ, для исследования информационных характеристик структур микро- и наноэлектроники "NanoInform"» (свидетельство об отраслевой регистрации №9666. Дата выдачи 21.01.08. № ГР 50200800039).

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, содержит 179 страниц машинописного текста, включая 22 таблицы, 57 рисунков, 47 формул, список литературы из 174 наименований, а также 6 приложений.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы исследования, обозначены цели и задачи данной работы. Показаны её научная новизна, практическая значимость и сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе с позиций теории самоорганизации рассмотрены существующие представления о структурообразовании в неупорядоченных полупроводниках. Отмечено, что динамические особенности процесса формирования структуры являются сущностными ингредиентами сложного поведения, которое определяется как самоорганизация. Распределение вещества по поверхности (a-Si:H) представляет собой «замороженный» мгновенный снимок процессов роста.

Проведен анализ существующих методов исследования процессов структурообразования неупорядоченных, обоснована необходимость разработки новых методов обнаружения порядка в структуре, учитывающих динамические свойства системы роста. Проведена адаптация существующих алгоритмов нелинейной динамики (метод Ф. Такенса) для анализа пространственно-распределенных систем, каковой является поверхность материала.

Рассмотрены существующие модели неупорядоченного состояния вещества, выявлены их недостатки с точки зрения физических и структурных свойств неупорядоченных полупроводников: невозпроизводимость структуры, наличие локализованных состояний в «щели подвижности» и др.

Во второй главе разработана новая методика исследования процессов самоорганизации в неупорядоченных материалах. Методика построена на основном методе анализа нелинейных систем – методе вложения Ф. Такенса – и на разделе теории информации, описывающем нелинейные корреляции между частями системы.

В разделе 2.1 приведено математическое определение и физический смысл средней взаимной информации (СВИ) – инварианта, используемого для анализа порядка в структуре неупорядоченных полупроводников.

Если при структурообразовании в веществе протекали процессы самоорганизации, то между различными частями системы создаются и поддерживаются воспроизводимые взаимоотношения, называемые корреляциями. Поверхность является «замороженным» снимком процесса отвердевания. Таким образом, корреляция значений высоты профиля в различных областях может трактоваться как признак наличия порядка в структуре или результат процессов самоорганизации.

Наличие корреляций между частями системы, возникающих в результате нелинейных процессов, может быть определено по двумерному построению средней взаимной информации (СВИ). СВИ рассчитывается как усредненная величина по всем возможным значениям взаимной информации для заданной пары точек A и B :

$$I(A, B) = \iint_{Z^2} P_{AB}(z_1, z_2) \log_2 \left[\frac{P_{AB}(z_1, z_2)}{P_A(z_1) \cdot P_B(z_2)} \right] dz_1 dz_2 \quad (1)$$

где $P_A(z_1)$, $P_B(z_2)$ – вероятности того, что случайная величина h , отвечающая высоте профиля, принимает в точках A и B ($\forall A(x_1, y_1)$, $B(x_2, y_2) \in D^2$) значение z_1 и z_2 соответственно; $P_{AB}(z_1, z_2)$ – совместная вероятность одновременного принятия заданных значений в двух данных точках, D^2 – область определения случайной величины, Z – область значений (z -координаты точек поверхности).

При интегрировании по всей области определения или её части мы получаем представление об общей взаимосвязи случайных величин, т.е. получаем статистическую оценку информации. Так, если события, состоящие в принятии соответствующих значений случайной величиной в точках A и B , независимы, то по теории вероятностей $P_{AB} = P_A \cdot P_B$, а взаимная информация принимает значение равно нулю. То есть если значение z_1 высоты профиля в некой точке A не имеет корреляции со значением z_2 высоты профиля поверхности в точке B , то наше знание о z_2 при известном значении z_1 равно нулю. Если же z_1 и z_2 коррелируют, то $P_{AB} \neq P_A \cdot P_B$, и $I_{AB}(z_1, z_2) \neq 0$. Если связь полная, то есть $P_{AB} = P_A = P_B$, то формула (1) принимает значение энтропии.

СВИ, подсчитанная для двух конкретных точек, не имеет физического смысла – точки поверхности в них имеют вполне конкретные координаты z . Ясный физический смысл имеет лишь преобразованные функции СВИ (назовем их «свёртками»), рассчитанные для отображений области определения случайной величины D^2 в пространство новой переменной, при этом свёртка может производиться по разным параметрам. Общая формула имеет вид:

$$\forall S: D^2 \rightarrow S_D \quad I_s(s) = \iint_{S(d_1, d_2)=s} \frac{I(d_1, d_2)}{M_{S_D}(s)} d(d_1) d(d_2) \quad (2)$$

где d_1, d_2 – обобщенные параметры точек A и B в пространстве D^2 (в нашем случае d_1 соответствует двум координатам x_1, y_1 , а $d_2 - x_2, y_2$). Для каждого значения параметра s интегрирование ведётся по всем парам точек, которые данная свёртка отображает в новое пространство S_D , I – определённая в (1) средняя взаимная информация между точками, характеризующимися параметром s , а $M_{S_D}(s)$ – мера нового пространства S_D , отображаемого выбранной свёрткой по параметру s , в пространстве D^2 .

Нормировка СВИ проводится по максимально возможной взаимной информации для исследуемого набора данных. Поэтому значение приведенной СВИ (далее – просто СВИ) для любого вектора лежит в диапазоне от 0 (соответствует отсутствию корреляций) до 1 (корреляции максимальны) относительных единиц (по оси Z).

СВИ всегда неотрицательная функция, в одних точках свёрнутого пространства (например, для определенного расстояния) может быть близкой к нулю, в других быть значительно больше чем средняя по всему распределению. Если это происходит вдали от сигнатуры (свёртки близких точек), то можно говорить о наличии системообразующего фактора: самоорганизации, переноса информации, наличие управляющего направленного воздействия в процессе роста и т.п.

Для реальных структур нанoeлектроники значения приведенной СВИ больше нуля. При этом чем больше взаимосвязь высот между точками поверхности, тем больше значение средней взаимной информации. Поэтому критерием корреляции между точками исследуемого образца считаем наличие максимумов на двумерном графике СВИ. Для определения преимуществ разрабатываемой методики по сравнению с существующими поверхности исследуются также посредством расчета автокорреляционной функции (АКФ).

В разделе 2.2 установлены требования к исходным данным – информации о профиле поверхности материала, полученной методами АСМ – и к результатам исследования.

Изображение, полученное с помощью АСМ, представляет собой прямоугольный участок плоскости xu – точечный рисунок. По изображениям исходных образцов сложно дать какую-либо характеристику упорядоченности образца. Можно лишь судить о характерном типе структур.

Высота рельефа измеряется через дискретные интервалы расстояния, в каждой

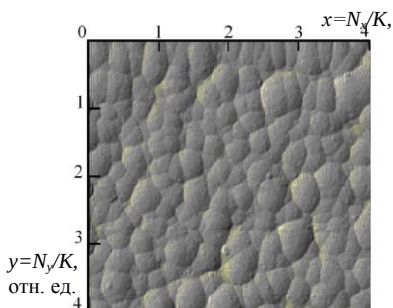


Рисунок 1 – Введение относительных единиц для геометрических размеров образца

точке изображения соответствует ее яркости и отсчитывается от некоторого уровня, принятого за нулевой. Для модельных образцов нулевой уровень оговаривается конкретно для каждого случая, для реальных образцов поверхностей нулевым считается минимум уровня в вертикальном направлении. Таким образом получается функция высоты, к которой в дальнейшем и будет применена диагностика.

В разделе 2.3 разработан алгоритм расчета информационных характеристик по АСМ-данным о топологии поверхности для выявления дальнедействующих корреляций.

Пусть исходное изображение представляет собой квадрат $N \times N$ точек. Вводятся относительные координаты для исходных изображений поверхностей (рисунок 1): для моделируемых математически заданных поверхностей $x = N_x / K$; $y = N_y / K$, где N_x и N_y соответствуют номеру точки по соответствующей оси, K – максимальное расстояние корреляции. Для экспериментальных образцов изображения поверхности имеют размеры $L \times L$ мкм; поэтому вводим относительные единицы измерения: $x = \ell_x / (K \cdot L)$ мкм; $y = \ell_y / (K \cdot L)$ мкм, где ℓ_x , ℓ_y – расстояния от начала координат до точки в мкм. Предполагается исследовать корреляции в масштабах не больше $1/4$ поверхности образца. Поэтому в производимых расчётах принималось $K = N / 4$. Таким образом, для всех исходных изображений образцов $x = 0..4$; $y = 0..4$ отн. ед.

Ясный физический смысл имеет СВИ, рассчитанная для определенного параметра. Поэтому алгоритм строится для случая, когда пространство свёртки – двумерное, а свёртка производится по ненаправленным векторам. Алгоритм вычисления СВИ впервые адаптирован для исследования структуры поверхности, ранее проводили обработку лишь одномерных последовательностей данных.

В таком случае пространство свёртки СВИ представляет собой прямоугольник (рисунок 2), каждая точка которого (т. B) соответствует набору из всех пар точек образца, которые могут быть соединены соответствующим вектором ($\overline{AB}$). Для каждой точки этого прямоугольника с координатами (dx', dy') , производится расчет СВИ по формуле (1).

В результате значения СВИ для каждой точки прямоугольника как z -координата изображаются с помощью программы визуализации сопоставлением численных значений СВИ значениям яркости точки. При этом x' и y' соответствуют пространственным координатам поверхности образца или модельной поверхности.

График СВИ при этом представляет собой поверхность в декартовой системе координат, что удобно и понятно для восприятия.

Чем ярче точка с координатами (x', y') на изображении распределения СВИ, тем больше средняя взаимная информация между всеми точками поверхности исходного образца, которые можно соединить вектором с соответствующей длиной и направлением.

Одни и те же расчёты СВИ производятся одновременно для общей поверхности и четырёх квадрантов. Так как мы предполагаем исследовать только изотропные (по площади) свойства образца, интегрес представляют эффекты, выявленные для всех квадрантов.

Для более детального изучения динамических особенностей системы, в которой была сформирована структура материала, разработан алгоритм построения вложения Φ . Такенса в N -мерное пространство координат.

В пунктах 2.3.2 и 2.3.3 предложен алгоритм расчета СВИ по окружности для выявления динамических параметров системы роста материала, обуславливающих образование кластеров на поверхности аморфной пленки, и приведена оценка влияния погрешности измерений на точность расчетов.

В разделе 2.4 описана программная реализация разработанной методики исследования порядка в структуре материалов с использованием новейшего научного оборудования зондовой микроскопии.

Разработанный алгоритм был реализован в виде программного обеспечения методики исследования поверхности структур микро- и нанoeлектроники, которая зарегистрирована в Отраслевом фонде алгоритмов и программ.

Программа предназначена для анализа на предмет наличия порядка изображений профиля поверхности материалов, полученных с применением сканирующей зондовой микроскопии, путем расчета информационных характеристик поверхности структур микро- и нанoeлектроники. Перечислены основные функциональные возможности программы и кратко описан интерфейс программы «NanoInform».

Для близких пар точек корреляции обусловлены гладкостью поверхности и обуславливают ближний порядок. Более важны корреляции на дальних расстояниях, так как они возникают в результате самоорганизации структуры. Для оценки влияния взаимной информации близлежащих точек на распределение СВИ в методике предусмотрен вывод СВИ со скрытой сигнатурой, так как в некоторых случаях она не позволяет оценить особенности СВИ на больших расстояниях (из-за равномерности масштаба). Также проведена визуализация результатов исследования в 3D-формате и с подсвечиванием поверхности с различных сторон.

В разделе 2.5 разработаны модельные поверхности материалов для тестирования методики анализа порядка в структуре. Тестовые структуры моделировали поверхности, заведомо исключающие корреляцию на дальних масштабах, поверхности с полностью регулярной структурой (**пункт 2.5.2**). Для поиска особенностей структуры, обусловленных динамикой системы в процессе ее формирования, была

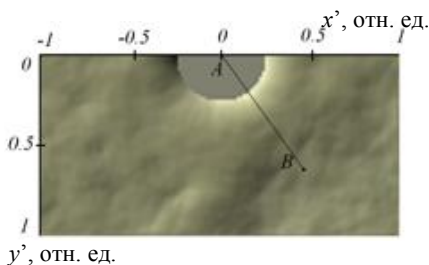
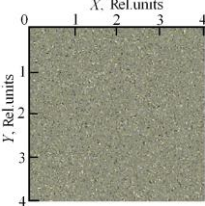
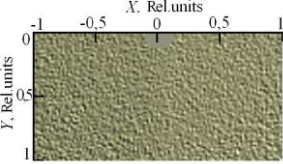
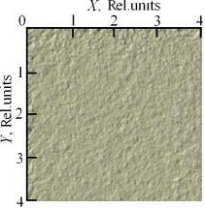
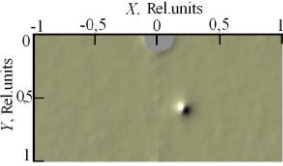
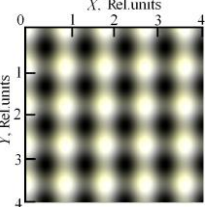
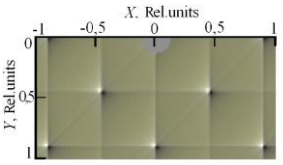
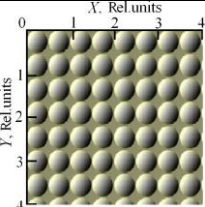
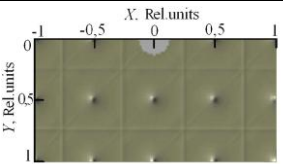


Рисунок 2 – Система координат для распределения СВИ

предложена также тестовая поверхность, названная «шум с переносом», которая по внешнему виду не отличается от хаотической, однако в ней заложены динамические процессы. Она формировалась с помощью многократного сложения высот точек хаотической поверхности после сдвига на определенный вектор.

Проведены исследования тестовых поверхностей с применением разработанной методики, основные результаты которых приведены в таблице 1. Показано, что используемая программная реализация нелинейно-динамических алгоритмов дает адекватные оценки динамики систем разного типа. Она позволяет не только качественно, но и количественно различать системы, полностью периодические, содержащие динамические особенности или представляющие собой хаотичный случайный сигнал.

Таблица 1 – Тестирование методики на моделях поверхностей материалов

Название модели	Изображение исходной тестовой поверхности	Двумерная визуализация средней взаимной информации по вектору	Вложение Такенса в 3-хмерное пространство
«Белый шум»		 $I_{\max} = 0.052; I_{\text{avr}} = 0.015$	
«Шум с переносом»		 $I_{\max} = 0.046; I_{\text{avr}} = 0.011$	
«Синусоидальная решетка»		 $I_{\max} = 1.000; I_{\text{avr}} = 0.135$	
«Кластеры»		 $I_{\max} = 0.615; I_{\text{avr}} = 0.076$	

При этом необходимо отметить, что достигнута требуемая точность, информативность, применимость для различных типов данных.

Отмечено, что в сравнении с СВИ АКФ не выявляет динамический характер образования модели «шум с переносом», распределение АКФ не имеет пиков как для обычной хаотической поверхности.

Результат исследования данной модели – явный, крупный пик на распределении СВИ, соответствующий вектору, на который производился перенос точек поверхности при многократном сложении ее со своим же исходным профилем – доказывает способность СВИ выявлять такие динамические особенности процесса получения структуры (таблица 1).

На основе исследования тестовых поверхностей теоретически установлены критерии степени упорядочения структуры материала (**раздел 2.6**, таблица 2).

Таблица 2 – Критерии степени порядка на основе приведенной СВИ

Тип поверхности	Минимальное СВИ (с закрытой сигнатурой), отн. ед.	Максимальное СВИ (с закрытой сигнатурой), отн. ед.	Среднее СВИ (с закрытой сигнатурой), отн. ед.
Хаотическая	$0 \div 0.01$	$0 \div 0.1$	$0 \div 0.03$
Слабоорганизованная	$0.01 \div 0.03$	$0.1 \div 0.67$	$0.03 \div 0.1$
Упорядоченная	$0.03 \div 1$	$0.67 \div 1$	$0.1 \div 1$

В разделе 2.7 проведен сравнительный анализ предложенной методики исследования порядка в структуре поверхности неупорядоченных материалов с существующими.

Следует отметить, что предложенный способ обработки информации о пространственном распределении вещества методами нелинейной динамики является эффективным приемом выявления порядка в структуре. Тогда как традиционные подходы к анализу структуры материалов, использующие такие статистические характеристики как: пространственный спектр, корреляционная длина, вейвлет-преобразование, а также представления о ближнем и среднем порядке не дают информации об их динамической природе.

Методика расширяет возможности атомно-силовой микроскопии (АСМ) и может быть использована как средство контроля за структурными параметрами тонких пленок в процессе формирования и эволюции приборных структур нанoeлектроники.

В главе 3 проведены экспериментальные исследования структурных и информационных характеристик кремниевых структур для выявления самоорганизации.

Для получения изображений поверхностей исследуемых образцов и их статистического анализа использовалась атомно-силовая зондовая микроскопия (АСМ) и разработанная методика расчета информационных характеристик поверхности материалов.

В разделах 3.1.1 – 3.1.3 разработаны конструкции образцов a-Si:H, позволяющие исследовать их структурные свойства, осуществлен выбор технологических

режимов получения пленок на основе α -Si:H. Пленки α -Si:H были получены методом тлеющего разряда на установке с частотой возбуждающего генератора 55 кГц.

Температура подложки изменялась от 40 до 325⁰С, давление в реакторе изменялось пропорционально температуре по закономерности $\Delta T/\Delta P = \text{const}$ в пределах от 133 до 266 Па, время осаждения на подложку менялось от 5 до 30 мин., мощность разряда и расход газа силана поддерживались постоянными и составляли 200 Вт и 200 см³/мин соответственно.

В разделе 3.2 приведены результаты исследования пленочных структур кристаллического Si, поликристаллического Si и α – Si:H (рисунок 3). В п. 3.2.1 определены основные характеристики микрорельефа структуры поверхности образцов, проведен анализ островков на поверхности. В п. 3.2.2 рассчитаны информационные характеристики (таблица 3).

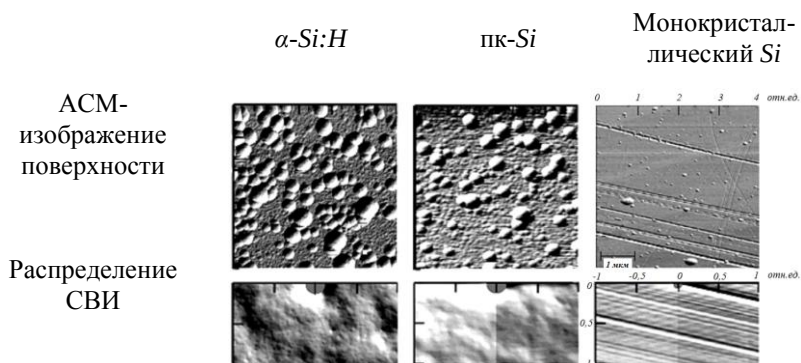


Рисунок 3 – АСМ изображения поверхности материалов различной структурной организации и распределение СВИ

Таблица 3 – Значения СВИ для α -Si:H, поли- и монокристаллического кремния

Образцы	СВИ, отн. ед.		
	Минимальное значение	Максимальное значение	Среднее значение
α -Si:H	0.006	0.053	0.025
пк-Si (α -Si:H, нагретый до 600 ⁰ С)	0.009	0.660	0.033
монокр.-Si n-p ⁺	0.367	0.763	0.577

Показано что, значения СВИ для аморфного материала попадают в категорию критериев степени порядка, соответствующую хаотической структуре поверхности: $\text{СВИ}_{\min} < 0.01$, $\text{СВИ}_{\max} < 0.1$, $\text{СВИ}_{\text{avr}} < 0.03$. Значения СВИ для поликристаллического материала попадают в промежуточную категорию критериев степени порядка, соответствующую структуре поверхности с элементами организации (слабоорганизованной): $0.01 < \text{СВИ}_{\min} < 0.03$, $0.1 < \text{СВИ}_{\max} < 0.67$, $0.03 < \text{СВИ}_{\text{avr}} < 0.1$. Результаты по исследованию образцов монокристаллического кремния подтверждают определенный теоретически диапазон значений СВИ для упорядоченной структуры: $\text{СВИ}_{\min} > 0.03$, $\text{СВИ}_{\max} > 0.67$, $\text{СВИ}_{\text{avr}} > 0.1$.

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

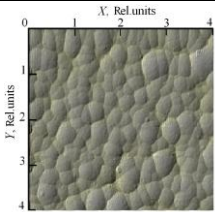
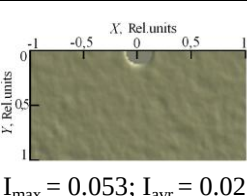
Таким образом, получены значения СВИ для всех типов структур, которые подтверждают теоретически предложенные критерии степени порядка структуры поверхности материала.

В разделе 3.3 установлены взаимосвязи технологических режимов получения неупорядоченных структур, свойств поверхности и информационных характеристик самоорганизующейся системы (таблица 4).

Проведены исследования структуры поверхности нелегированных пленок a-Si:H, полученных методом низкочастотного (55 кГц) тлеющего разряда, в зависимости от температуры осаждения и времени осаждения на подложку. Показано, что при изменении температуры подложки в пределах от 40 до 325 °С и давлении газов в камере от 133 Па до 266 Па ($\Delta T_i/\Delta P_i = \text{const}$) типичные статистические характеристики, широко применяемые для параметризации структуры материалов, остаются неизменными. Однако, как показано в [1], электрофизические свойства, напротив, меняются (плотность локализованных состояний на равновесном уровне Ферми уменьшается в среднем с $1.7 \cdot 10^{17}$ до $3.8 \cdot 10^{16}$ см⁻³·эВ⁻¹, оптическая ширина запрещенной зоны увеличивается с 1.66 до 1.72 эВ). Таким образом, существующие методики хотя и дают представление о профиле поверхности, однако не позволяют обосновать некоторые взаимосвязи структурных, оптических и электрофизических характеристик.

С применением разработанной методики удастся выявить различие структуры: с увеличением температуры подложки для a-Si:H, нанесенных на проводящий слой TCO, наблюдается уменьшение СВИ (рисунок 4).

Таблица 4 – Типичные результаты исследования поверхности образцов a-Si:H с применением разработанной методики расчета СВИ

Исследуемый объект	Изображение исходной поверхности	Средняя взаимная информация	Вложение Такенса в 3-хмерное пространство
Образец α-Si:H		 $I_{\max} = 0.053; I_{\text{avr}} = 0.025$	

Проведенное исследование позволило установить, что с помощью методики расчета информационных характеристик удастся выявить изменение структуры и свойств при изменении технологических факторов, что не обнаруживается при использовании таких морфологических характеристик, как диаметр островков, шероховатость поверхности и т.д. Исследования взаимосвязи структурных и информационных характеристик пленок a-Si:H, полученных при постоянной температуре подложки 250 °С,

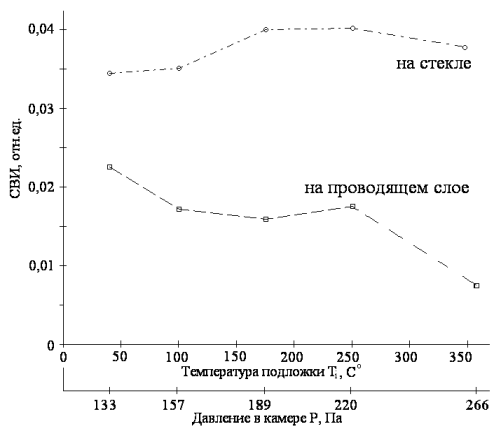


Рисунок 4 – Средние значения СВИ для серий образцов α -Si:H в зависимости от температуры подложки

результате происходит формирование микроструктуры материала с минимальной шероховатостью, и достигаются параметры α -Si:H, соответствующие пленкам приборного качества.

По результатам проведенных экспериментальных исследований можно сделать вывод, что разработанная в главе 2 методика является эффективным дополнительным средством контроля за структурными параметрами тонких пленок в процессе формирования приборных структур нанoeлектроники.

В главе 4 развит подход к описанию неупорядоченного состояния полупроводников как детерминированной хаотической системе, в частности, в разделе 4.1 разработаны основы физической модели неупорядоченного состояния полупроводников, учитывающей особенности динамики процессов отвердевания (в промежуточном слое).

В разделе 4.2 показано, как предлагаемая модель, в отличие от существующей модели случайной сетки, позволяет объяснить основные физические закономерности

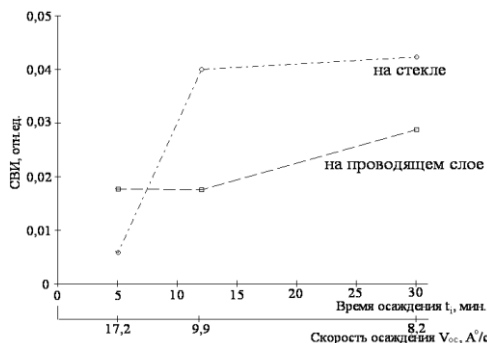


Рисунок 5 – Средние значения СВИ для серий образцов α -Si:H в зависимости от времени осаждения

давлению в камере 220 Па, мощности разряда 200 Вт и расходе силана 200 см³/мин, показали, что при увеличении времени осаждения пленки наблюдается рост СВИ (рисунок 5).

Это подтверждает, что при увеличении толщины пленки уменьшается влияние подложки [1]. При этом на картине СВИ проявляется более развитый рельеф. Это свидетельствует о возникновении дальних корреляций. Разница максимального и минимального значения высоты профиля снижается.

Таким образом, с увеличением времени осаждения пленки ослабляется степень влияния подложки, усиливаются корреляции, формируется более равномерная упорядоченная пленка α -Si:H. В

формирования неупорядоченных систем с учетом процессов самоорганизации, сосуществование хаоса в структуре с такими свойствами аморфных материалов, как невоспроизводимость характеристик, наличие структурно-химических неоднородностей, которые не вписываются в концепцию случайной сетки. Обсуждаются физические аспекты существования локализованных состояний в «щели подвижности» в аморфных материалах.

В разделе 4.3 показано, что проблема невоспроизводимости структуры материалов микро- и нанoeлектроники не яв-

ляется чисто технической, а носит в большей степени фундаментальный физический характер. Физическая схема явления невоспроизводимости такова: флуктуации и не-точность задания параметров технологии через неустойчивость движения из-за наличия потенциала разнообразных вариантов структуры приводят к невоспроизводимости. Вероятность и случайность – фундаментальные черты процессов структурообразования твердотельных материалов.

В разделе 4.4 показано, что управление ростом твердотельных материалов должно быть основано на соответствии управляющих воздействий внутренним свойствам вещества, возникающим при отвердевании. Определены основные принципы синергетического управления процессами формирования твердотельной структуры. Разработана обобщенная схема управления, основанная на этих принципах.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Обоснована необходимость разработки новых методов обнаружения порядка в структуре поверхности полупроводника, проведена адаптация существующих алгоритмов нелинейной динамики для анализа пространственно-распределенных систем, к которым можно отнести поверхность материала.
2. Разработан метод обработки результатов исследования структуры поверхности неупорядоченных полупроводников, отличающийся использованием основ информационной теории систем, позволяющий получить двумерное распределение корреляций по поверхности.
3. Разработана методика анализа порядка в структуре поверхности по АСМ-изображению поверхности неупорядоченных полупроводников, построенная на методах нелинейной динамики, описывающих корреляции между частями системы, возникающие в результате нелинейных процессов. Основой методики является алгоритм расчета средней взаимной информации (СВИ) по ненаправленному вектору и по окружности, реализованный в виде соответствующего программного обеспечения.
4. Комплексным тестированием разработанной методики на моделях поверхностей показано, что используемая программная реализация нелинейно-динамических алгоритмов дает адекватные оценки упорядоченности систем. Предложены численные критерии для определения степени порядка структуры поверхности, регламентирующие значения минимальной, средней и максимальной СВИ для хаотической, слабоорганизованной и упорядоченной наноструктур.
5. С применением разработанной методики расчета СВИ по АСМ-данным исследована структура поверхности кристаллического Si, поликристаллического Si и аморфного гидрогенизированного кремния (a-Si:H). Для всех типов структур получены значения СВИ, подтверждающие предложенные критерии определения степени порядка структуры поверхности.
6. Проведены исследования упорядоченности структуры поверхности нелегированных пленок a-Si:H, полученных методом НЧ (55 кГц) тлеющего разряда при различных параметрах технологического режима. Показано, что с увеличением температуры от 40 °C до 360 °C и давления от 133 до 266 Па (с сохранением отношения $\Delta T_s/\Delta P$), несмотря на неизменность параметров микроструктуры, таких как шероховатость, средняя высота и диаметр островков, корреляция между различными частями системы значительно уменьшается (СВИ убывает более чем в 2 раза), что существенно изменяет электрофи-

зические свойства материала (плотность локализованных состояний снижается приблизительно в 3 раза).

7. Установлено, что при увеличении времени осаждения пленок a-Si:H от 5 до 30 мин в условиях, указанных в п. 5, наблюдаются снижение шероховатости и рост средней взаимной информации, что свидетельствует об ослаблении влияния подложки, усилении корреляций и формировании более равномерной упорядоченной пленки.

8. Разработаны основы физико-математической модели неупорядоченного состояния полупроводников как детерминированной хаотической системы, в которой учитываются особенности динамики процессов отвердевания материала. Управление ростом неупорядоченных полупроводников рассмотрено как управление самоорганизующейся системой.

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА:

[1] Уточкин И.Г. Исследование структурных и электрофизических характеристик пленок на основе a-Si:H, полученных в плазме НЧ разряда: Дисс. канд. физ.-мат. наук. Рязань, 2005. 171 с.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Результаты диссертации опубликованы в **41** научной работе, в том числе:

1. Ларина Т.Г.¹ Некоторые аспекты применения нелинейной динамики // Физика полупроводников. Микроэлектроника. Радиоэлектронные устройства: Межвуз. сб. науч. трудов. Рязань, РГРТА, 2002. С. 22-26.
2. Ларина Т.Г. Невоспроизводимость структуры материалов с позиций теории нелинейных систем // Физика полупроводников. Микроэлектроника. Радиоэлектронные устройства: Межвуз. сб. науч. трудов. Рязань, РГРТА, 2003. С. 46-51.
3. N. Bodyagin, S. Vikhrov, T. Larina et al. Diagnostics of the structure and amorphous materials growth process by nonlinear dynamics method // Journal of optoelectronics and advanced materials. Vol. 5. No. 5. 2003. Pp. 1293-1298.
4. N. Bodyagin, S. Vikhrov, T. Larina et al. Diagnostics of the structure and amorphous materials growth process by nonlinear dynamics method // Romanian conference on advanced materials: ROCAM – 2003. Romania, Constanta, 2003, Sept. 15-18. Abstract book. P. 213.
5. Природа невоспроизводимости структуры и свойств материалов для микро- и наноэлектроники: Учеб. пособие // Н.В. Бодягин, С.П. Вихров, Т.Г. Ларина и др. Рязань: РГРТА, 2004. 64 с.
6. Ларина Т.Г. Роль промежуточного слоя в процессе образования твердотельных структур // Физика полупроводников. Микроэлектроника. Радиоэлектронные устройства: Межвуз. сб. науч. трудов. Рязань, РГРТА, 2004. С. 21-25.
7. Бодягин Н.В., Вихров С.П., Ларина Т.Г. и др. Новый подход к определению аморфного состояния // Сборник трудов IV Международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники». С.-Пб, 2004. С. 230-231.
8. Бодягин Н.В., Вихров С.П., Ларина Т.Г. и др. Новые принципы технологии некристаллических материалов // Сборник трудов IV Международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники». С.-Пб, 2004. С. 13-14.
9. Вихров С.П., Бодягин Н.В., Ларина Т.Г. и др. Процессы роста неупорядоченных полупроводников с позиций теории самоорганизации // **Физика и техника полупроводников**. 2005. Т. 39. Вып. 8. С. 953-959.

¹ Ларина – девичья фамилия диссертанта, изменена на Авачёву в 2006 г. в связи с регистрацией брака.

10. Larina T.G., Vikhrov S.P., Bodyagin N.V. A nature of structural irreproducibility of materials on micro- and nanoscales // Physics of Electronic Materials: 2nd International Conference Proceedings, Kaluga, Russia, May 24-27, 2005. Vol. 2. Kaluga: KSPU Press, 2005. Pp. 31-32.
11. Larina T.G., Vikhrov S.P., Bodyagin N.V. Structure formation processes in noncrystalline semiconductors from the point of view of the self-organizing theory // Physics of Electronic Materials: 2nd International Conference Proceedings, Kaluga, Russia, May 24-27, 2005. Vol. 2. Kaluga: KSPU Press, 2005. Pp. 11-12.
12. Неопределенность и необратимость физических процессов: Учеб. пособие // С.П. Вихров, Н.В. Бодягин, Т.Г. Ларина. Рязань: РГРТА, 2005. 72 с.
13. Ларина Т.Г., Черепнин А.А. Явление самоорганизации в процессах формирования структур твердотельных материалов // Тез. докл. 11-й всерос. науч. конф. студентов-физиков и молодых ученых, Екатеринбург, 24-30 марта 2005. Екатеринбург: издательство АСФ России, 2005. С. 262-263.
14. Ларина Т. Г. Исследование структурообразования в неупорядоченных полупроводниках с применением теории самоорганизации // Тез. докл. XII Междунар. конф. студентов, аспирантов и молодых ученых по фундаментальным наукам "Ломоносов - 2005", 12-15 апреля 2005. Сек. Физика. Т. 2. М.: Физфак МГУ, 2005. С. 124-126.
15. Бодягин Н.В., Вихров С.П., Ларина Т.Г. и др. Методика исследования самоорганизации неупорядоченных материалов с применением теории информации // Сборник трудов V Международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники». С.-Пб, 2006. С. 154-155.
16. Бодягин Н.В., Вихров С.П., Ларина Т.Г. и др. Диагностика структуры поверхностей неупорядоченных полупроводников // Сб. трудов V Международной конференции «Аморфные и микрокристаллические полупроводники». С.-Пб, 2006. С. 163-164.
17. Ларина Т.Г. Методика параметризации структуры поверхности неупорядоченных материалов // Физика полупроводников. Микроэлектроника. Радиоэлектронные устройства: Межвуз. сб. науч. трудов. Рязань: РГРТА, 2006. С. 3-8.
18. Larina T.G., Bodyagin N.V., Vikhrov S.P. et al. Research of Amorphous Silicon Thin-Film Structure and Growth Processes by Nonlinear Dynamics Method // Abstracts of the 2006 Spring Meeting of the Materials Research Society, the USA, San Francisco, April 17-21. P. 19.
19. Larina T.G., Bodyagin N.V., Vikhrov S.P. et al. A Nature of Structural Irreproducibility and Instability of Amorphous Silicon Thin-Films // Abstracts of the 2006 Spring Meeting of the Materials Research Society, the USA, San Francisco, April 17-21, 2006. P. 20.
20. N.V. Bodyagin, S.P. Vikhrov, T.G. Larina et. al.: Research on Amorphous Silicon Thin-Film Structure and Growth Processes Using Nonlinear Dynamics Methods, in *Amorphous and Polycrystalline Thin-Film Silicon Science and Technology-2006*, edited by H.A. Atwater et al. (Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 910, Warrendale, PA, 2006), 0910-A05-01. 6 p.
21. Т.Г. Авачева, Н.В. Бодягин, С.П. Вихров и др. Разработка методики анализа порядка в структуре поверхности неупорядоченных материалов для наноэлектроники с применением теории информации // Всероссийский молодежный научно-инновационный конкурс-конференция «Электроника-2006»: тезисы конференции. М.: МИЭТ, 2006. С. 3.
22. Авачева Т.Г., Митрофанов К.М. Определение степени упорядочения структуры поверхности материалов микро- и наноэлектроники // Физика полупроводников. Микроэлектроника. Радиоэлектронные устройства: Межвуз. сб. науч. трудов. Рязань: РГРТУ, 2007. С. 21-27.

23. Авачева Т.Г., Бодягин Н.В., Вихров С.П. и др. Выявление признаков самоорганизации в неупорядоченных полупроводниковых структурах микро- и нанoeлектроники // Труды IX международной конференции «Опто-, нанoeлектроника, нанотехнологии и микросистемы». Ульяновск: УлГУ, 2007. С. 176.
24. Процессы самоорганизации в неупорядоченных материалах: Учеб. пособие // Т.Г. Авачева, Н.В. Бодягин, С.П. Вихров и др. Рязань: РГРТУ, 2007. 56 с.
25. Авачева Т.Г., Бодягин Н.В., Вихров С.П. и др. Исследование самоорганизации неупорядоченных материалов с применением теории информации // **Физика и техника полупроводников**. 2008. Т. 42. Вып. 5. С. 513-518.
26. Авачева Т.Г., Балашов Е.В., Вихров С.П. и др. Исследование структуры поверхности неупорядоченных материалов с применением теории самоорганизации и атомно-силовой микроскопии. // **Вестник РГРТУ**. Вып. 23. Рязань, 2008. С. 118-121.
27. Программа для обработки изображений профиля поверхности материала, полученных с применением атомно-силовой микроскопии, для исследования информационных характеристик структур микро- и нанoeлектроники "NanoInform" / Авачева Т.Г., Бодягин Н.В., Вихров С.П. и др. Свидетельство об отраслевой регистрации разработки ОФАП № 9666. Выдано 21.01.08. № госрегистрации 50200800039.
28. Avacheva T.G., Bodyagin N.V., Vikhrov S.P. et al. Research of surface structure of silicon films for micro- and nanoelectronics with various structural organization // Abstract: 2008 MRS Spring meeting, March 24-28, 2008. A18.9. http://www.mrs.org/s_mrs/doc.asp?CID=13713&DID=208855.
29. Avacheva T.G., Vikhrov S.P., Nikolaev A.I. et al. Research of a-Si:H films structure depending on technological modes of precipitation // Proc. of 3rd International Conference "Physics of electronic materials". V.2. Kaluga: KSPU Press. 2008. P. 38-40.
30. Авачева Т.Г., Бодягин Н.В., Вихров С.П. и др. Определение степени упорядочения структуры поверхности материалов микро- и нанoeлектроники // Сборник трудов VI Международной конференции "Аморфные и микрокристаллические полупроводники". С.-Пб., 2008. С. 14-15.
31. Авачева Т.Г., Вихров С.П., Быков В.А. и др. Исследование структурных особенностей пленок a-Si:H в зависимости от технологических режимов осаждения // Сборник трудов VI Международной конференции "Аморфные и микрокристаллические полупроводники". С.-Пб., 2008. С. 32-33.
32. Авачева Т.Г., Бодягин Н.В., Вихров С.П. и др. Анализ процессов самоорганизации структуры поверхности неупорядоченных полупроводников с применением теории информации. // Труды X международной конференции "Опто-, нанoeлектроника, нанотехнологии и микросистемы". Ульяновск: УлГУ, 2008. С. 125.
33. Авачева Т.Г. Диагностика структур микро- и нанoeлектроники с применением программы «NanoInform» // Сборник трудов I Всероссийской научно-технической конференции «Физика и технология аморфных и наноструктурированных материалов и систем» (FTANMS – 2008). Рязань, 2008. С. 218-221.
34. Авачева Т.Г. Теоретико-экспериментальное установление критериев степени упорядочения структуры материала на основе методики выявления дальнедействующих корреляций // Сборник трудов II Всероссийской школы-семинара студентов, аспирантов и молодых ученых по направлению «Наноматериалы». Т. 1. Рязань, 2009. С. 119-125
- и другие.

АВАЧЕВА Татьяна Геннадиевна

**ИССЛЕДОВАНИЕ САМООРГАНИЗАЦИИ
СТРУКТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МАТЕРИАЛОВ**

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико–математических наук

Подписано в печать 03.11.2009. Формат бумаги 60х84 1/16.

Бумага ксероксная. Печать трафаретная.

Усл. печ. л. 1,0. Уч.-изд. л. 1,0. Тираж 100 экз.

Отпечатано: ЗАО «Колорит»,
г. Рязань, ул. Певомайский пр-т, 37/1.