

# Исследование корреляционных параметров структуры поверхности неупорядоченных полупроводников с помощью методов двумерного DFA и средней взаимной информации

© А.В. Алпатов, С.П. Вихров, Н.В. Рыбина<sup>†</sup>

Рязанский государственный радиотехнический университет,  
390005 Рязань, Россия

(Получена 1 сентября 2014 г. Принята к печати 4 сентября 2014 г.)

Исследованы процессы самоорганизации структуры поверхности аморфного гидрогенизированного кремния с помощью методов флуктуационного анализа и средней взаимной информации по изображениям поверхности, полученным атомно-силовой микроскопией. Выявлено, что все структуры имеют корреляционный вектор и представляют собой гармонические составляющие с наложением шума. Показано, что с изменением технологических параметров получения пленок *a*-Si:H меняются корреляционные свойства их структуры. При увеличении температуры подложки уменьшается образование структурных неоднородностей, при этом увеличивается длина корреляционного вектора и повышается упорядоченность структуры. Показано, что методика, основанная на методе флуктуационного анализа, в сочетании с методом средней взаимной информации позволяет исследовать процессы самоорганизации в любых структурах на разных масштабах.

## 1. Введение

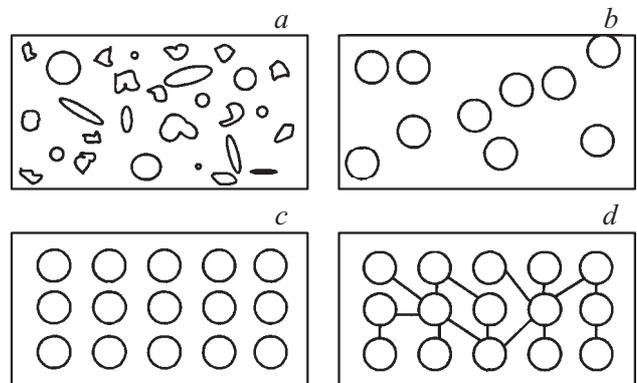
В настоящее время для производства большого количества приборов микро- и нанoeлектроники используется кристаллический кремний. Современные технологии позволяют создавать транзисторы с трехмерной структурой затвора (FinFET) при ограничениях 8–14 нм, где в качестве активной области используется монокристаллический кремний на изоляторе. Тем не менее во всем мире исследователей интересует вопрос: что будет за пределами этих размеров? Ведь как только начинается работа с областями, размеры которых составляют единицы нанометров, проявляются эффекты туннелирования носителей заряда и начинают действовать законы квантовой механики. Поэтому для функционирования устройств с размерами активных областей < 8 нм необходимы иные принципы обработки информации.

Ориентиром при решении этой задачи могут являться биологические системы. Известно, что формирование биологических структур происходит по принципам самосборки и самоорганизации, при этом минует прямой перебор всех конформаций. Например, при сворачивании белка для цепи из 100 остатков количество возможных конформаций, которые он может принимать, составляет  $10^{100}$ . При условии затраты  $10^{-13}$  с на одну конформацию простой перебор всех конформаций в поиске единственно возможной занял бы  $10^{80}$  лет. На самом же деле процесс формирования функционального белка составляет доли секунды. Также для биологических систем характерно наличие симметрии в надмолекулярных структурах, что обуславливает возможность появления у них периодической организации [1].

Один из подходов, представляющийся перспективным для новых принципов обработки информации, — это создание самоорганизующихся гетерогенных систем, что в общем виде проиллюстрировано рис. 1. Здесь процесс самоорганизации условно разделен на 4 стадии: на пер-

вой стадии имеются наноструктуры различных формы и размера, расположенные разупорядоченно (рис. 1, *a*); далее происходит образование структур определенных формы и размера (рис. 1, *b*); на третьей стадии наноструктуры организуются упорядоченно (рис. 1, *c*); на последней стадии происходит формирование связей между ними (рис. 1, *d*).

В свою очередь наряду с созданием самоорганизующихся систем необходимо разрабатывать методы исследования таких систем, позволяющие осуществлять поиск структурных корреляций. Одним из таких методов является модифицированный метод флуктуационного анализа (two-dimensional detrended fluctuation analysis, 2D DFA), сущность и возможности которого подробно рассмотрены в литературе [2,3]. Метод 2D DFA позволяет изучать корреляционные свойства на различных масштабах исследуемого процесса. В частности, при изучении структуры материалов возможно определение



**Рис. 1.** Пример самоорганизации гетерогенной системы: *a* — начальное состояние системы, *b* — образование наноструктур одного размера и формы, *c* — упорядочение наноструктур, *d* — формирование каналов связи между наноструктурами.

<sup>†</sup> E-mail: pgnv@mail.ru

особенностей ближнего, дальнего, а также среднего порядка, характерного для неупорядоченных полупроводников. Для этого необходимо исследовать структуру материала по распределению атомов в пространстве. Для объемных образцов экспериментально измерить положение атомов в пространстве пока является трудной задачей. На тонких пленках при помощи просвечивающей электронной микроскопии это возможно. Для толстых пленок структуру материала, на наш взгляд, можно оценить, исследуя структуру поверхности, так как она формируется в процессе роста. Поэтому для поиска структурных корреляций с помощью метода 2D DFA используем данные о шероховатости поверхности, полученные посредством атомно-силовой микроскопии (АСМ). При этом следует учитывать ограничения метода АСМ: размер области сканирования, радиус закругления кончика АСМ-зонда, а также шаг сканирования. Например, если имеется скан размерами  $5 \times 5$  мкм, то определить корреляции на масштабах  $> 5$  мкм невозможно. Аналогично, трудно определить корреляции на масштабах меньше радиуса закругления кончика АСМ-зонда.

Следует также отметить методику исследования процессов самоорганизации в структуре материалов, в основе которой лежат теория информации [4] и метод вложения Ф. Такенса [5]. Суть 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 материала.

В качестве объекта исследования была выбрана поверхность аморфного гидрогенизированного кремния ( $a\text{-Si:H}$ ). В процессе роста пленки  $a\text{-Si:H}$  выполняются условия, характерные для самоорганизующихся систем [6]. Все неупорядоченные материалы являются термодинамически неравновесными системами, и для них характерны процессы релаксации структуры, вызывающие деградацию параметров при воздействии и во времени. В этой связи представляет интерес исследование этих процессов.

Цель данной работы — исследование корреляций в процессах самоорганизации структуры поверхности тонких пленок аморфного гидрогенизированного кремния в зависимости от технологических режимов их получения модифицированным методом флуктуационного анализа и методом СВИ.

## 2. Методика получения и исследования экспериментальных образцов

Тонкопленочные структуры на основе аморфного гидрогенизированного кремния были изготовлены двумя различными методами. Первая группа образцов  $a\text{-Si:H}$  была получена в лаборатории Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе методом тлеющего разряда

(ТР) силаносодержащих смесей. Параметры технологических режимов получения  $a\text{-Si:H}$  выбирались по принципу оптимального сочетания скорости осаждения и мощности разряда. Частота возбуждающего генератора составляла 13.56 МГц, мощность поддерживалась на уровне 200 Вт, в качестве подаваемого газа использовалась смесь силана и водорода (10%  $\text{SiH}_4 + 90\% \text{H}_2$ ). На начальной стадии роста природа подложки и ее шероховатость оказывают значительное влияние на формирование структуры пленки. Поэтому времена осаждения ( $t_{\text{dep}}$ ) пленки  $a\text{-Si:H}$  на подложку были выбраны следующие: 2,5, 5 ч для достижения толщин 1,5, 3 мкм соответственно. Температура подложки  $T_{\text{sub}}$  оказывает существенное влияние на формирование микроструктуры  $a\text{-Si:H}$ . Низкая (порядка комнатной) температура стимулирует образование неоднородной структуры пленки; при температуре выше  $150^\circ\text{C}$  структура более однородна [7]. В этой связи при получении образцов  $a\text{-Si:H}$  методом ТР температура подложки варьировалась от 170 до  $230^\circ\text{C}$ .

Вторая группа образцов была получена в лаборатории Университета прикладных наук (Hochschule Mittweida, Германия) методом импульсного лазерного напыления (pulsed laser deposition, PLD). При этом использовался фемтосекундный КгF-лазер с длиной волны излучения 248 нм. Сфокусированный лазерный пучок попадал на мишень из чистого кремния, далее испаряемый материал осаждался на подложку, температура которой могла варьироваться с помощью нагревательного элемента. Воздух из рабочей камеры откачивался до уровня остаточного давления  $10^{-3} - 10^{-4}$  Па, далее подавался водород, давление которого ( $P_{\text{H}_2}$ ) поддерживалось на уровне от 1 до 25 Па.

При использовании технологии PLD для получения пленок  $a\text{-Si:H}$  интерес представляет влияние на структурообразование следующих технологических параметров: температуры подложки, плотности энергии лазерного излучения, времени осаждения. Поэтому при получении образцов температура подложки  $T_{\text{sub}}$  менялась от 100 до  $500^\circ\text{C}$ , плотность энергии лазерного излучения  $H$  — от 7.5 до  $11.9 \text{ Дж/см}^2$ , время осаждения  $t_{\text{dep}}$  — от 40 с до 31 мин, частота повторения импульсов была выбрана  $f = 10$  и 20 Гц.

С целью характеристики структурных особенностей и дальнейшей диагностики корреляционных свойств структуры поверхности экспериментальных образцов методом 2D DFA была исследована морфология поверхности зондовыми методами. Сначала поверхность была исследована с помощью растровой электронной микроскопии (РЭМ) на больших масштабах с целью определения областей для дальнейшего исследования их на меньших масштабах с помощью АСМ. АСМ-изображения поверхности образцов из первой группы были получены с помощью атомно-силового микроскопа NTegra Aura в полуконтактном режиме. Радиус закругления кончика АСМ-зонда составлял  $\sim 15$  нм, размеры сканов —  $5 \times 5$  мкм,  $512 \times 512$  точек. Пример АСМ-скана для

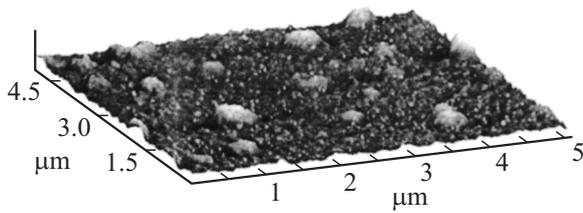


Рис. 2. АСМ-изображение поверхности образца 2  $a$ -Si:H, полученного методом ТР.

образца 2  $a$ -Si:H, полученного методом ТР, показан на рис. 2. РЭМ-изображения поверхности этих образцов были получены с помощью растрового электронного микроскопа QUANTA 600. Использовался детектор вторичных электронов с латеральным разрешением до 3.5 нм, съемка изображений проводилась в режиме низкого вакуума (30–40 Па).

АСМ-сканы поверхности образцов из второй группы были получены с помощью атомно-силового микроскопа SolverProb в полуконтактном режиме, размеры их составляли  $5 \times 5$  мкм,  $512 \times 512$  пикселей. РЭМ-изображения поверхности были получены с помощью растровых электронных микроскопов JEOL JSM-6600F, в режиме высокого вакуума, и JEOLJSM-6610LV, в режиме низкого вакуума.

### 3. Экспериментальные результаты и их обсуждение

Полученные АСМ-сканы использовались для исследования структуры поверхности методом 2D DFA. Метод 2D DFA был реализован в пакете прикладных программ MathLab. С использованием данных по шероховатости поверхности пленок  $a$ -Si:H, полученных методом АСМ, строилась зависимость флуктуационной функции от масштаба,  $F(s)$ , в логарифмическом масштабе. По тангенсу угла наклона флуктуационной функции рассчитывался скейлинговый показатель, характеризующий тип корреляций в структуре материалов. Для неупорядоченных материалов характерно наличие немонофрактальности, т.е. существование нескольких типов корреляций в структуре. При графическом построении флуктуационной функции от масштаба это выражается в виде кривой с несколькими перегибами. При этом основная задача заключается в определении корреляционных векторов по этим перегибам, т.е. периодов гармонических составляющих в структуре  $a$ -Si:H. В [3] показано, что наличие перегибов на зависимости флуктуационной функции от масштаба свидетельствует о периодичности исследуемых структур. При этом чем сложнее структура материала, тем больше фиксируется корреляционных векторов.

Результаты исследования методом 2D DFA корреляционных свойств структуры поверхности экспериментальных образцов  $a$ -Si:H, полученных методом ТР, представлены на рис. 3. На кривых 2D DFA четко заметен

перегиб, подтверждающий, что в структуре поверхности исследованных образцов присутствует гармоническая составляющая. В предыдущих работах [2,3] нами было показано, что для идеальных периодических сигналов и поверхностей значение скейлингового показателя равно 2, а при достижении масштаба, равного периоду гармонической составляющей, переходит в 0 [3]. Для исследованных пленок  $a$ -Si:H значения скейлингового показателя до перегиба ( $\alpha_1$ ) находятся в диапазоне 1.7–1.8, а после перегиба ( $\alpha_2$ ) — в диапазоне 0.7–1.4 (табл. 1). Полученные данные показывают, что структура поверхности пленок  $a$ -Si:H, полученных методом ТР, представляет собой периодическую составляющую, на которую наложены шумовые составляющие. Величина  $\alpha_1$  говорит о том, что в структуре исследованных материалов на гармоническую составляющую наложен броуновский шум со скейлинговым показателем  $\alpha = 1.5$  [2,3], т.е. скейлинговые показатели, равные 2 и 1.5, усредняются и в итоге получается  $\alpha_1 = 1.7$ –1.8. Величина  $\alpha_2 = 0.7$ –1.4 говорит о том, что в структуре присутствует несколько шумовых составляющих (белый шум, фликкер-шум, броуновский шум).

Далее с учетом того, что размер скана 5 мкм соответствует 512 точкам, по масштабу перегибов на кривых 2D DFA были вычислены длины векторов корреляций  $R$  (табл. 1). Длина наименьшего вектора корреляций (180 нм) соответствует образцу, полученному при  $T_{\text{sub}} = 170^\circ\text{C}$  и  $t_{\text{dep}} = 5$  ч, наибольшего (620 нм) — образцу, полученному при  $T_{\text{sub}} = 220^\circ\text{C}$  и  $t_{\text{dep}} = 5$  ч.

Исследование методом СВИ структуры поверхности образцов  $a$ -Si:H, полученных методом ТР, показало, что величины СВИ попадают в категорию критериев степени порядка, соответствующую хаотической структуре поверхности [4]: минимальные значения  $\text{СВИ}_{\text{min}} < 0.01$ , максимальные  $\text{СВИ}_{\text{max}} < 0.1$ , средние  $\text{СВИ}_{\text{avr}} < 0.03$  (табл. 1). Было выявлено, что для группы образцов, при

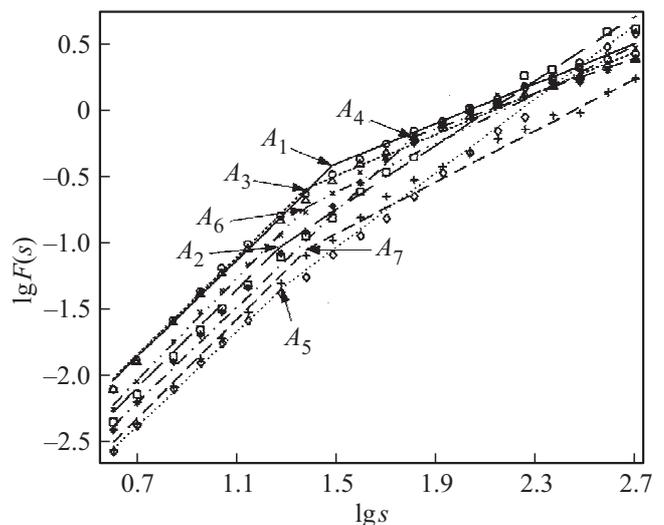


Рис. 3. Кривые 2D DFA для АСМ-изображений поверхностей образцов  $a$ -Si:H, полученных методом ТР.  $A_1$ – $A_7$  соответствуют образцам 1–7 (см. табл. 1).

**Таблица 1.** Технологические параметры получения пленок  $a$ -Si:H методом TR и характеристики структуры их поверхности

№ образца	Тип подложки	$T_{\text{sub}}, ^\circ\text{C}$	$t_{\text{dep}}, \text{ч}$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$R, \text{нм}$	$\text{СВИ}_{\text{авт}}$
1	КЭФ-2	220	5	1.83	0.79	300	0.004
2	КЭФ-2	170	5	1.71	1.21	180	0.009
3	КЭФ-2	230	2.5	1.88	0.77	260	0.002
4	ЭКДБ-0.03	220	5	1.75	0.67	620	0.006
5	ЭКДБ-0.03	230	2.5	1.71	1.43	190	0.014
6	ЭКЭС-0.01	170	5	1.75	0.92	240	0.005
7	ЭКЭС-0.01	230	2.5	1.88	0.96	270	0.004

*Примечание.* КЭФ — кремний электронный, легированный фосфором; ЭКДБ — эпитаксиальный кремний, дырочный, легированный бором; ЭКЭС — эпитаксиальный кремний, электронный, легированный сурьмой.

**Таблица 2.** Технологические параметры получения пленок  $a$ -Si:H методом PLD и характеристики структуры их поверхности

№ образца	Тип подложки	$T_{\text{sub}}, ^\circ\text{C}$	$f, \text{Гц}$	$P_{\text{H}_2}, \text{Па}$	$H, \text{Дж/см}^2$	$t_{\text{dep}}$	$\alpha_1$	$R, \text{нм}$	$\text{СВИ}_{\text{авт}}$
1	Si	100	10	10	8.8	7 мин	1.63	109	0.048
2	Si	200	10	10	8.8	7 мин	1.5	154	0.112
3	Si	300	10	10	11.8	9 мин	0.75	257	0.169
4	Si	400	10	10	11.9	10 мин	1.71	308	0.176
5	Si	500	10	10	11.9	7 мин	1.25	389	0.027
6	Ситалл	200	10	10	11.8	7 мин	1.23	234	0.017
8	Si	200	10	10	8.3	7 мин	1.58	223	0.012
9	Si	200	10	10	7.7	40 с	0.95	153	0.041
10	Si	200	10	10	7.7	4 мин	1.1	976	0.010
11	Si	200	10	10	7.7	12 мин 20 с	0.85	123	0.029
13	Si	200	10	10	7.7	31 мин	1.13	224	0.170
15	Si	100	10	25	8.6	7 мин	1.24	191	0.107
16	Si	100	10	1	8.6	7 мин	1.13	151	0.260

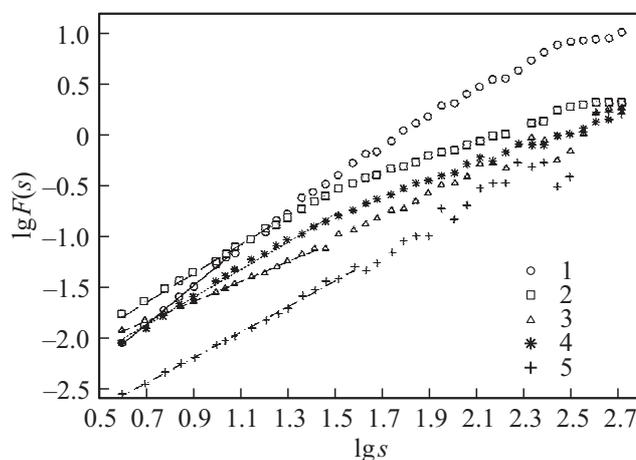
*Примечание.* Si — кремний, легированный P.

получении которых варьировалась температура подложки, СВИ возрастает (примерно в 2 раза) с увеличением температуры от 170 до 230 $^\circ\text{C}$ , что свидетельствует об увеличении степени упорядоченности.

При рассмотрении образцов  $a$ -Si:H, полученных методом PLD (табл. 2), целесообразно разделить их на группы, при получении которых менялся один из технологических параметров: температура подложки (образцы 1–5), тип подложки (образцы 2, 6, 8), время осаждения (образцы 9, 10, 2, 11, 13), давление водорода в ростовой камере (образцы 16, 1, 15). При использовании различных подложек для изготовления пленок  $a$ -Si:H, а также при вариации давления водорода в камере существенных различий в корреляционных свойствах структуры поверхности не наблюдалось.

В табл. 2 представлены рассчитанные значения скейлинговых показателей, корреляционных векторов и СВИ для образцов  $a$ -Si:H, полученных методом PLD. В общем виде результаты 2D DFA представляли собой кривые с несколькими перегибами. Это означает, что в структуре поверхности образцов  $a$ -Si:H, полученных методом PLD, присутствует несколько гармонических составляющих с разным периодом. Полученные экспериментальные результаты позволяют выделить только первый перегиб, а остальные составляющие определить

сложно. Значения  $d_1$  менялись от 0.75 до 1.71, что соответствует, помимо наличия гармонических составляющих, присутствию нескольких шумовых составляющих (белый шум, фликкер-шум, броуновский шум). Длины корреляционных векторов находились в диапазоне 100–400 нм. Это характерно для среднего порядка структуры  $a$ -Si:H.

**Рис. 4.** Кривые 2D DFA для образцов  $a$ -Si:H 1–5 (табл. 2), полученных методом PLD.

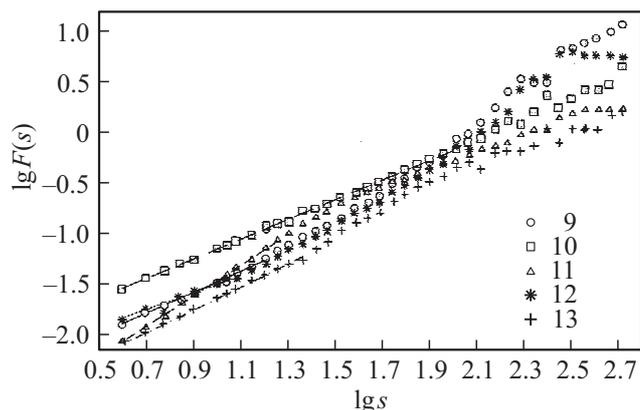


Рис. 5. Кривые 2D DFA для образцов  $a$ -Si:H 9, 10, 11, 13 (табл. 2), полученных методом PLD.

Анализ зависимости корреляционных свойств структуры поверхности от параметров технологических режимов получения образцов  $a$ -Si:H методом PLD показал, что при повышении температуры подложки наблюдалось уменьшение шероховатости структуры поверхности, а на кривых 2D DFA это проявлялось в смещении точки перегиба флуктуационной функции в сторону больших масштабов, т.е. в увеличении корреляционного вектора (рис. 4).

При увеличении времени осаждения пленок  $a$ -Si:H на подложку увеличивалась шероховатость поверхности, а на кривых 2D DFA при этом точка перегиба смещалась в сторону меньших масштабов и соответственно длина корреляционного вектора уменьшалась (рис. 5).

Результаты расчета средней взаимной информации показали, что на распределении СВИ не наблюдается выраженных максимумов, значения распределены равномерно и соответствуют хаотической и слабо организованной структуре поверхности (табл. 2).

#### 4. Заключение

Исследованы корреляционные свойства структуры поверхности тонких пленок аморфного гидрогенизированного кремния методами 2D DFA и СВИ. С помощью метода 2D DFA выявлено, что все структуры имеют корреляционный вектор и представляют собой гармонические составляющие с наложением шума. Для образцов  $a$ -Si:H, полученных методом ТР, длина корреляционного вектора находится в диапазоне 180–620 нм, а для образцов  $a$ -Si:H, полученных методом PLD, — в диапазоне 100–400 нм. Методом СВИ удалось выявить в основном только хаотическую составляющую (СВИ = 0.002–0.029). Только для некоторых образцов  $a$ -Si:H, полученных методом PLD, значения СВИ соответствовали слабо организованной структуре (СВИ<sub>авт</sub> > 0.03). Также было показано, что при изменении технологических параметров получения пленок  $a$ -Si:H меняются корреляционные свойства их структуры. Наибольшее влияние на структуру материала оказы-

вает температура подложки. При увеличении температуры подложки уменьшается образование структурных неоднородностей, при этом увеличивается длина корреляционного вектора и повышается упорядоченность структуры.

Таким образом, методика, основанная на методе 2D DFA, в сочетании с методом СВИ позволяет исследовать процессы самоорганизации в любых структурах на разных масштабах. При этом в отличие от других методов можно определить конкретные значения корреляционных параметров (корреляционных векторов).

Авторы работы выражают благодарность О.И. Конькову (ФТИ им. А.Ф. Иоффе) и S. Weissmantel (University of Applied Sciences) за предоставленные образцы.

#### Список литературы

- [1] В.А. Карасев, В.В. Лучинин. *Введение в конструирование бионических наносистем* (М., Физматлит, 2011).
- [2] А.В. Алпатов, С.П. Вихров, Н.В. Гришанкина. *ФТП*, **47** (3), 340 (2013).
- [3] А.В. Алпатов, С.П. Вихров, Н.В. Гришанкина, С.М. Мурсалов. *Вестн. РГРТУ*, **4** (42), ч. 2, 12 (2012).
- [4] Т.Г. Авачева, Н.В. Бодягин, С.П. Вихров, С.М. Мурсалов. *ФТП*, **42** (5), 513 (2008).
- [5] F. Takens. *Lectures notes in mathematics* (N.Y., Springer-Verlag, 1981).
- [6] Н.В. Бодягин, С.П. Вихров, Т.Г. Ларина, С.М. Мурсалов, В.Н. Тимофеев. *Природа невоспроизводимости структуры и свойств материалов для микро- и нанoeлектроники* (Рязань, гос. радиотехн. акад., 2004).
- [7] А.А. Айвазов, Б.Г. Будаган, С.П. Вихров, А.И. Попов. *Неупорядоченные полупроводники* (М., МЭИ, 1995).

Редактор Л.В. Шаронова

#### Investigation of correlation parameters of disordered semiconductor surface structure by 2D DFA and mutual information methods

A.V. Alpatov, S.P. Vikhrov, N.V. Rybina

Ryazan State Radio Engineering University,  
390005 Ryazan, Russia

**Abstract** Self-organization processes of surface structure of amorphous hydrogenated silicon were investigated by the two-dimensional defrended fluctuation analysis (2D DFA) and the method of average mutual information according to the surface images obtained by atomic force microscopy. It was elicited that all structures have a correlation vector and represent harmonic component with overlapping noise. It was demonstrated that variation in technological parameters of  $a$ -Si:H film fabrication lead up to modification of correlation properties of the structure. Structure inhomogeneity formation decreases as substrate temperature increases, therewith the length of the correlation vector and structure ordering degree increases. It was demonstrated that methodology based on fluctuation analysis in combination with the method of average mutual information allows to investigate self-organization processes in any structures in different scales.