

МУЛЬТИФРАКТАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СВЕТОИЗЛУЧАЮЩИХ СТРУКТУР

**А.П. Карташова, кандидат физико-математических наук, доцент.
Санкт-Петербургский университет ГПС МЧС России**

Рассмотрен синергетический подход к описанию свойств полупроводниковых светоизлучающих структур с помощью мультифрактального анализа.

Ключевые слова: синергетика, мультифрактальный анализ, полупроводниковые светоизлучающие структуры, характер организации наноматериала

MULTIFRACTAL ANALYSIS OF SEMICONDUCTOR LIGHT-EMITTING STRUCTURES

A.P. Kartashova. Saint-Petersburg university of State fire service of EMERCOM of Russia

This article concerns the synergetic approach to the description of the properties of semiconductor light-emitting structures using multifractal analysis.

Keywords: synergetics, semiconductor light-emitting structures, multifractal analysis, nanostructural arrangement of the material

Современное материаловедение рассматривает материал как открытую нелинейную систему. В этом случае структура материала формируется в условиях обмена с окружающей средой веществом, энергией и информацией. Эти процессы в большинстве случаев носят необратимый и неравновесный характер и связаны с нарушением симметрии в системе. При направленном характере взаимодействия между системой и внешней средой имеет место формирование устойчивых стохастически самоподобных структур на разных масштабных уровнях, в том числе, возникает упорядоченность на крупномасштабном уровне (так называемая «самоорганизация»).

Методологической основой изучения и создания новых материалов с заданными свойствами являются принципы синергетики, в соответствии с которыми эффективные способы получения и управления свойствами материалов возможны только в условиях самоорганизации структур [1]. Синергетика, или теория самоорганизации, сегодня представляется одним из наиболее популярных и перспективных междисциплинарных подходов. Слово «синергетика» происходит от греческого «синергос» – содействие, сотрудничество. Ричард Бакминстер Фуллер, признанный архитектор, специалист по дизайну, прикладному искусству и приложению математики назвал синергетикой учение о самоорганизации сложных систем, но свою книгу «Синергетика» опубликовал только в 1982 г. Английский физиолог Чарльз Шеррингтон – человек, который фактически параллельно с Павловым открыл условный рефлекс, – назвал синергетическим, или интегративным, согласованное воздействие нервной системы (спинного мозга) при управлении мышечными движениями. За открытия в области нейрофизиологии он получил Нобелевскую премию в 1932 г. Определение термина «синергетика», близкое к современному пониманию, ввел один из основателей теории лазеров Герман Хакен из Штутгартского университета. В 1973 г. на первой конференции, посвященной проблемам самоорганизации, Хакен сделал доклад, с которого фактически и отсчитывает свое время жизни синергетика. В 1975 г. в журнале «Review of Modern Physics» расширенный

и дополненный доклад Г. Хакена был опубликован под названием «Кооперативные явления в сильно неравновесных и нефизических системах». В 1977 г. в издательстве «Springer» вышла книга Г. Хакена «Синергетика» на английском и немецком языках. В 1978 г. книга была переиздана, а вскоре вышла на русском и японском языках [2]. Хакен Г. одним из первых обратил внимание на то, что границы между традиционными дисциплинами утратили отчетливость: образование внутренних структур в лазере происходит в соответствии с законами, очень напоминающими законы конкуренции молекулярных видов. Предметом новой области науки было названо изучение общих принципов функционирования систем, в которых из хаотических состояний самопроизвольно возникают высокоупорядоченные пространственные, временные и пространственно-временные структуры. Синергетика призвана построить физическую модель этих процессов и подобрать для их описания адекватный математический аппарат.

Решение первой задачи Г. Хакен видел в традиционной схеме: для того, чтобы построить физическую модель явления, необходимо разбить систему на мелкие составляющие – атомизировать ее. При таком подходе самоорганизующийся объект представляется как макросистема, составленная из огромного (в пределе – бесконечно большого) количества элементов – макросистем. Для синергетики (в отличие от термодинамики, откуда заимствована данная терминология) безразлична природа макросистемы. Помимо физических и химических систем, элементами которых служат атомы и молекулы (изучением таких систем ограничивается термодинамика), это могут быть биологические организмы, состоящие из огромного числа клеток, экологические системы, составленные из отдельных видов живых существ, и, наконец, социальные системы, заключающие в себе как отдельные социальные группы людей, так и целые народы.

При всем разнообразии внешних признаков элементы макросистемы проявляют поразительное единообразие, когда при определенных условиях их поведение становится «согласованным», а иногда и «целенаправленным». Результатом такого «сотрудничества» является формирование нового макроскопического свойства у всей макросистемы как целого, хотя каждая отдельная подсистема этим свойством не обладает. Основная задача синергетики и состоит в том, чтобы вскрыть общие принципы, по которым отдельные подсистемы формируют макроскопические свойства полной системы [3].

Синергетика занимается изучением процессов самоорганизации, устойчивости и трансформации структур различной природы, являющимися общими для живой и неживой природы. Общность заключается в том, что всем естественным (по мнению некоторых ученых, также социальным и историческим) процессам свойственны неравновесные переходы, отвечающие особым точкам – точкам бифуркаций, в которых свойства системы, обусловленные самоорганизацией структур, изменяются самопроизвольно и скачкообразно. Вблизи точек бифуркации в системах наблюдаются значительные флуктуации, роль случайных факторов резко возрастает. Движущей силой самоорганизации диссипативных структур в понятиях термодинамики необратимых процессов является стремление открытых систем при нестационарных процессах к снижению производства энтропии.

Термин «диссипативные структуры» введен для описания поведения сильно неравновесных состояний И.Р. Пригожиным. Ларсом Онсагером и И.Р. Пригожиным были сформулированы принципы, которые легли в основу термодинамической теории образования структур. Дело в том, что по мере увеличения отклонения системы от равновесия, при определенных критических значениях внешних параметров система переходит в качественно новое состояние, которое характеризуется высшим уровнем самоорганизации, а именно, возникновением динамических устойчивых пространственно неоднородных структур, которые называют диссипативными структурами. На языке термодинамики необратимых процессов в области существования диссипативных структур производство (правильнее возникновение) энтропии обеспечивается не только хаотическим поведением элементов системы, но и макроскопическими процессами. Это область термодинамики необратимых процессов.

Нелинейная динамика предоставила синергетике математический аппарат, необходимый для описания самоорганизации как макроскопического процесса.

Явление самоорганизации диссипативных структур интересно, прежде всего, с точки зрения открывающейся возможности получения новых материалов с использованием нетрадиционных технологий. Оказалось, что самоорганизующиеся структуры, формирующиеся в неравновесных условиях, обладают свойствами фрактальности, то есть они могут количественно описываться, наряду с другими величинами, с помощью фрактальной (дробной) размерности. С определенной натяжкой можно сказать, что фракталы являются геометрическим образом, самоорганизующейся в сильно неравновесных условиях, системы [4].

Теория фракталов и мультифракталов в настоящее время используется во всех областях науки и техники. В частности, в геологии и геофизике – для определения возраста геологических пород, прогнозирования сейсмической активности и цунами; в экономике – для анализа биржевых котировок, прогнозирования кризисных ситуаций и оценивания риска по финансовым рядам; в биологии и медицине – для моделирования популяций, диагностики заболеваний и физиологического состояния по записям электрокардиограмм и электроэнцефалограмм, при изменении мутаций и изменений на генетическом уровне; в физике – для исследования турбулентности и термодинамических процессов. Этот список далеко не полон [5].

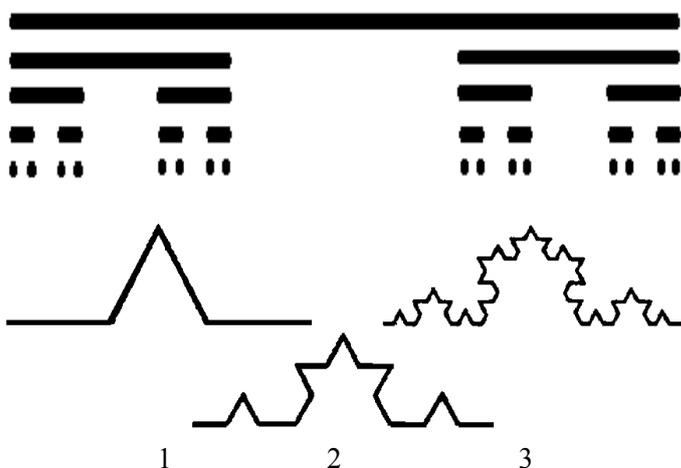
Открытая Б.Б. Мандельбротом общая закономерность геометрических свойств физического мира, проявляющаяся в самоподобии его строения, нашла многочисленные приложения в материаловедении и предоставила новые возможности для описания неупорядоченных микроструктур материалов с использованием строгих количественных терминов таких, как фрактальная размерность. Мандельброт Б.Б. – основоположник теории фракталов, предложил описывать фракталы через понятия самоподобия и масштабной инвариантности. Сам термин фрактал, фрактальный происходит от латинских слов (*frango, fregi, fractum* – дробный, ломать, разбивать, раздроблять). Достаточно простым и наглядным способом свойство масштабного самоподобия и понятие о фрактальной размерности можно проиллюстрировать с помощью представлений о регулярных фракталах. Такие модельные структуры получаются путем простых рекуррентных процедур разбиения исходной целой фигуры на части или сложения исходных наименьших частей. В качестве наиболее ярких и ставших уже классическими примеров регулярных фракталов можно указать кривые Коха, ковры Серпинского (рис.). Свойство самоподобия количественно выражается с помощью понятия фрактальной размерности D . Так, если некоторую структуру можно разбить на N подобных друг другу и самой структуре частей (структурных единиц) в $1/r$ раз ($r < 1$) меньшего размера, то ее размерность определяется формулой:

$$D = \lg(N) / \lg(1/r),$$

что подразумевает степенную зависимость $N \sim r^{-D}$ (скейлинг) [6]. В случае обычных геометрических фигур эта формула дает целые значения, и фрактальная размерность D равна евклидовой размерности. Например, для линии $D=1$, для квадрата $D=2$, для сферы и куба $D=3$. На сегодняшний день разработано достаточно большое количество методов определения фрактальных размерностей [1], которые условно можно разделить на геометрические (метод островов среза, Фурье анализ профилей, метод вертикальных сечений и др.) и физические (адсорбционные методы, параметрия, вторичная электронная эмиссия, малоугловое рассеяние электронов и др.). В материаловедении чаще применяются геометрические методы. При этом используются два принципиально разных стратегических подхода. Первый подход базируется на измерении фрактальной размерности непосредственно самой изучаемой структуры. Второй подход заключается в моделировании реальной изучаемой структуры какой-либо наиболее близкой к ней по конфигурации регулярной фрактальной структурой, фрактальная размерность которой уже известна или задается формулой зависимости

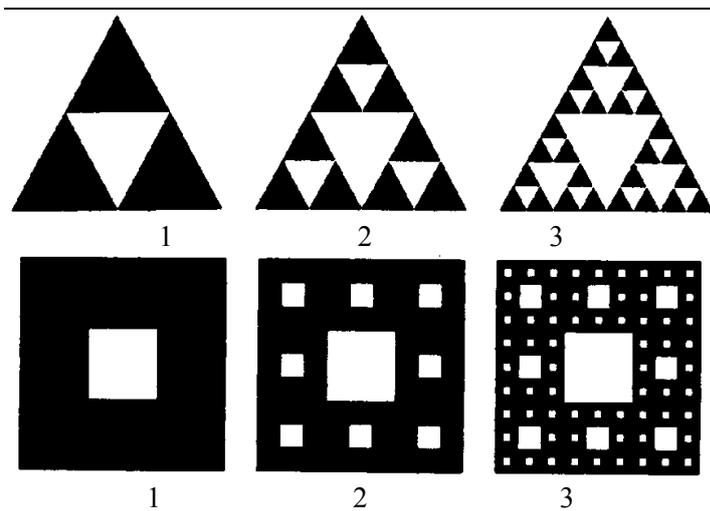
от параметра. Несмотря на ряд успехов в области использования представлений о регулярных фракталах с вычислением величины фрактальной размерности для параметризации структур разной природы, многочисленные исследования показали явную недостаточность такого подхода [1]. Структура реальных материалов, существующих в природе, сильно отличается от регулярных фракталов. Вследствие этого, одна величина фрактальной размерности не может охватить наблюдаемого разнообразия и отразить количественно свойства неоднородности структур, их пространственной упорядоченности, периодичности и т.д. Именно эти свойства особенно важны при описании диссипативных структур, образующихся в условиях обмена материала веществом, энергией и информацией с окружающей средой. Исходя из этого, современное материаловедение применяет мультифрактальный формализм [7], предоставляющий такую возможность.

Практическое использование мультифрактальных представлений в металловедении стало возможным, начиная с 80-х гг. XX в., благодаря развитию теоретических представлений, в области мультифрактального формализма, статистической и информационной физики, теории симметрии [7]. Переход от фрактального описания к мультифрактальному означает переход от исследования масштабно-инвариантных свойств объектов, обладающих скейлинговой симметрией, к изучению особенностей распределений физических свойств или каких-нибудь других величин на геометрических носителях. Методология мультифрактальной параметризации структур материалов основывается на фундаментальных принципах самоподобия, стохастической фрактальности и нарушенной симметрии структур природных материалов и использует набор самоподобных мер в евклидовом пространстве, поэтому позволяет более точно охарактеризовать особенности материала. Применительно к металлам и сплавам эта методология была разработана в лаборатории прочности металлических материалов в Институте металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук доктором физико-математических наук Г.В. Встовским, кандидатом физико-математических наук И.Ж. Буниным, доктором физико-математических наук А.Г. Колмаковым, и успешно применяется более 10 лет.



Построение триадного Канторовского множества осуществляется путем бесконечного удаления средних частей отрезков (в данном случае одной из трех равных частей)
 $N=2$, $r=1/3$, $D=\lg 2/\lg 3=0,6309$

Построение триадной кривой Коха проводится бесконечным удалением одной средней части и добавлением двух таких же
 $N=4$, $r=1/3$, $D=\lg 4/\lg 3=1,2619$



Построение треугольного ковра Серпинского проводится бесконечным удалением средних частей треугольников
 $N=3$, $r=1/2$,
 $D=\lg 3/\lg 2=1,585$

Построение квадратного ковра Серпинского проводится бесконечным удалением средних частей квадратов
 $N=8$, $r=1/3$,
 $D=\lg 8/\lg 3=1,8928$

Рис. Примеры построения регулярных модельных фракталов
 (цифрами показаны этапы построения; матрица показана черным цветом, а вырезаемые элементы – белым; D – фрактальная размерность; N – число структурных единиц; $1/r$ – во сколько раз уменьшается размер структурной единицы, $D=\lg(N)/\lg(1/r)$; $N\sim r^{-D}$)

Основой мультифрактального подхода к количественному описанию материалов является построение тем или иным способом меры множества, аппроксимирующего изучаемую структуру, «помещенную» в евклидово пространство, которое разбивается на мелкие квадратные ячейки равного размера, и каждой ячейке сопоставляется мера в виде некоторого положительного числа (равноячеечное разбиение), соответствующая области изучаемой структуры, приходящейся на эту ячейку. Для каждой ячейки подсчитывается число единичных элементов структуры, попавших в ячейку, которое делится на общее число элементов структуры. Изучение скейлинговых свойств обобщенной корреляционной функции меры относительно скейлинга самой меры предоставляет широкие возможности для тонкой идентификации объектов со сложной структурой, часто неразличимых или плохо различимых при традиционных способах описания. Под скейлингом понимаются степенные зависимости измеряемых характеристик от масштаба, на котором производится измерение. Понятие меры формализует субъективный подход к описанию изучаемых объектов соответственно их природе или функциям. Если исследуется массовый фрактальный агрегат [8], мерами ячеек могут быть доли m_i/M общей массы агрегата M в ячейках разбиения. Аналогично можно поступать при исследовании объема или площади пустот твердого тела или его сечений (поровое пространство в песке), энергии, затраченной на разрушение различных структурных составляющих, занятая площадь и пр. Довольно полезным для задач материаловедения является использование вероятностной меры. Дальнейшим развитием такого подхода может служить генерация меры по «рельефу» плоского изображения структуры. В материаловедении и смежных с ним областях в подавляющем большинстве случаев изучаемые структуры представлены именно в виде плоских изображений (например, микрофотографий). В современной компьютерной технике и программах обработки точечной графики такие плоские изображения представляются в так называемой цифровой (оцифрованной) форме – как матрицы дискретных одинаковых по размеру элементов изображений – пикселей. Пикселы – это «точки» различных цветов, уровней серости и пр. Существует несколько форматов точечных графических изображений (например, bmp или pcx). Во всех случаях каждому пикселу приписывается три числовых характеристики (координаты): две из них (i, j) задают положение пиксела на плоскости изображения (x, y), третья характеристика задает его цвет $z(i, j)$. Цветовые характеристики пикселей задаются целыми числами: от 0 до 16, от 0 до 256 или от 0 до 256^3 – для цветных изображений, от 0 до 256 – для серых изображений и 0–1 – для черно-белых изображений

(бинарные матрицы из нулей и единиц). «Координаты» пикселей на плоскости представляют собой номера рядов и колонок в матрице пикселей (с помощью которой представляются изображения в цифровом виде) и так же задаются целыми числами. Значение цветовой характеристики можно интерпретировать как высоту рельефа в данной точке (пикселе) изображения. Таким образом, используя цветовую характеристику пикселя как обычное число, можно представить плоское изображение в виде рельефа поверхности в трехмерном пространстве. Причем координаты точек этой поверхности имеют целочисленные значения. Для количественного описания таких поверхностей можно дополнительно использовать дискретные аналоги известных из дифференциальной геометрии характеристик поверхностей. При изучении топографических структур вместо характеристики цвета можно использовать и непосредственно значение высоты рельефа изучаемой поверхности (после нормировки и/или дискретизации для получения целочисленных значений высоты). Примерами подобных структур могут служить трехмерные цифровые изображения поверхности материалов, полученные с помощью туннельного микроскопа или трехмерные цифровые изображения географического рельефа. Генерируемая по характеристике цвета или высоты $z(i, j)$ мера, $\mu_{0ij} = z(i, j) / (\sum_{i,j} z(i, j))$ на множестве элементарных ячеек – пикселей, может непосредственно использоваться для мультифрактального анализа изображений. Сумма по двум индексам по всем пикселям на квадратной матрице (i, j) может быть представлена в виде суммы по одному индексу i , если перенумеровать пиксели с помощью одного индекса. Кроме трехмерного изображения на практике часто используется более простой вариант характеристики двумерного изображения исследуемого объекта.

Таким образом, при разбиении охватывающего пространства, в котором содержится изучаемый объект, можно генерировать на нем меру $\{\mu_i\}$, $(\sum \mu_i = 1, i = 1 \dots N)$ – распределение некоторой эффективной не меняющей свой знак величины. Сам объект называется носителем меры. Понятие мультифрактального формализма базируется на двух основополагающих идеях [6]:

– мультифрактальные меры (характеристики) связаны с исследованием распределения физических или каких-нибудь других величин на геометрическом носителе;

– фрактальная мера может быть представлена взаимосвязанными фрактальными подмножествами, изменяющимися по степенному закону с различными показателями.

Мультифрактальные параметры, полученные с помощью описанного выше метода, позволяют количественно охарактеризовать полупроводниковые светоизлучающие структуры на основе соединений InGaN/GaN. Классификация исследуемых структур по значениям параметров Δ_p (степень упорядоченности) и D_q (обобщенные энтропии (размерности) Реньи) дает возможность выработать объективные критерии связи параметров излучения структур с характером организации наноматериала.

Литература

1. Синергетика и фракталы в материаловедении / В.С. Иванова [и др.]. М.: Наука, 1994. 383 с.
2. Хакен Г. Синергетика. М.: Мир, 1980. 406 с.
3. Пелюхова Е.Б., Фрадкин Э.Е. Синергетика в физических процессах: самоорганизация физических систем. СПб.: Лань, 2001. 180 с.
4. Шмидт В.К. Фрактальный анализ в физико-химии гетерогенных систем и полимеров. Иркутск: Иркутск. ун-т, 2007. 424 с.
5. Кириченко Л.О. Исследование выборочных характеристик, полученных методом мультифрактального флуктуационного анализа // Вестник НТУУ. 2011. Вып. 54. С. 101–110.
6. Юргенс Х., Пайтген Х., Заупе Д. Язык фракталов // В мире науки. 1990. С. 36–44.
7. Встовский Г.В., Колмаков А.Г., Бунин И.Ж. Введение в мультифрактальную параметризацию структур материалов. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. 116 с.

8. Садовский В.Н. Основания общей теории систем. М.: Наука, 1974. 280 с.