

УДК 621.315.592

Исследование самоорганизации неупорядоченных материалов с применением теории информации

© Т.Г. Авачева, Н.В. Бодягин, С.П. Вихров[¶], С.М. МурсаловРязанский государственный радиотехнический университет,
390005 Рязань, Россия

(Получена 13 декабря 2006 г. Принята к печати 28 сентября 2007 г.)

Предлагается методика исследования порядка в структуре неупорядоченных материалов по расчету средней взаимной информации. Описан адаптированный для исследования неупорядоченных полупроводников алгоритм вычисления средней взаимной информации по ненаправленному вектору между точками поверхности материала. Проведено комплексное тестирование методики на моделях поверхностей с различной степенью упорядоченности. Экспериментально исследованы образцы аморфных соединений кремния, полученные при различных технологических режимах.

PACS: 61.18.-j, 61.43.Dq, 61.43.-j, 68.47.Fg

1. Введение

С каждым годом в мире наращивается выпуск все более сложных устройств микро- и нанoeлектроники, разрабатываются новые технологии наноматериалов. Это в свою очередь требует более глубокого изучения процессов, происходящих как при синтезе материалов, так и при дальнейшей эволюции их структуры. Особый интерес в этом направлении вызывают процессы самоорганизации в неравновесных средах. Их изучение открывает принципиально новые возможности для адекватного моделирования строения материалов, а также для совершенствования технологий микро- и нанoeлектроники.

Структура неупорядоченных материалов формируется в сильнонеравновесных условиях с нарушением симметрии в термодинамически открытой, нелинейной системе. Все это свойства, присущие самоорганизации. Традиционные методы исследования структуры материала позволяют выявить лишь ближний и дальний порядок в структуре, однако не выявляют образование других типов порядка. Сложное строение вещества описывается без учета важнейшего качества структуры — ее целостности. При исследовании сложного поведения систем распределенной природы требуются специальные методы анализа когерентных структур.

В этой связи целью исследования стала разработка новой методики для обнаружения скрытого порядка в структуре материала, обусловленного процессами самоорганизации. Методика направлена на выявление степени отклонения структуры от двух пограничных состояний: полное упорядочение и хаос.

Ранее нами было показано [1], что закономерности процессов формирования неупорядоченных материалов можно изучать по средствам исследования их поверхности, так как распределение вещества по поверхности представляет собой „замороженный“ мгновенный снимок процессов роста. При этом необходимо отметить,

что роль поверхности как активной составляющей приборов нанoeлектроники существенна, так как в низкоразмерных системах, каковыми и являются наноструктуры, количество вещества на поверхности и объеме становится соизмеримым.

В настоящее время в научной практике при описании и исследовании структуры поверхности материалов используют параметры, характеризующие отдельные элементы, а не структуру в целом (размеры зерен, локальные характеристики шероховатости поверхности и т. д.), применяются и статистические обработки (усредненные значения шероховатости, пористость, средний размер зерен, распределение по размерам и т. д.). Такие подходы недостаточны при исследовании систем со сложной и неоднородной структурой, какими являются поверхности материалов.

Для анализа поверхности применяются также 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, так как для нерегулярных систем, в том числе и для поверхностей материалов, 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. А ведь именно корреляции в структуре являются результатом процессов самоорганизации [3]. Те же недостатки присущи и фрактальной параметризации [4].

[¶] E-mail: mel@rgtra.ryazan.ru

2. Теоретические основы методики

Предлагается методика исследования порядка в структуре поверхности неупорядоченных материалов, построенная, с одной стороны, на основном методе анализа нелинейных систем — методе вложения Такенса, с другой — на теории информации, приводящей к нелинейным представлениям о зависимости между различными частями системы. Вообще, в материалах самоорганизация представляет собой процесс спонтанного образования пространственной структуры, между удаленными частями которой возникают и поддерживаются корреляции. Поэтому используемые математические методы направлены на выявление дальнедействующих корреляций, возникновение которых и есть главный признак наличия самоорганизации в процессе синтеза материала [5].

Причем алгоритмы расчета различных инвариантов хаотической динамики, используемых в настоящее время для категоризации поведения нелинейных систем, хорошо разработаны лишь для анализа модельных данных, т.е. для случая, когда известна математическая модель динамической системы. В данной работе разрабатывалась методика именно для изучения реальных экспериментальных образцов.

Согласно методу вложения Такенса, поведение системы можно расшифровать по измерениям любой ее пространственно-временной 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. Профиль поверхности исследовался методами сканирующей туннельной микроскопии и атомной силовой микроскопии [6]. Измерения высоты профиля проводились вдоль поверхности через дискретные интервалы.

Основной характеристикой корреляций в нелинейных системах является величина средней взаимной информации (СВИ). СВИ инвариантна относительно различных технологий и позволяет оценивать влияние различных технологических факторов на структуру материала. В теории информации СВИ определяется следующим образом.

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). СВИ между произвольной парой точек A и B :

$$\forall A(x_1, y_1), B(x_2, y_2) \in D$$

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

где $P_A(z_1)$, $P_B(z_2)$ — 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.

Как видно из формулы, СВИ определяет именно корреляцию между величинами. Так, если значение z_1 высоты профиля в некоей точке A не имеет корреляции со значением z_2 высоты профиля поверхности в точке B , то из теории вероятностей $P_{AB} = P_A \cdot P_B$, а средняя взаимная информация принимает значение, равное нулю, т.е. наше знание о z_2 при известном значении z_1 равно нулю. Если же z_1 и z_2 коррелируют, то, как следует из теории информации, равенство не соблюдается и СВИ $I_{AB}(z_1, z_2) \neq 0$.

Очевидно, что СВИ, подсчитанная для двух конкретных точек, не имеет физического смысла — точки поверхности в них имеют вполне конкретные координаты z . Ясный физический смысл имеет лишь распределение преобразованной функции СВИ (назовем ее „сверткой“), которая рассчитана для отображений D^2 в пространство параметра свертки, при этом свертка может производиться по разным параметрам. Общая формула имеет вид

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

Здесь для каждого значения параметра s интегрирование ведется по всем парам точек, которые данная свертка отображает в новое пространство S_D , I — определенная в (1) средняя взаимная информация между точками, характеризующимися параметром s , а $M_{SD}(s)$ — мера нового пространства S_D , отображаемого выбранной сверткой по параметру s , в пространстве D^2 , 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).

Алгоритм вычисления СВИ был впервые адаптирован для исследования структуры поверхности материала, ранее проводили обработку лишь одномерных последовательностей данных.

Исходными данными для алгоритма является распределение высот профиля поверхности материала, полученное посредством атомно-силовой микроскопии. Расчет проводился для СВИ по ненаправленному вектору между двумя точками. График 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. Для более детального анализа изучаемых поверхностей также рассматривалась автокорреляционная функция (АКФ). В программной реализации методики для каждого вектора значение СВИ и АКФ отображалось яркостью соответствующей точки на распределении этих значений. При этом X и Y соответствуют пространственным координатам поверхности образца или модельной поверхности и выражаются в относительных единицах в сравнении с $1/4$ соответствующего размера образца.

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 АКФ и СВИ. Это позволяет оценивать не только качественно, но и количественно рассчитанные характеристики.

Кроме общего поля СВИ, рассчитывалась СВИ для четырех квадрантов исходного изображения и отображалась в масштабе 1 : 2. Это позволяет выявить как особенности СВИ, свойственные всему изображению, так и те, которые проявляются лишь в одном квадранте и являются следствием просто неоднородности материала или дефекта исходного изображения. Для оценки влияния сингулярности на распределение СВИ в программе предусмотрен вывод СВИ со скрытой сингулярностью, так как в некоторых случаях именно сингулярность не позволяет оценить особенности СВИ на больших расстояниях (из-за равномерности масштаба). Также проведена визуализация результатов исследования в 3D формате для более детального изучения объектов.

Для комплексного анализа сложной структуры материала было построено вложение Такенса в трехмерное пространство. Это позволит в дальнейшем качественно определить число управляющих параметров системы.

3. Тестирование методики

Для тестирования методики расчета СВИ в качестве случайных поверхностей были разработаны модели белого шума и „вязкой пластины“. Результаты анализа полностью соответствуют отсутствию корреляций в структуре. Как и предполагалось, на поле СВИ нет явных максимумов (табл. 1). Значения малы и распределены равномерно. При этом АКФ быстро спадает по расстоянию до среднего значения, которое очень близко к нулю, а вложение Такенса заполняет весь фазовый объем равномерно.

В качестве модели упорядоченной структуры сформирована синусоидальная решетка, которая имитирует идеальную кристаллическую решетку полупроводника. Методика выявляет полностью упорядоченную периодическую структуру. Полученное распределение СВИ имеет строго периодическую структуру, полностью соответствующую исходному сигналу. Векторы, соответствующие пикам, выявляют взаимное расположение характерных структур. По АКФ, которая применяется в вейвлет-анализе для этих целей, определить его точно не удастся. При этом, абстрагируясь от пиков, можно заметить, что в целом изображение довольно гладкое, т.е. график СВИ существенно плоский, взаимная информация всех пар точек велика. Это также отражает сущность СВИ, так как вся тестовая поверхность описана одной формулой, поэтому СВИ слабо зависит от вектора, кроме

векторов, характеризующих максимумы и минимумы исходного сигнала, значения которых редки статистически.

Аналогичные результаты получены и для „решетки из горок“. Данная поверхность является утрированным изображением кластеров на поверхностях аморфных пленок. Однако если для синусоидальной решетки максимальное значение СВИ (нормированное по энтропии „белого шума“) I_{\max} стремится к единице, то для второй решетки — снижается до 0.61 из-за минимумов на поле СВИ, которые обусловлены взаимным расположением полусфер и плоских участков, т.е. наличием двух различных типов структур. Что касается вложения Такенса, то оно имеет интересную структуру, представленную в табл. 1.

Для поиска особенностей структуры, обусловленных динамикой системы в процессе ее формирования, была предложена тестовая поверхность, названная „переносом“, которая по внешнему виду не отличается от хаотической, однако в ней заложены динамические процессы. Она формировалась с помощью многократного сложения высот хаотической поверхности с самими собой, но сдвинутыми на определенный вектор. Как видно из рисунка, результаты расчета СВИ выявляют такие особенности этой модели: явный, крупный пик на распределении СВИ соответствует вектору, на который производился перенос (табл. 1). Причем АКФ не имеет никаких пиков, как для предыдущих хаотических поверхностей.

Проведенное комплексное тестирование программного обеспечения позволяет говорить о верном ее функционировании, хорошей точности и информативности.

4. Экспериментальные результаты

С целью выявления наличия порядка в структуре поверхности исследовались образцы аморфных соединений кремния, полученные при различных технологических режимах. В каждой серии проводился анализ пленок, осажденных на два вида подложек: стекло и проводящий слой ПТО. Изображения профиля поверхности пленочных структур были получены с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) „Смена“.

Для всех образцов можно констатировать, что АКФ имеет характер, сходный с тестовыми хаотическими поверхностями. Типичный вид результатов измерений для образцов аморфных соединений кремния приведен в табл. 2. Видно, что для экспериментальных образцов СВИ довольно гладкая функция без явных максимумов. При сравнении с результатами для модельных поверхностей был сделан вывод, что среднее значение СВИ соответствует сильно разупорядоченным поверхностям.

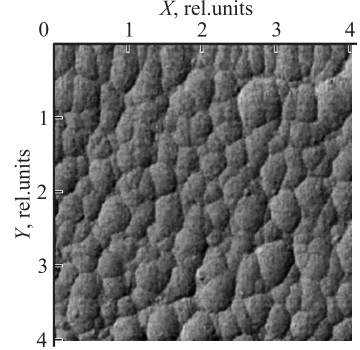
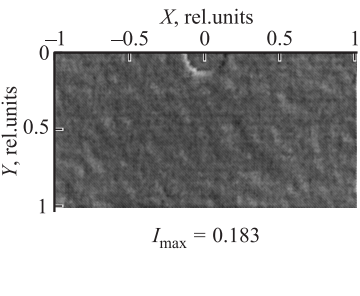
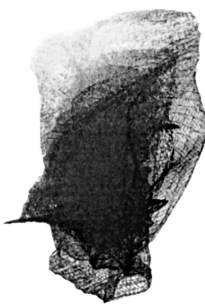
Однако при сравнительном анализе результатов по сериям образцов, полученных в различных технологических условиях, выявляются следующие зависимости.

1. С увеличением температуры подложки (с пропорциональным увеличением давления в камере) для сло-

Таблица 1. Тестирование методики на моделях поверхностей материалов

Название модели	Результаты моделирования		
	Изображение исходной тестовой поверхности	Распределение средней взаимной информации	Вложение Такенса в трехмерное пространство
„Белый шум“			
„Шум с переносом“			
„Синусоидальная решетка“			
„Кластеры“			

Таблица 2. Типичные результаты исследования поверхности образцов аморфных соединений кремния

Исследуемый объект	Результаты исследования		
	Изображение исходной тестовой поверхности	Распределение средней взаимной информации	Вложение Такенса в трехмерное пространство
Образец аморфного гидрогенизированного кремния α -Si:H			

ев аморфного гидрогенизированного кремния (α -Si:H), нанесенных на проводящий слой ИТО и на стеклянную подложку, наблюдается уменьшение СВИ. Для данной серии образцов значения типичных параметров структуры, таких как высота и диаметр островков и шероховатость поверхности, практически не меняются [2], однако изменение СВИ говорит о том, что структуры все же различны. Об этом же свидетельствует и изменение оптической ширины запрещенной зоны и плотности состояний.

2. Численные значения СВИ на порядок выше для образцов на стекле, а изменение температуры подложки на них сказывается незначительно. Таким образом, на стеклянной подложке формируется более упорядоченная структура аморфного материала.

3. При увеличении времени осаждения пленки на подложку с проводящим слоем ИТО наблюдается рост СВИ. При этом разница максимального и минимального значения высоты профиля снижается. Это означает, что при увеличении толщины пленки ослабляется степень влияния стеклянной подложки, формируется более равномерная упорядоченная пленка α -Si:H. При этом на картине СВИ проявляется более развитый рельеф. Это свидетельствует о возникновении дальних корреляций в поверхности образцов.

4. Для образцов α -Si_kC_{1-k}:H с увеличением процентного содержания метана в рабочей камере динамика изменения СВИ для обеих групп одинакова, но не имеет определенного знака.

5. Заключение

Для исследования пространственно распределенных систем, полученных в результате процессов самоорганизации, необходимо применять специальные методики и характеристики, учитывающие коллективные свойства этих объектов.

Разработанная методика исследования самоорганизации в неупорядоченных материалах по расчету двумерного распределения средней взаимной информации (СВИ) выявляет дальнедействующие корреляции в структуре поверхности, которые свидетельствуют о присутствии в ней упорядоченности. Методика позволяет также определять размеры характерных структур и их взаимное расположение. Расчет СВИ дает адекватные оценки динамики систем разного типа, позволяет не только качественно, но и количественно различать системы, полностью периодические, содержащие динамические особенности или представляющие собой хаотичный случайный сигнал.

Тестирование методики показало, что в отличие от существующих она оказывается полезной при решении задачи отыскания в структуре материала порядка, обусловленного динамическими особенностями процесса его получения. При этом возможно определение степени отклонения структуры от идеального кристалла и полностью разупорядоченной структуры.

Однако для более точной оценки типа динамики необходимо комплексный анализ системы роста материала, включающий также фрактальный анализ вложения Такенса, расчет фрактальной размерности и других инвариантов нелинейной динамики. И только на основе знания типа динамики должно осуществляться согласованное с внутренними динамическими процессами вещества управление нелинейной системой синтеза материала. Это позволит не только эффективно управлять процессом роста неупорядоченных материалов, но и программировать синтез материалов для микро- и нанoeлектроники с новыми уникальными свойствами. Дальнейшие работы в данном направлении откроют реальные перспективы для существенного увеличения эффективности технологий полупроводниковых материалов.

Список литературы

- [1] С.П. Вихров, Н.В. Бодягин, Т.Г. Ларина, С.М. Мурсалов. ФТП, **39** (8), 953 (2005).
- [2] Н.В. Бодягин, С.П. Вихров, Т.Г. Ларина, С.М. Мурсалов. *Тез. докл. V Межд. конф. „Аморфные и микрокристаллические полупроводники (АМП)“* (СПб., 2006) с. 163.
- [3] 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, РГРТА, 2004).
- [4] Г.В. Востовский, А.Г. Колмаков, И.Ж. Бунин. *Введение в мультифрактальную параметризацию структур материалов* (М.-Ижевск, РХД, 2001).
- [5] А.В. Шилейко, В.Ф. Кочнев, Ф.Ф. Химушин. *Введение в информационную теорию систем* (М., Радио и связь, 1985).
- [6] И.Г. Уточкин, А.П. Авачев, Н.В. Вишняков, В.Г. Мишустин, А.А. Попов. *Тез. докл. IV Межд. конф. „Аморфные и микрокристаллические полупроводники (АМП)“* (СПб., 2004) с. 323.

Редактор Л.В. Беляков

Research of the Self-Organization in Disordered Materials with Application of the Information Theory

T.G. Avacheva, N.V. Bodyagin, S.P. Vikhrov, S.M. Mursalov

Ryazan State Radioengineering University
390005 Ryazan, Russia

Abstract The order research procedure in structure of disordered materials by account of the average mutual information is offered. The calculation algorithm of the average mutual information on the undirected vector between points of a material surface is described adapted for research of the disordered semiconductors. The complex testing of a procedure on surface models with a various order degree is carried out. Samples of amorphous silicon compounds obtained at various technological modes are experimentally investigated.