

**Москвін П.П.**

д.ф.-м.н., проф., зав. каф. каф. фізики та вищої математики  
Житомирського державного технологічного університету

**Очич В.М.**

старший викладач каф. фізики та вищої математики  
Житомирського державного технологічного університету.

## **ЗАСТОСУВАННЯ МУЛЬТИФРАКТАЛЬНОГО АНАЛІЗУ ДЛЯ ОПИСУ НАНОФОРМ НА ПОВЕРХНІ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ПЛІВОК.**

Структурна досконалість шарів на мікро- та макрорівнях багато в чому визначає ефективність функціонування оптоелектронних приладів. Умови отримання багатьох сучасних приладів супроводжуються процесами самоорганізації на нано- та мікрорівнях. В результаті виникає складна внутрішня структура, властивості якої визначаються не тільки щільністю точкових і лінійних дефектів, але, більшою мірою, характером зв'язку частин такої структури в єдине ціле. У таких структурах традиційні методи опису їх стану не відображають повною мірою їх особливі структурні властивості, що нерідко призводить до відсутності прямої кореляції між ними і оптичними та електричними властивостями всієї системи. В якості перспективного підходу при термодинамічному аналізі системи, де непланарність межі поділу істотно впливає на енергетичний стан фаз, можна визнати врахування в аналізі фрактальної геометрії поверхонь розділу (фрактальність межі поділу).

В даній роботі засоби фрактальної геометрії будуть застосовані для опису поверхневого стану шарів гетероструктур на основі напівпровідників  $A^2B^6$ . В якості матеріалів для досліджень будуть використані плівки системи  $ZnCdTe$ , що синтезовані в роботі на підкладках із кремнію. Тверді розчини  $Zn_xCd_{1-x}Te$  видаються перспективними для використання в якості активного середовища датчиків рентгенівського випромінювання і м'якої компоненти проникаючої радіації, а також можливим елементом композитних структур нелінійної оптики і сучасних сонячних батарей.

Для кількісного опису стану поверхні плівок, одержаних різноманітними технологічними способами, та виконання порівняльного аналізу їх кристалографічної якості застосовано мультифрактальний аналіз (МФА).

Принциповим моментом у застосуванні МФА для опису стану поверхні плівки є конкретний вибір такого фізичного параметру, який найбільш повно її характеризує і підлягає фрактальній параметризації. Серед можливих геометричних параметрів просторових форм, які утворюються на поверхні плівки, та знаходження якого відповідає меті розрахунку величини поверхневої енергії системи, була вибрана площа поверхні плівки.

Вхідна інформація для реалізації МФА поверхні плівки була одержана з її AFM зображення. Генерування міри кожної частки простору здійснювалось у відповідності з методом огрубіння розбивань.

Подальша реалізація методу огрубіння розбивань під час пошуку параметрів МФ спектрів здійснювалась за типовою для цього методу аналізу процедурою. Розроблене програмне забезпечення застосовується для аналізу параметрів МФ розподілу площі у реальних полікристалічних структурах плівок систем  $Zn-Cd-Te$ , осаджених на підкладку з  $Si$  з використанням різноманітних режимів синтезу.

Температурні умови функціонування джерела вхідного матеріалу, а також температура на підкладці та поверхні реактору було знайдено шляхом проведення попередніх експериментів. Аналіз таких результатів довів, що однорідна плівка на підкладці формується при температурі джерела 380-400°C, температура на поверхні стінки 450°C – 500°C, а температура підкладки була обрана параметром досліджень, що змінюється. Ця величина змінювалась в інтервалі от 100 до 350°C. При використанні таких температурних режимів синтезу та при використанні циклічного методу наплення швидкість росту шарів твердого розчину  $Cd_{1-x}Zn_xTe$  знаходилась на рівні 8 нм/хв. Товщину осадженого шару задавали часом синтезу. Вказаний параметр змінювався від 1 до 120 хв.

Вибір для експериментального дослідження гетерокомпозицій, які мають значні невідповідності в за періодами кристалічних ґраток між шаром, що синтезується та підкладкою, забезпечував мінімальний вплив на структуру поверхні твердої фази когерентного спряження шару, що зростає з підкладкою. Остання обставина знайшла б своє відображення в збереженні симетрії періодичного поля кристалічної ґратки підкладки та внесло б суттєві зміни в картину формування фрактальної симетрії, що типова для поверхні самої плівки.

Морфологію структур досліджували методами атомно-силової мікроскопії (Nanoscope Dimension 3000, фірма Digital Instruments, USA) в режимі періодичного контакту.

Відповідно МФ аналізу на основі даних AFM зображень формувалися статистичні суми. Відомо, якщо в фізичній системі, що аналізується, спостерігається фрактальна симетрія, то залежність статистичної суми від лінійного розміру крамнички, на яку розбито простір, в логарифмічних масштабах

повинна групуватися вздовж прямої лінії. Розрахунки параметрів лінійної регресії здійснювалося методом найменших квадратів для кожного ступеня змінної величини.

Дані за коефіцієнтами регресії було покладено на основу при розрахунках всіх функцій, що формують мультифрактальний спектр системи. Всі необхідні функції розраховувалися числовими методами.

Математичне забезпечення та надана методика розрахунків за даними AFM зображень дозволила розробити відповідний програмний продукт, який пройшов тестування при розрахунках МФ характеристик для цілого ряду відомих фрактальних систем. Результати розрахунків таких спектрів довели свою практичну відповідність своїм теоретичними аналогам. При цьому відповідність досягалося на рівні до 4 знаків за числами Реньї.

Описаний вище підхід дозволив виконати розрахунки МФ спектрів і параметрів для одержаних зображень. В якості найбільш інформативних МФ параметрів, які описують структуру поверхні були вибрані число Реньї  $D_0$  і параметр впорядкованості  $\Delta_{q \rightarrow \infty} = D_1 - D_{q \rightarrow \infty}$  (ступінь порушення фрактальної симетрії).

Виконані розрахунки характеристичних функцій МФА показали, що вони відповідають своїм канонічним формам. Це означає, що послідовність чисел Реньї є спадною, а функція  $f(\alpha)$  має характерний максимум.

Необхідно також зауважити, що величини узагальнених чисел Реньї  $D_0$ ,  $D_1$  і  $D_2$  по величині перевищують «два». Тому такий результат відповідає поставленій задачі щодо опису розмірності поверхні, яка є непланарною на нанорівні. Достатньо високі показники кореляційних коефіцієнтів при вирівнюванні вхідних даних методом найменших квадратів дозволяють стверджувати, що саме МФ, а не монофрактальний спектр є типовим для досліджених поверхонь і саме МФ параметри системи повинні використовуватися для повного опису стану поверхні плівки.

Одержані кількісні дані про МФ параметри поверхні дозволяють здійснити пошук їх взаємозв'язків з умовами синтезу плівок  $Zn_xCd_{1-x}Te$ . Сукупність таких взаємозв'язків між числом Реньї  $D_0$ , параметром впорядкованості  $\Delta$  та температурою були одержані в роботі для постійного часу процесу, а також для умов, коли час процесу залишався постійним, а температура підкладки була змінною величиною. Зміна умов проведення процесу синтезу, звичайно відобразилася у величинах МФ параметрів. Наявність стійких взаємозв'язків дозволяє стверджувати, що саме величини МФ параметрів кількісно відслідкували та описали відмінності в структурі поверхонь між зразками одного і того ж складу, однак вирощених у різних умовах.

Аналіз результатів розрахунків показав, що числа Реньї зменшуються відповідно до зниження температури на підкладці при синтезі плівок твердого розчину  $Zn_xCd_{1-x}Te$ . Вказана тенденція, яку спостерігаємо у поведінці системи, відображає той факт, що із збільшенням температури підкладки розмірність полікристалічної поверхні плівки (число  $D_0$ ) зменшується. Останнє описує еволюцію термодинамічного стану системи у напрямку формування плоскої поверхні. Значимо, що саме утворення плоскої поверхні є найменш енергоємним процесом, відповідно, найбільш вигідним у термодинамічному сенсі. Одержані дані про залежність параметра впорядкованості  $\Delta$  також показують стійку тенденцію системи до зменшення ширини свого МФ спектру відповідно збільшенню температури підкладки в процесі синтезу шарів.

За результатами роботи можна зробити наступні висновки:

1. Розраховані та проаналізовані МФ спектри від площі поверхні геометричних форм, які формуються на поверхні твердих розчинів із  $Zn_xCd_{1-x}Te$  - підкладка з кремнію.
2. Знайдені взаємозв'язки параметрів МФ спектрів для площі поверхні плівок вказаної напівпровідникової системи з технологічними умовами їх одержання.
3. Показано, що числа Реньї і параметри розупорядкованості перебувають у тісній кореляції з технологічними умовами проведення процесу синтезу матеріалу.

МОСКВІН Павло Петрович – д.ф.-м.н., проф., зав. каф. каф. фізики та вищої математики Житомирського державного технологічного університету.

Наукові інтереси – фізика напівпровідників, напівпровідникові кристали та плівки, технологія їх отримання, термодинаміка багатокомпонентних напівпровідникових фаз.

т: (0412) 374617, E-mail: [moskvin@us.ztu.edu.ua](mailto:moskvin@us.ztu.edu.ua)

ОЧИЧ Віра Михайлівна - старший викладач каф. фізики та вищої математики Житомирського державного технологічного університету.

Наукові інтереси – математичний аналіз, фрактальна геометрія, мультифрактальний аналіз, напівпровідникові наноструктури.

т: (0412) 374617, E-mail: [ochychvm@ukr.net](mailto:ochychvm@ukr.net)