

01;05

## О расчете корреляций в структуре поверхностей твердотельных материалов

© С.М. Мурсалов, Н.В. Бодягин, С.П. Вихров

Рязанская государственная радиотехническая академия

Поступило в Редакцию 16 ноября 1999 г.

Рассматриваются методы расчета корреляций в структуре твердотельных материалов. Предлагается способ определения средней взаимной информации (СВИ) для двумерных систем. Обсуждаются результаты экспериментального исследования поверхностей аморфного гидрогенизированного кремния  $a\text{-Si:H}$ .

Существующие методы исследования порядка в структуре твердотельных материалов, а также механизмов и динамики процессов их роста имеют серьезные недостатки, и проблема их изучения остается открытой [1]. Это обуславливает необходимость разработки альтернативных подходов. Одним из возможных вариантов является использование методов нелинейной динамики, поскольку вещество в процессе отвердевания представляет собой нелинейную, самоорганизующуюся систему [2,3].

Важной характеристикой нелинейных систем является СВИ. Именно она в отличие от функций распределения, автокорреляционной функции и спектров Фурье характеризует корреляции в хаотических нелинейных системах. Кроме того, поиск локального минимума СВИ является важным этапом в процедуре вложения и вычисления размерности аттрактора системы [4].

Взаимная информация определяется как количество информации, которое становится известным о значении случайной функции в точке  $A$ , когда становится известным ее значение в точке  $B$ . Пусть  $D$  — область определения, а  $Z$  — область случайной функции,  $P_X$  — плотность распределения вероятностей в точке  $X$  (как функция на  $Z$ ),  $P_{XY}$  — совместная плотность распределения в точках  $X$  и  $Y$  (как функция на  $Z^2$ ). Тогда взаимная информация  $I_{AB}(z_1, z_2)$  для пары известного и предсказываемого значения рассчитывается по следующей формуле:

$$I_{AB}(z_1, z_2) = \log \left[ \frac{P_{AB}(z_1, z_2)}{P_A(z_1)P_B(z_2)} \right]. \quad (1)$$

Логарифм здесь и далее двоичный, значение получаем в битах.

Согласно (1), взаимная информация определяется как функция на  $Z^2$ , и ее значения неотрицательны (так как  $P_{AB} \geq P_A P_B$ ).

Средняя взаимная информация (СВИ) определяется как среднее ожидаемое значение взаимной информации для заданной пары точек путем интегрирования по  $Z^2$

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

Таким образом, СВИ — это функция на  $D^2$ , принимающая неотрицательные значения.

Рассмотрим случай, когда  $D$  — прямоугольная область, а случайная функция — рельеф поверхности исследуемого материала. Предполагается, что свойства поверхности инвариантны относительно начала системы отсчета, таким образом, будут исследоваться различные свертки функции  $I(A, B)$ .

Пусть  $R$  — область неотрицательных действительных чисел и  $L = L(r)$  — определенная на  $R$  СВИ как функция от расстояния на области  $D$ , определяемая как свертка  $I(A, B)$  по окружностям радиуса  $r$ . Физический смысл  $L$  — среднее количество информации, которое известное значение в данной точке несет о значениях на расстоянии  $r$ . Расчет  $L(r)$  производится путем численного интегрирования — построения многомерных гистограмм на  $D \times D \times R$  и суммирования по равным расстояниям. На рис. 1 показан вид графиков  $L(r)$  для различных двухмерных объектов.

Кривая 1 получена для сигнала вида  $A(x, y) = \sin(wx) + \cos(wy)$ , кривая 2 — для поверхности пленки аморфного гидрогенизированного кремния ( $a\text{-Si:H}$ ), кривая 3 — для случайного двухмерного шума.

Пленки  $a\text{-Si:H}$  получали методом тлеющего разряда из 100%-ного силана при мощности разряда  $50 \text{ mW/cm}^2$ , давлении  $70 \text{ Pa}$ , скорости расхода силана  $200 \text{ cm}^3/\text{s}$  и при различных температурах подложки. Расчет СВИ проводился по профилю поверхности, получаемому с помощью атомной силовой микроскопии. Высота профиля отсчитывалась от некоторого уровня, принятого за нулевой, и измерялась через дискретные расстояния.

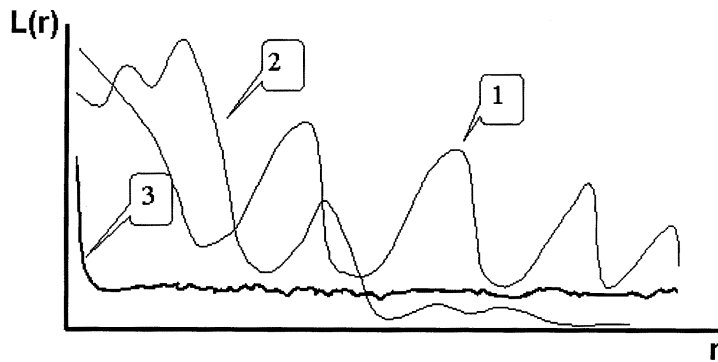


Рис. 1. Зависимость  $L(r)$  для различных двумерных объектов.

Вид графиков СВИ, представленных на рис. 1, вызывает серьезные вопросы. Для кривой 1 неожиданно слабо выражена периодичность, а для 3 (шум) не наблюдается ожидаемый случайно равномерный сигнал.

Причина такого несоответствия специфична именно для размерностей больше единицы и заключается в том, что качество статистики для различных расстояний существенно различается. В самом деле, это качество напрямую определяется размером выборки, а для двумерного случая этот размер пропорционален длине окружностей радиуса, равно-го аргументу, то есть  $2\pi r$ .

При исследовании реального образца следствие этого эффекта — неверный выбор минимума СВИ или его отсутствие, а в результате — плохо "развернутый" в пространстве аттрактор.

Корректный учет переменного качества статистики может быть проведен через нормировку СВИ, рассчитываемую по формуле (2). При этом в качестве нормировочного множителя можно использовать величину  $L_3(r) = \frac{\log(1+r)}{r}$ , которая описывает график СВИ для случайного двумерного шума (кривая 3 рис. 1). В этом случае нормированная СВИ определяется как

$$L_N(r) = \frac{r}{\log(1+r)} L(r). \quad (3)$$

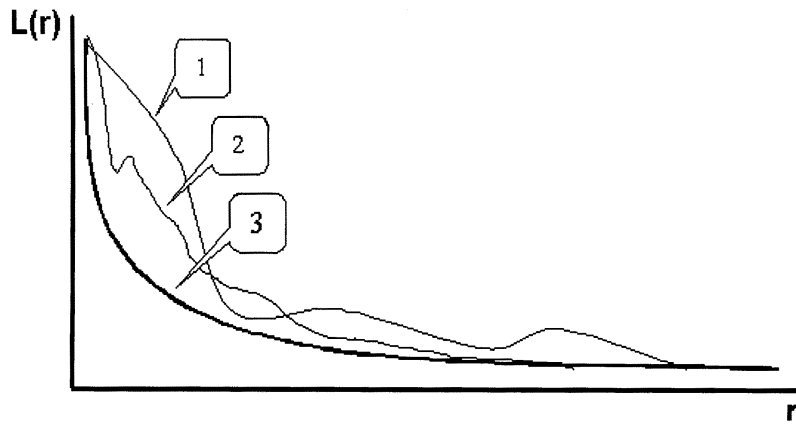


Рис. 2. Зависимости нормированных  $L(r)$  для различных двухмерных объектов.

Графики нормированной СВИ для тех же исходных данных, что и на рис. 1, показаны на рис. 2.

Очевидно, что нормированная СВИ адекватно отражает пространственные корреляции в системах. СВИ для  $A(x, y) = \sin(wx) + \cos(wy)$  имеет выраженную синусоидальную форму. Для случайного шума СВИ имеет, как и ожидалось, равномерный вид. Для поверхности образца  $a\text{-Si:H}$  СВИ имеет отчетливо выраженный минимум, при этом не совпадающий с тем, который наблюдается на рис. 1. Расстояния, на которых СВИ имеет максимумы, приблизительно равны размеру неоднородностей (островков) на поверхности  $a\text{-Si:H}$ . Такая же картина наблюдается для образцов  $a\text{-Si:H}$ , получаемых при других температурах подложки. При этом характер зависимости СВИ оказывается весьма чувствительным к условиям роста пленок. Более подробное обсуждение физического смысла кривой СВИ и ее зависимости от технологических параметров является предметом отдельного исследования.

Таким образом, предлагаемый подход к расчету СВИ позволяет адекватно оценивать корреляции в пространственно-распределенных двухмерных системах.

## Список литературы

- [1] Айвазов А.А., Будагян Б.Г., Вихров С.П., Попов А.И. Неупорядоченные полупроводники: Уч. пособие. М.: Изд-во МЭИ, 1995. 352 с.
- [2] Николис Г., Пригожин И. Познание сложного М.: 1990. 342 с.
- [3] Aivazov A.A., Budyagin N.V., Vikhrov S.P. // Material Research Society USA, Spring Meeting Proceedings. 1996. V. 420. P. 145–151.
- [4] Abarbanel H.D.I., Brown R., Sidorovich J.J., Tsimiring L.S. // Rev. Mod. Phys. 1993. V. 65. N 4. P. 1331–1392.