

01;05

Динамические критерии воспроизводимости структуры твердотельных материалов

© Н.В. Бодягин, С.П. Вихров

Рязанская государственная радиотехническая академия

Поступило в Редакцию 21 апреля 1997 г.

Рассматриваются причины неповторяемости структуры твердотельных материалов, выращиваемых в одинаковых технологических условиях. Разработаны динамические критерии неповторяемости. Определены ее фундаментальный предел и зависимость от размеров системы.

Плохая повторяемость структуры материалов, синтезированных по одной технологии, является важной проблемой. Ее существование обычно связывается с отклонениями от нормы некоторых технологических параметров, а главным способом улучшения воспроизводимости считается увеличение точности задания параметров. Однако такой подход часто оказывается неэффективным. Одной из причин этого является отсутствие критериев, позволяющих оценивать влияние на воспроизводимость различных факторов.

В работе [1] показано, что образование твердотельного состояния проходит через стадию низкоразмерного динамического хаоса. Мы предполагаем, что неустойчивость движения, присущая хаотической динамике, является причиной плохой повторяемости структуры материалов. Поэтому критерии воспроизводимости должны быть связаны с инвариантными характеристиками хаотических систем. Рассмотрим несколько таких критериев.

1. Энтропия Колмогорова–Синяя (S_{KS}). Она равна сумме положительных показателей Ляпунова и характеризует степень неустойчивости процессов роста.

2. Процесс отвердевания непосредственно протекает в промежуточном слое между твердой и жидкой (газообразной) фазами. Критерием воспроизводимости является соотношение между временем нахождения вещества в этом слое t_{IL} и временем, в течение которого система хранит

память о своем начальном состоянии $T_{\max}t_{IL}$ определяется выражением

$$t_{IL} = d_{IL}/v_g, \quad (1)$$

где d_{IL} — толщина слоя, v_g — скорость роста. T_{\max} можно представить в виде [3]:

$$T_{\max} = (\rho_D/\rho_S) \log(1/\varepsilon), \quad (2)$$

где ρ_D — плотность фрактальной размерности; ρ_S — плотность энтропии; ε — точность задания начального состояния, определяемая отклонениями от нормы значений технологических параметров Δp и флуктуациями f :

$$\varepsilon = \Delta p + f. \quad (3)$$

Возможны следующие случаи: если $t_{IL} \ll T_{\max}$, то структура вещества воспроизводится хорошо, если $t_{IL} \approx T_{\max}$, то частично, если $t_{IL} \gg T_{\max}$, то плохо.

3. Степень воспроизводимости можно охарактеризовать через среднюю взаимную информацию [2]. Пусть в результате измерений некоторой характеристики в различных точках структуры материала, произведенного в первом процессе, получено множество $s(1)$, а во втором — $s(2)$. Средняя взаимная информация между этими множествами определяется по формуле

$$I(1, 2) = \sum P(s(1), s(2)) \log_2 [(P(s(1), s(2)))/(P(s(1))P(s(2)))] , \quad (4)$$

где $P(s(1))$ и $P(s(2))$ — функции вероятности для характеристик обоих материалов. $P(s(1), s(2))$ — совместная вероятность. Сумма в выражении (4) берется по числу измерений.

Экспериментально средняя взаимная информация может быть определена по профилю поверхности материала, гистограмма функции радиального распределения, спектрам оптического поглощения.

Все приведенные критерии инварианты относительно конкретных технологий и позволяют оценивать влияние на воспроизводимость различных факторов. Эти критерии могут быть рассчитаны с помощью методов и алгоритмов, используемых для определения характеристик нелинейных систем [2].

Следствием динамической неустойчивости процессов роста является существование фундаментального предела воспроизводимости

R_{lim} , который определяет предел точности задания параметров технологии, выше которого увеличение точности становится неэффективным.

Наращение возмущения в структуре вещества в процессе отвердевания определяется по формуле

$$R = \varepsilon \exp(S_{kstLL}). \quad (5)$$

Полагая в (3) $\Delta p \rightarrow 0$, получим значение R_{lim} , которое связано с неустранимыми флуктуациями и не может быть уменьшено.

Экспериментально R_{lim} определяется по моменту насыщения в зависимости R от Δp . Это означает, что f становится больше Δp .

В работе [4] доказано, что для показателей Ляпунова справедлива следующая зависимость от размера системы V :

$$\lambda = C/V, \quad (6)$$

где C — константа. Из этого следует, что при уменьшении V показатели Ляпунова и, как следствие, степень невоспроизводимости увеличиваются.

С другой стороны, в окрестности устойчивого состояния амплитуды внутренних флуктуаций ведут себя как $1/V$. В критической точке они нарастают как величины порядка $V^{-1/2}$. Поэтому для макроскопически больших систем внутренние флуктуации чрезвычайно малы. Для малых систем внутренние флуктуации играют существенную роль наряду с внешними и тоже являются причиной уменьшения воспроизводимости.

Эти выводы актуальны для технологий микро- и наноэлементов, используемых в микроэлектронике.

Неустойчивость процессов роста, определяемая хаотической динамикой, является причиной того, что появление любой структуры носит вероятностный характер и ее невозможно воспроизвести повторно. Простое увеличение точности задания технологических параметров оказывается наименее эффективным для улучшения воспроизводимости. Необходимо использовать способы, применяемые для управления нелинейными системами, которые основаны на точном знании динамики процессов.

Список литературы

- [1] *Aivazov A.A., Bodaygin N.V., Vikhrov S.P.* // Material Research Society. USA, Spring Meeting Proceedings. 1996. V. 420. P. 145–151.
- [2] *Abarbanel H.D.I., Brown R., Sidorovich J.J.* // Rev. Mod. Phys. 1993. V. 65. № 4. P. 1331–1392.
- [3] *Корзинов Л.Н., Рабинович М.И.* // Изв. вузов. ПНД. 1994. Т. 2 № 1. С. 59–69.
- [4] *Grassberger P.* // Physica Scripta. 1989. V. 40. P. 346–353.