

П.П. Москвін, д.ф.-м.н., проф.
В.Б. Крижанівський, к.ф.-м.н., доц.
С.А. Омелянчук, інж.

Житомирський державний технологічний університет

Л.В. Рашковецький, н.с.

П.М. Литвин, с.н.с.

М.В. Вуйчик, с.н.с.

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Е. Лашкарьова НАН України

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МУЛЬТИФРАКТАЛЬНИХ СТАНІВ ПОВЕРХНІ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУР $ZnCdTe$ – КРЕМНІЄВА ПІДКЛАДКА

Виконано моделювання мультифрактальних станів поверхневого рельєфу напівпровідникових структур твердий розчин $ZnCdTe$ – підкладка із кремнію. Як вхідні дані для аналізу використані дані атомно-силової мікроскопії (AFM – спектроскопії). Цифрове зображення поверхні оброблено методами мультифрактального аналізу. Запропонована обчислювальна методика обробки просторових даних за площею поверхні шарів. Розраховано мультифрактальні спектри поверхні шарів вказаної системи твердих розчинів. Знайдені кореляційні залежності між параметрами мультифрактального спектра та технологічними умовами синтезу шарів.

Вступ. Постановка проблеми. В роботі [1] нами було показано, що застосування мультифрактального аналізу (МФА) для опису стану поверхні напівпровідникових структур, сформованих із рідкої фази, дозволяє не тільки отримати кількісну інформацію про стан поверхні, але й відкриває перспективи коректних розрахунків поверхневої енергії плівок. У роботі [1] для виконання розрахунків була використана обчислювальна програма для МФА, що розроблена В.Г. Встовським в лабораторії міцності металевих матеріалів ІМЕТ РАН [2]. Раніше вона була призначена для аналізу властивостей поверхні металів. Досвід її застосування виявив ряд недоліків такого методу розрахунків. Так ця програма аналізує лише стан заздалегідь заданого плоского перерізу, який розташовано поблизу поверхні плівки. Істотно, що такий метод не враховує тривимірний розподіл фрактальних форм на поверхні шарів. Тому отримані величини хаусдорфів розмірності не перевищують розмірність плоскої поверхні, тобто двох. Такий результат суперечить фізичному змісту задачі, коли розвинута фрактальна поверхня повинна мати розмірність поверхні більше двох. Така ситуація ставить задачу розробки нових обчислювальних методів, які будуть враховувати розподіл самоподібних фрактальних структур на поверхні шарів у тривимірному наближенні. Розроблена обчислювальна програма була застосована та протестована при розрахунках мультифрактальних спектрів поверхневого стану шарів твердого розчину системи $ZnCdTe$, що осаджені методом «гарячої стінки» на кремнієвих підкладках.

Теоретичні положення МФА. Основні положення МФА достатньо широко викладені в літературі [3–4] та представлені нами в [1], при застосуванні цього методу обробки даних у обчислювальній програмі з [2]. В той же час основні положення цього аналізу слід навести в даній роботі. Це необхідно для розуміння результатів МФА, що будуть обговорюватися в роботі.

Згідно з МФА, об'єкт, що досліджується, моделюється системою взаємопроникних множин, кожна з яких має свою розмірність. Пошук параметрів мультифрактального стану відповідно [3–4] здійснюється за рахунок мінімізації такого функціоналу:

$$\chi(q) = \int d\alpha \rho(\alpha) l^{-f(\alpha)} l^{q\alpha}. \quad (1)$$

Цей функціонал побудовано з таких міркувань. Компонента виразу, що інтегрується $d\alpha \rho(\alpha) l^{-f(\alpha)}$, виконує операцію розрахунку імовірності того, що розмірність множини, яка досліджується, буде належати інтервалу від α до $\alpha + d\alpha$. В такому випадку $f(\alpha)$ слід розглядати як спектр можливих фрактальних розмірностей, α – параметр степеневого масштабу (скейлінгу), а $\rho(\alpha)$ – щільність імовірності відповідного розподілу. Наступна компонента виразу $l^{q\alpha}$ відповідає параметру системи, що усереднюється інтегруванням. В наведених виразах q – показник степеня в дискретній статистичній сумі

$Z(q, K) = \sum_{i=1}^K \mu_i^q$, а μ_i – відносна міра фізичного параметра об'єкта, що досліджується, в i комірці простору:

$$\sum_{i=1}^N \mu_i = 1.$$

Свого мінімального значення наведений інтеграл досягає, коли мінімальною стає величина показника степеня функції, що інтегрується. Це досягається за умови:

$$\frac{d\tau}{d\alpha} = 0, \quad \tau = q \cdot \alpha - f(\alpha). \quad (2)$$

Мінімальне значення функції $\tau(q)$ безпосередньо зв'язано з узагальненими числами Рен'ї

$$D_q : D_q = \frac{\tau(q)}{q-1}.$$

Чисельні значення наведених параметрів є кінцевим результатом застосування МФА до опису стану об'єкта, що досліджується. Наведені математичні вирази МФА застосовуються в програмному забезпеченні, що розроблено в роботі.

Принциповим моментом у застосуванні МФА до опису стану системи є конкретний вибір фізичного параметра системи, який є найбільш інформативним та найбільш повно її характеризує. Серед можливих геометричних параметрів системи, який відповідає головній меті розрахунків, а саме пошуку значення енергії її поверхні, було обрано площу поверхні. Саме цей фізичний параметр системи було оброблено методами МФА в даній роботі.

МФА розподілу площі на поверхні шарів. Вхідні дані для застосування МФА до розподілу площі поверхні плівки були отримані з аналізу її AFM зображень. В такому випадку вхідний математичний параметр для МФА, а саме значення відносної міри фрактального об'єкта μ_i повинно розраховуватися відповідно до такої формули:

$$\mu_i = S_i / S, \quad (3)$$

де S_i – площа малої, обраної «елементарної» площадки, $S = \sum_{i=1}^N S_i$ – площа всієї поверхні, що аналізується, знайдена за даними її просторового зображення, N – кількість малих площадок, які апроксимують поверхню.

Достатньо часто AFM зображення надаються у вигляді оцифрованих фотографій, де чисельна дискретизація зображення задається кількістю пікселів у фотографії. Як вже говорилося, в якості параметра системи, до якого буде застосовуватися МФА, була обрана площа поверхні структури. Такий стан проблеми потребує виконання попередньої математичної обробки вхідних даних, які мають вигляд кольорової або градацій сірого палітри, що міститься в кожному пікселі. Мета такої обробки вхідних даних є отримання інформації про величину площі поверхні реальної плівки.

Елемент дискретної картини поверхні між сусідніми точками дискретизації може бути схематично зображено в такому вигляді (рис. 1). Координатні вісі “X” та “Y” на рисунку 1 лежать у горизонтальній площині, а координата “Z” описує глибину поверхневого рельєфу. За даними про палітру, що знаходяться в кожному пікселі, та з урахуванням відстані між точками дискретизації (чи між пікселями на фотографії) геометричними методами неважко розрахувати «елементарну» площину поверхні, що розташована між вказаними точками. Ця площа в роботі остаточно була розрахована методом триангуляції, тобто площа просторового чотирикутника була знайдена як сума площин двох контактуючих трикутників. Цей результат і розглядався як величина площини «елементарної» площадки S_i . Наведена процедура багатократно повторювалася для усієї сукупності точок цифрового зображення. Таким чином було сформовано масив «елементарних» площ, до якого і були застосовані методи МФА.

Основною частиною МФА є метод огрублення розбиття [3, 4]. Зберегти дані про просторову орієнтацію «елементарних» площадок при застосуванні вказаного методу можливо тільки за рахунок використання як комірок для розбиття всього простору простої геометричної фігури. Істотно, що таким найпростішим просторовим елементом для вивчення поверхні в роботі обрано куб [3, 4]. Саме відповідно до методу розбиття на куби було виконано розрахунки міри об'єкта за формулою (3). Схематично взаємне розташування поверхні та декількох кубів, що є сусідніми, також наведено на рисунку 1. З нього видно, що в загальному випадку поверхня «елементарної» площадки розподілена між різними кубами. Це потребує виконання розподілу цієї площі між ними. Таку задачу було розв'язано за допомогою методу Монте-Карло [5]. Застосування такого статистичного методу дозволило достатньо ефективно сформувати вхідний розподіл відносної міри об'єкта μ_i за «елементарними» площами для всієї поверхні, що оброблюється. Істотно, що в випадку, коли дійсна поверхня не входила до об'єму обраного куба, то для такого кубічного елемента його відносна міра вважалася такою, що дорівнює нулю.

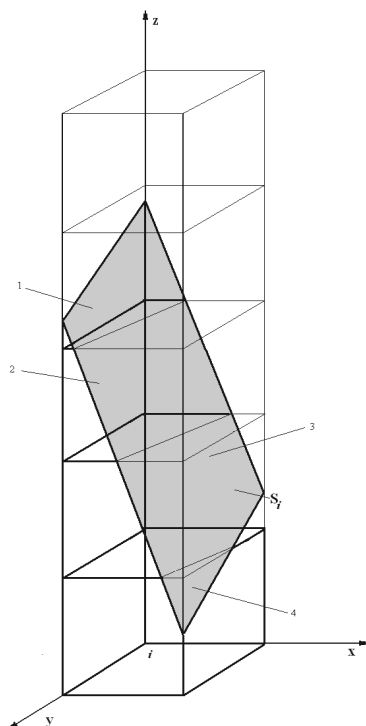


Рис. 1. Схема частини AFM зображення, що відображає просторовий рельєф поверхні плівки: S_i – частина рельєфу поверхні між чотирма сусідніми точками дискретизації вхідного зображення («елементарна» площадка). Координатні вісі «X» та «Y» спрямовані вздовж поверхні шару, вісь «Z» – спрямована перпендикулярно поверхні росту. Для цифрової фотографії «Z» – градація сірого одного пікселя; вертикально розміщені куби – частина кубічної структури в методі огрублення розбиття; 1, 2, 3, 4 – приклад частин площадки S_i , що розташовані в різних кубах. Верхній куб не містить в собі частини площі поверхневого рельєфу S_i , що відповідає його нульовій відносній мірі $\mu_j = 0$

Розрахунки параметрів мультифрактальних спектрів виконувалися відповідно до методу огрублення розбиття, тобто за типовою для МФА процедурою [3, 4]. Згідно з вказаним методом для куба заданого розміру та відповідно до формули (1) формувалася статистична сума $Z(q, l_k)$, де l_k нормована довжина сторони куба, яка відповідає кожному кроку методу огрублення розбиття. Відповідно до [3, 4] функція $\tau(q)$ зв'язана з статистичною сумою виразом:

$$\tau(q) = \frac{\partial \{\ln Z(q, l_k)\}}{\partial \ln l_k}.$$

Якщо в фізичній системі, що розглядається, присутні елементи фрактальної симетрії степеня q , то експериментальна залежність $\ln Z(q, l_k)$ від $\ln l_k$ повинна формувати сукупність точок, які групуються вздовж прямої лінії у відповідних координатах. З математичної точки зору це означає, що величину функції τ , що шукається, потрібно порівняти з кутовими коефіцієнтами нахилу прямих ліній, що проведені крізь значення статистичної суми $Z(q, l_k)$. Останні, в свою чергу, безпосередньо зв'язані з експериментальними даними за величинами «елементарних» площин на реальній поверхні формулою (1).

Істотно, що розрахунок параметрів лінійної кореляції між вказаними параметрами системи здійснювався методом найменших квадратів для кожного із заданих значень параметра q . Дані за функцією $\tau(q)$ дозволяють розрахувати й інші параметри мультифрактального спектра системи. Так функція α відповідно до [3, 4] зв'язана з величиною $\tau(q)$ виразом: $\alpha = \frac{d\tau(q)}{dq}$, а розрахункова формула

для щільності імовірності знаходження в системі фракталів з розмірністю α , тобто $f(\alpha)$, може бути знайдена за виразом:

$$f(\alpha) = q \cdot \alpha - \tau.$$

Наведені вирази та методика їх розрахунків дозволили розробити відповідне програмне забезпечення. Воно було протестоване при розрахунках мультифрактальних параметрів широко відомих та раніше теоретично досліджених фрактальних систем і далі застосовано для аналізу параметрів мультифрактального розподілу площі в реальних полікристалічних плівках $Zn_xCd_{1-x}Te$, які для цієї задачі були синтезовані в даній роботі.

Експериментальні результати. Шари твердих розчинів $Zn_xCd_{1-x}Te$ формувалися на підкладках $Si(111)$ методом «гарячої стінки» [6]. Як підкладки використовували хімічно поліровані монокристалічні пластини $Si(111)$. Джерелом вхідного матеріалу були обрані гранульовані полікристали $Cd_{1-x}Zn_xTe$ з вмістом цинку ($x \approx 0.04-0.05$). Температурні умови проведення синтезу в методі «гарячої стінки» були знайдені в попередніх експериментах. При цьому температура підкладки розглядалася як параметр, яким керують, а температура на джерелі матеріалу, що випаровується, підтримувалася постійною і рівною $380^\circ C$. В наведених умовах швидкість формування плівки твердого розчину знаходилася на рівні 8 нм/хв . Товщину отриманих шарів задавали часом синтезу, який змінювався від 1 до 120 хв.

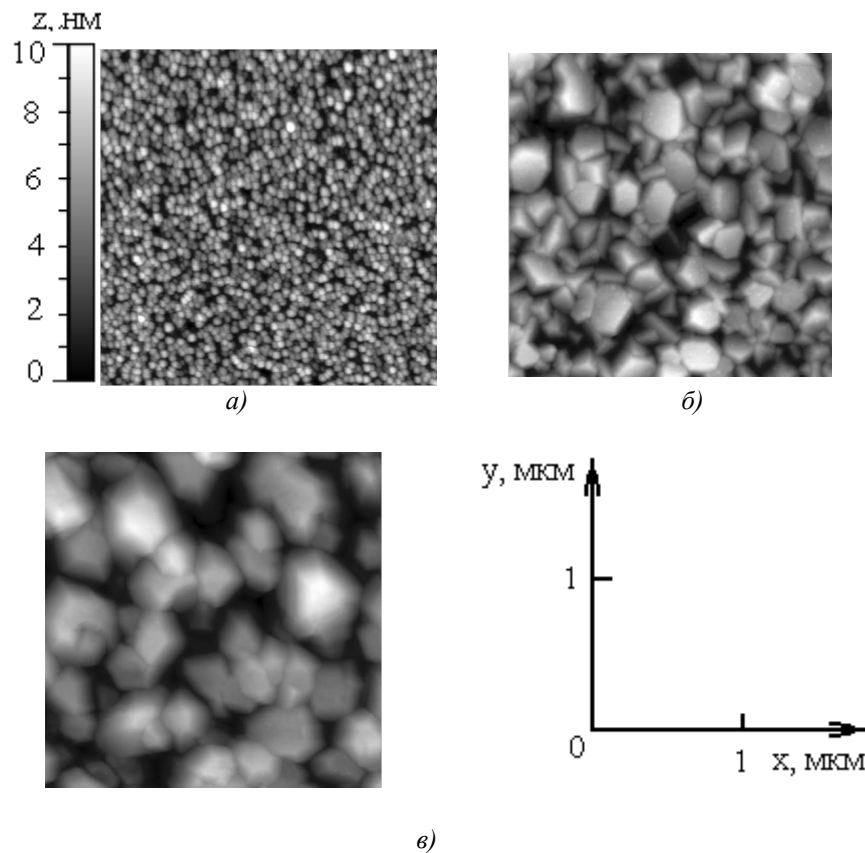


Рис. 2. AFM зображення поверхні плівки $CdZnTe$, що осаджена на підкладку $Si(111)$, при температурі підкладки $1000^\circ C$ та різних термінах процесу: а) $t = 1 \text{ хв.}$: $D_0 = 2,569$, $\Delta = 0,261$; б) $t = 10 \text{ хв.}$: $D_0 = 2,371$, $\Delta = 0,196$; в) $t = 120 \text{ хв.}$: $D_0 = 2,292$, $\Delta = 0,193$

Товщину отриманих шарів вимірювали за допомогою механічного профілометра ALPHA STEP 100 (Tensor Instruments). Морфологію структур досліджували методами атомно силової мікроскопії (AFM) (Nanoscope Dimension 3000, фірма Digital Instruments, USA) в режимі періодичного контакту.

На рисунку 2 показано основну частину фотографії мікроструктури поверхні надтонких плівок $CdZnTe$, отриманих методом «гарячої стінки» у різних часах синтезу та постійній температурі на підкладці ($T = 100^\circ C$). Саме такого виду дані були оброблені методом МФА у відповідно до розробленої методики.

Результати розрахунків та їх обговорення. Як вже зазначалося, розроблене програмне забезпечення тестувалося на основі розрахунків параметрів класичних фрактальних систем, для яких параметри мультифрактальних спектрів добре відомі [3, 4]. У виконаному аналізі були розраховані параметри як двовимірних, плоских структур (ковдри Серпінського з рівномірним та нерівномірним розподілом вагової функції за трикутниками), так і спеціально сгенеровані просторові форми. Виконані

розрахунки мультифрактальних спектрів для таких систем показали практичний збіг зі своїми теоретичними аналогами до 4 знаків після коми за числом Рен'ї. Ще одним підтвердженням правильності роботи була перевірка виконання основних математичних взаємозв'язків, що повинні виконуватися між знайденими параметрами мультифрактальних спектрів [4]. Сказане відноситься до забезпечення наступних граничних співвідношень виду $D_\infty \rightarrow \alpha_{\min}$, $D_{-\infty} \rightarrow \alpha_{\max}$ и $D_0 = f(\alpha_0)$, $D_1 = \alpha(1) = f(\alpha(1))$. Істотно, що перевірка виконання наведених співвідношень вимагала суттєвих часових витрат на роботу обчислювальної програми. Це було пов'язано з необхідністю збільшення параметра q , за найменшою мірою, до 200. В той же час виконані розрахунки довели, що всі взаємозв'язки, що наведені в [4] та типові для параметрів мультифрактального спектра, за результатами роботи програми для всіх зображень, які були обраховані, виконувалися. Таким чином, виконані тестові розрахунки довели, що розроблені обчислювальні програми забезпечують отримання вірогідного опису мультифрактального розподілу для «тестових» поверхонь та дозволяють використовувати його для аналізу поверхневого стану реальних шарів.

Як і в [1, 3, 4] як найбільш інформативних мультифрактальних параметрів спектра були обрані: число Рен'ї D_0 та параметр впорядкованості $\Delta_{q \rightarrow \infty} = D_1 - D_{q \rightarrow \infty}$ (ступінь порушення фрактальної симетрії [3, 4]). В розрахунках даної роботи значення параметра q не перевищувало $q = 80$. На рисунках 3–6 надані всі залежності, що формують дані про весь мультифрактальний спектр поверхні структури. Ці графіки належать до аналізу стану поверхні плівки твердого розчину $CdZnTe$, яка була осаджена на кремнієву підкладку, що знаходилася при температурі 100°C . Термін синтезу – 10 хв.

На рисунку 3 наведена залежність чисел Рен'ї D_q від параметра степеневого розкладу q , а на рисунку 4 – залежність щільності ймовірності знаходження в системі фракталів з розмірністю α (спектр фрактальних розмірностей $f(\alpha)$). Усі отримані залежності відповідають своїм канонічним формам. Необхідно вказати, що, відповідно до наших розрахунків, не було отримано жодного результату, що забезпечував би отримання так званого псевдо канонічного спектра [2].

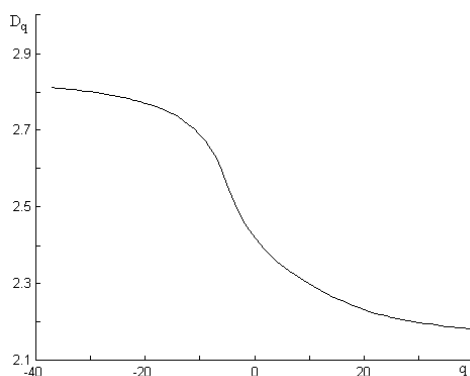


Рис. 3. Залежність чисел Рен'ї D_q від параметра степеневого розкладу q для AFM зображення, що надано на рисунку 2

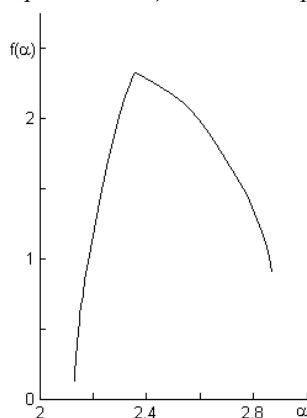


Рис. 4. Щільність ймовірності знаходження в системі фракталів із заданою розмірністю α (спектр фрактальних розмірностей $f(\alpha)$), для AFM зображення, що надано на рисунку 2

Відповідно до [2] для таких спектрів типово спостерігається зростаюча послідовність чисел Рен'ї $D_0 \leq D_1 \leq \dots \leq D_q$, а функція щільності ймовірності для фрактальних розмірностей $f(\alpha)$ має чіткий екстремум. За допомогою нашої програми такі спектри спостерігалися тільки у випадках повернення до спрощених уявлень, коли рельєф поверхні моделювався логічними нулями чи одиницями [2]. Істотно стверджувати, що саме попередня обробка даних перед застосуванням до них МФА виключила появу в кінцевих результатах такого роду математичних аномалій. Також вкажемо, що й інші головні функції МФА, які отримувалися в роботі, а саме $\tau(q)$ і $f(q)$ відповідають своїм класичним формам. Типовий вид цих функцій надано на рисунку 5. Він демонструє появу зміни нахилу функції $\tau(q)$ при $q=0$. Саме такий вид цієї залежності є атрибутом появи мультифрактальної структури на поверхні плівки, що аналізується [4].

На рисунку 6 наведені залежності статистичних сум $Z(q, l_k)$ при $q=0$ і $q=2$ від нормованої довжини ребра кубу. Необхідно вказати, що розрахункові величини статистичних сум на практиці різняться на декілька порядків. При цьому для від'ємних та нульових значень q самі функції виявляються спадними, тоді як при додатних значеннях q статистичні суми збільшуються зі збільшенням довжини ребра кубу. Така ситуація безпосередньо витікає з методу розрахунків цих величин. Дійсно, відповідно до формули (1), коли $q=0$ вагова міра кожного кубу дорівнює одиниці. При збільшенні розмірів кубів сама кількість кубів, що формує статистичну суму, зменшується. Це відображається на кількості «одиниць» в статистичній сумі. Останнє і забезпечує її зменшення з ростом довжини ребра кубу, коли загальна кількість кубів зменшується. Для додатних значень q статистична сума буде збільшуватися, в зв'язку з тим, що збільшується і площа, що в них розташовується. Для від'ємних значень параметра q компоненти статистичної суми зі збільшенням загальної площі трансформуються в малі величини.

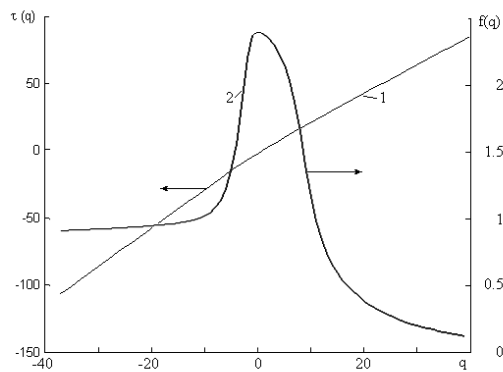


Рис. 5. Залежність функції $\tau(q)$, $f(q)$ від параметра ступеневого розкладу q для АФМ зображення, що надано на рисунку 2

Сказане кількісно ілюструється даними рисунка 6, де спостерігаються принципово різні тенденції в поведінці статистичних сум для різних q .

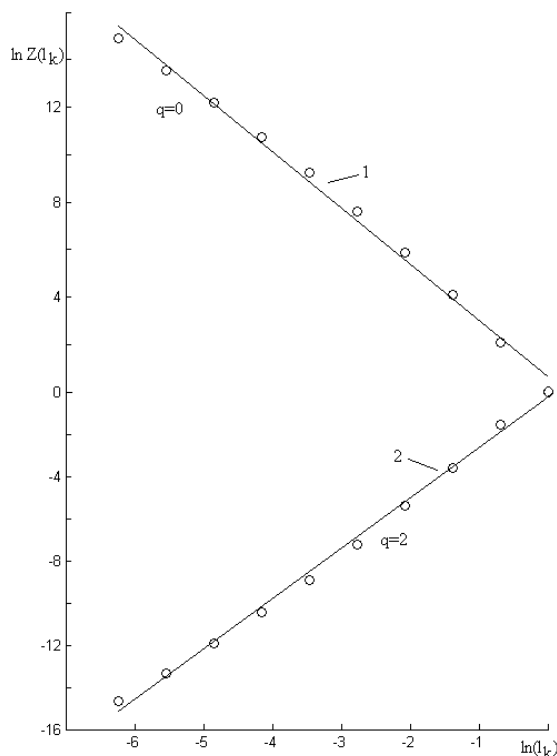


Рис. 6. Статистичні суми $Z(q=0, l_k)$ та $Z(q=2, l_k)$ залежно від $\ln l_k$ для AFM зображення, що наведено на рисунку 2

Точками на рисунку 6 показані розрахункові значення сум для отриманих із AFM зображень величин μ_i . Із нього випливає, що експериментальні дані за μ_i чітко групуються навколо відповідних прямих ліній. Типові значення коефіцієнтів кореляції в методі найменших квадратів для значень $q < 4$, як правило, перевищували 0,9, змінюючись від зразка до зразка. Достатньо високі значення кореляційних коефіцієнтів для різних величин q дозволяє стверджувати, що саме мультифрактальний, а не монофрактальний стан є типовим для поверхонь, що аналізуються, та саме тільки мультифрактальні параметри системи зможуть описати стан такої поверхні в повному обсязі.

Корисно виконати порівняльний аналіз числових значень чисел Рен'ї, що отримані в даній роботі для $q = 0, 1, 2$. Розрахунки показали, що ці величини слабо різняться одна від одної. Так для зображення рисунку 2 їх значення є такими: $D_0 = 2.371$, $D_1 = 2.378$, $D_2 = 2.384$. Вважаючи на статистичну основу МФА та відповідні їй вірогідності при розрахунках наведених параметрів, в такому стані з'являється можливість використання кожного із цих параметрів в термодинамічному аналізі стану поверхні. Така ситуація не суперечить теоретичним положенням МФА [3, 4], але апріорі, до проведення розрахунків все ж нами вважалось, що різниця між першими з трьох чисел Рен'ї буде більш вагомою. На даному етапі розрахунків таку ситуацію, здається, можливо пояснити використанням у методі огрублення розбиття заздалегідь дуже малих за розміром кубів, що при $q = 0$ дуже непогано описують просторовий розподіл елементів на реальній поверхні.

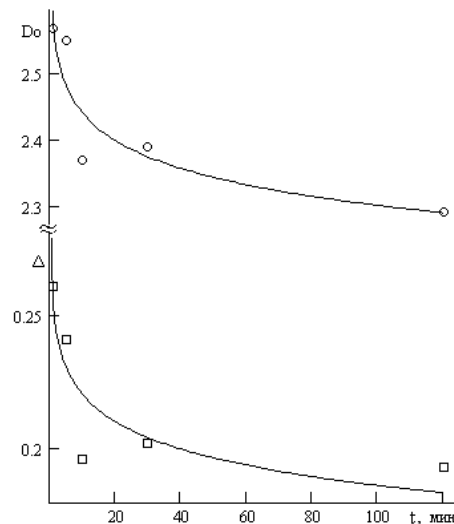


Рис. 7. Залежність чисел Рен'ї D_0 та параметрів фрактальної впорядкованості Δ від терміна росту шарів твердого розчину CdZnTe. Температура підкладки при синтезі 1000°C , D_0 та Δ – розраховані в даній роботі.
Швидкість синтезу шару плівки – 23 нм/хв.

Кількісні дані про мультифрактальні параметри поверхні шарів дозволяють здійснити пошук їхнього взаємозв'язку з технологічними умовами синтезу плівок. Так рисунку 7 демонструє еволюцію з часом вказаних параметрів для поверхонь шарів, що осаджені за однією й тією ж температурою. Принциповим фрагментом у наведених даних є той факт, що мультифрактальні параметри поверхні отримані для плівок, які синтезовані з шихти одного і того ж складу. Тому хімічний склад шарів від одного зразка до іншого відрізняється дуже несуттєво. В той же час поверхнева структура цих зразків, хоча б за розміром зернят, різняться принципово (рис. 2). Така ситуація знайшла своє відображення у величинах мультифрактальних параметрів. Так дані рисунку 7 демонструють стійкі взаємозв'язки між мультифрактальними параметрами та умовами проведення процесу синтезу. Такі дані дозволяють стверджувати, що саме величини мультифрактальних параметрів якісно відобразили та кількісно описали різниці в структурі поверхні між зразками одного і того ж складу, але отриманих в різних умовах.

Рисунок 7 демонструє, що зі зростанням часу формування шару хаусдорфова розмірність полікристалічної поверхні плівки (число D_0) зменшується, наближаючись до двох. Останнє відображає еволюцію термодинамічного стану системи за напрямом формування суцільної плоскої поверхні. Вкажемо, що саме формування плоскої поверхні є найменш енерговтратним процесом і тому найбільш вигідним в термодинамічному відношенні. Дані рисунку 7 за залежністю параметра впорядкованості Δ також показують стійку тенденцію системи до зменшення ширини свого мультифрактального спектра. Дійсно, зменшення параметра Δ , який за своїм змістом описує діапазон чисел Рен'ї, що спостерігаються в системі, або ж кількість можливих фрактальних структур, з ростом часу синтезу доводить про появу в системі тенденцій до формування монофрактальної структури. Природно, що в такому випадку мультифрактальний спектр трансформується в пряму лінію при D_0 , а параметр Δ стає нульовим.

Аналіз еволюції мультифрактального спектра поверхні плівки з часом (рис. 7) дозволяє виділити на цій залежності такі особливості. На початковій стадії росту (до 30 хв. процесу, тобто при товщині шару менш 1000 нм) плівка, що формується, характеризується істотною фрактальною невпорядкованістю. Це знаходить своє відображення в істотному відхиленні розмірності D_0 від двох та в значній величині параметра впорядкованості Δ . Відомо, що при осадженні плівки на підкладках в умовах значної різниці в періодах кристалічних ґраток матеріалів, що спрягаються, в новій твердій фазі формується перехідний шар. Цей шар за рахунок своєї великої дефектності забезпечує релаксацію надлишкової енергії механічних напружень, обумовлених невідповідністю періодів кристалічних ґраток в гетеропарі. Саме за рахунок формування такого перехідного шару система, імовірно, достатньо легко виходить на режим росту, що є характерним для умов синтезу товстої полікристалічної плівки з крупнозернистою структурою. Високу ступінь дефектності матеріалу на початковому етапі росту і відображають підвищені величини мультифрактальних параметрів. Зі зростанням часу росту та товщини осаджених шарів

мультифрактальні параметри зменшуються, наближаючись до своїх значень, що характерні для росту в умовах гомоепітаксії.

В роботі методом найменших квадратів було виконано вирівнювання експериментальної залежності мультифрактальних параметрів, що розглядаються, від часу (кінетичні криві). Знайдено, що в напівлогарифмічних координатних осях залежності $D_0 = f(\ln t)$ та $\Delta = f(\ln t)$ (t - час синтезу) достатньо задовільно описуються прямими лініями. При цьому коефіцієнти кореляції, щодо лінійної регресії в названих змінних, були дуже близькими до одиниць і відповідали величинам $K_{D_0} = -0.82$, $K_{\Delta} = -0.97$.

За таким даними можливо прийняти, що саме за експоненційним законом гетеросистема, а з нею і мультифрактальні параметри, що її описують, еволюціонують до свого рівноважного стану. Природно, що як збудження в такому випадку слід розглядати формування перехідного шару, для якого спостерігається високий рівень дефектів у структурі. Необхідно вказати, що кореляційні взаємозв'язки між умовами отримання шарів та їх мультифрактальними параметрами нами спостерігалися і у випадку росту монокристалічних епітаксійних плівок твердих розчинів $Zn_xCd_{1-x}Te$ на підкладках $CdTe$ методом рідкофазової епітаксії [7].

Висновки. Таким чином, за результатами роботи слід зробити такі висновки. Програмне забезпечення мультифрактального аналізу, що розроблено, дозволило коректно здійснити мультифрактальну параметризацію площі поверхні плівок твердих розчинів $Zn_xCd_{1-x}Te$, що осаджені на підкладки із Si методом гарячої стінки.

Показано, що параметри мультифрактальних спектрів поверхні плівок знаходяться в безпосередньому взаємозв'язку з умовами проведення синтезу матеріалу.

Список використаної літератури:

1. Фрактальна геометрія поверхні гетероструктур $Cd_xHg_{1-x}Te - Zn_{0.04}Cd_{0.96}Te$, сформованих осадженням з рідкої фази / П.П. Москвін, А.А. Гутніченко, В.Б. Крижанівський та ін. // Вісник ЖДТУ / Технічні науки. – 2012. – № 2(61). – С. 41–46.
2. Встовский Г.В. Введение в мультифрактальную параметризацию структур материалов / Г.В. Встовский, А.Г. Колмаков, Бунин И.Ж. – М. : Центр «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. – С. 116.
3. Федер Е. Фракталы / Е.Федер. – М. : Мир, 1991. – 259 с.
4. Божокин С.В. Фракталы и мультифракталы / С.В. Божокин, Д.А. Паршин. – Ижевск : НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. – 128 с.
5. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло / И.М. Соболев. – М. : Наука, 1973.
6. The process of self organization and formation of CdZnTe thin films by hot-wall epitaxy / M.V. Vuichyk, L.V. Rashkovetskyi, S.R. Lavoryk, P.M. Lytvyn // Mater. Internat. Meeting “Clusters and nanostructured materials”. – Ukraine, Uzhgorod, 2012. – P. 88.
7. Мультифрактальная параметризация поверхности гетерокомпозиций на основе твердых растворов полупроводников A2B6 / П.П. Москвін, Л.В. Рашковецкий, Н.В. Вуйчик, П.М. Литвин // Актуальные проблемы прикладной физики (АППФ-2012) : матер. I Междунар. научно-практич. конф. – Севастополь, 2012. – С. 119–120.

МОСКВІН Павло Петрович — доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри фізики Житомирського державного технологічного університету.

Наукові інтереси:

— фізика та технологія складних напівпровідників.

КРИЖАНІВСЬКИЙ Вячеслав Борисович — кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри програмного забезпечення обчислювальної техніки Житомирського державного технологічного університету.

Наукові інтереси:

— комп'ютерне моделювання;
— фізика поверхні.

ОМЕЛЯНЧУК Світлана Антонівна — інженер кафедри фізики Житомирського державного технологічного університету.

Наукові інтереси:

— фізика та технологія складних напівпровідників.

РАШКОВЕЦЬКИЙ Любомир Васильович — науковий співробітник інституту фізики напівпровідників ім. В.Е. Лашкарьова НАН України, м. Київ.

Наукові інтереси:

— технологічні процеси отримання складних напівпровідникових сполук.

ЛИТВИН Петро Мар'янович — старший науковий співробітник інституту фізики напівпровідників ім. В.Е. Лашкарьова НАН України, м. Київ.

Наукові інтереси:

— атомно-силова (AFM) мікроскопія.

ВУЙЧИК Микола В'ячеславович — старший науковий співробітник інституту фізики напівпровідників ім. В.Е. Лашкарьова НАН України, м. Київ.

Наукові інтереси:

— технологія складних напівпровідникових матеріалів.

Стаття надійшла до редакції 24.05.2013

Москвін П.П., Крижанівський В.Б., Омелянчук С.А., Рашковецький Л.В., Литвин П.М., Вуйчик М.Н.В. Математичне моделювання мультифрактальних станів поверхні напівпровідникових структур *ZnCdTe* – кремнієва підкладка

Москвин П.П., Крыжановский В.Б., Омелянчук С.А., Рашковецкий Л.В., Литвин П.М., Вуйчик Н.В. Математическое моделирование мультифрактальных состояний поверхности полупроводниковых структур *ZnCdTe* – кремниевая подкладка

Moskvin P.P., Kryzhanivskyy V.B., Omelyanchuk S.A., Rashkovetsky L.V., Lytvyn P.M., Vujchuk N.V. Mathematical modeling of multi-fractal surface states of semiconductor structures *ZnCdTe* – Silicone substrate

УДК 539.21; 541.182; 548.5; 620.18

Математическое моделирование мультифрактальных состояний поверхности полупроводниковых структур *ZnCdTe* – кремниевая подкладка / П.П. Москвин, В.Б. Крыжановский, С.А. Омелянчук, Л.В. Рашковецкий, П.М. Литвин, Н.В. Вуйчик

Выполнено моделирование мультифрактальных состояний поверхностного рельефа полупроводниковых структур *ZnCdTe* – подкладка из кремния. В качестве входных данных для анализа использованы данные атомно-силовой микроскопии (АФМ-микроскопия). Цифровое изображение поверхности обработано методами мультифрактального анализа. Предложена вычислительная методика обработки пространственных данных по площади поверхности слоев. Рассчитаны мультифрактальные спектры поверхности слоев указанной системы твердых растворов. Найдены корреляционные зависимости между параметрами мультифрактального спектра и технологическими условиями синтеза слоев.

УДК 539.21; 541.182; 548.5; 620.18

Mathematical modeling of multi-fractal surface states of semiconductor structures *ZnCdTe* – Silicone substrate / P.P. Moskvin, V.B. Kryzhanivskyy, S.A. Omelyanchuk, L.V. Rashkovetsky, P.M. Lytvyn, N.V. Vujchuk

Simulation of multi-fractal states of surface topography of semiconductor structures *ZnCdTe* – Silicone substrate is performed. As an input the data of atomic force microscopy (AFM-Microscopy) is used. Digital image of the surface is processed by methods of multifractal analysis. A computational method of data processing on the spatial area of the surface layers is proposed. Multifractal spectra of the surface layers of this system of solid solutions are calculated. Correlations between parameters of the multifractal spectrum and technological conditions of layers synthesis are found.