

ЭВОЛЮЦИЯ КОРРЕЛЯЦИИ МЕЖСЛОЙНЫХ ШЕРОХОВАТОСТЕЙ В ПРОЦЕССЕ ФОРМИРОВАНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУР

© В.А.Бушнев, В.В.Козак

Многослойные структуры представляют собой периодически повторяющиеся тонкие слои из разных материалов и широко используются при изготовлении рентгеновских зеркал, полупроводниковых, магнитных и других материалов. Одним из основных факторов, ограничивающих эффективность применения подобных структур, является наличие межслойных шероховатостей. В процессе роста многослойной структуры они могут частично повторять шероховатости нижележащих слоев и подложки. Кроме того, в силу статистического характера осаждения атомов на поверхности пленки возникают так называемые собственные шероховатости, не зависящие от степени гладкости предыдущих слоев.

Наиболее общей характеристикой многослойной системы является функция корреляции шероховатостей $C_{ij}(\xi) = \langle f_i(x)f_j(x + \xi) \rangle$, где i, j — номера интерфейсов, $f_i(x)$ — высоты шероховатостей. Многие работы в этом направлении сводились так или иначе к постулированию ее явно-аналитического выражения, к предположениям о равенстве всех среднеквадратичных высот шероховатостей, для продольной корреляции или к их изменению по какому-либо закону [1-6]. Так, для учета вертикальной корреляции обычно используется экспоненциальное представление $C_{ij} \sim \exp(-|z_i - z_j|/L)$, где L — длина вертикальной корреляции, не зависящая от координат межслойных границ z_i [1,2,4,6].

В связи с этим представляется важным нахождение явно-го вида функции корреляции и других параметров системы, которое основано не на априорных предположениях, а вытекает непосредственно из анализа эволюции шероховатостей в процессе роста многослойной структуры. В настоящей работе получено модифицированное уравнение диффузионного типа, описывающее формирование поверхности растущей пленки. На основе решения этого уравнения получено выражение для фактора репликации шероховатостей, явный вид которого играет принципиально важную роль для корректного рассмотрения проблемы.

Фурье-компоненты $f_i(s)$ полных амплитуд межслойных шероховатостей $f_i(x)$ удовлетворяют следующему рекуррентному соотношению [7]:

$$f_i(s) = h_i(s) + a_i(s)f_{i-1}(s), \quad (1)$$

где $h_i(s)$ — спектр собственных шероховатостей, $a_i(s)$ — фактор репликации, нумерация слоев ведется от подложки с $i = 0$, $a_0 = 0$. Шероховатости h_i возникают даже при росте на идеально гладкой поверхности и определяются материалом слоя и технологией его выращивания. Фактор репликации $a_i(s)$ описывает степень передачи неровностей с пространственными частотами s от $(i-1)$ -го слоя к i -му слою. Например, условия $a_i = 0$ и $a_i = 1$ при всех i и s отвечают предельным случаям полностью некоррелированных и (при $h_i = 0$) полностью коррелированных межслойных шероховатостей соответственно.

На основе уравнения Ланжевена, описывающего процесс роста пленки [8], в [7] предложен следующий явный вид для фактора репликации:

$$a_i(s) = \exp(-\nu_i d_i s^2), \quad (2)$$

где ν_i — диффузионная длина, d_i — толщина i -го слоя. Условие $a_i < 1$ при $|s| > 0$ означает преимущественное подавление коротковолновых шероховатостей.

Знание функций корреляции в обратном пространстве $C_{ij}(s) = 4\pi^2 \langle f_i(s) f_j^*(s) \rangle$ позволяет получить среднеквадратичные высоты полных шероховатостей $\sigma(i)$ и длины продольной корреляции $l(i)$ для каждого слоя:

$$\sigma^2(i) = (2\pi)^{-1} \int C_{ii}(s) ds, \quad l(i) = C_{ii}(0)/2\sigma^2(i). \quad (3)$$

Характерная величина изменения $C_{ij}(s)$ от разности $i-j$ равна длине вертикальной корреляции, которая зависит от s . Кроме того, функции $C_{ij}(s)$ определяют угловое распределение брэгговских дифракционных максимумов интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей [1-7,9].

Учтем теперь, что собственные шероховатости разных слоев не коррелируют между собой, т.е. $\langle h_i h_j \rangle = \delta_{ij} g_i(\xi)$, где g_i — автокорреляционная функция i -го слоя. Тогда в простейшей модели статистически эквивалентных межслойных границ, когда $a_i(s) = a$ и $g_i = g_1$ для всех слоев с $i \geq 1$, из (1) получим следующее выражение для корреляционных функций:

$$C_{ij}(s) = g_0(s) + g_1(s) a^{|i-j|} (1 - a^{1M}) / (1 - a^2), \quad (4)$$

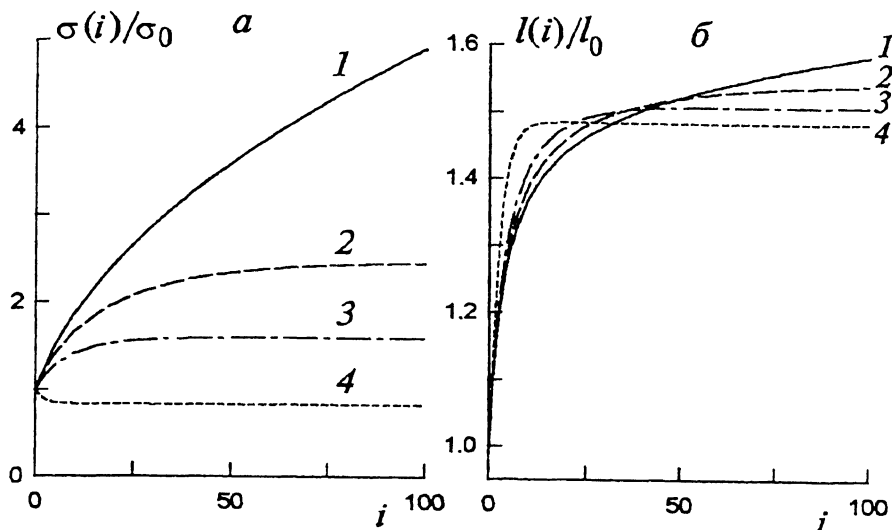


Рис. 1. Зависимость полных среднеквадратичных высот шероховатостей $\sigma(i)$ (а) и длин продольной корреляции $l(i)$ (б) от номера межслойной границы i . Параметры собственных шероховатостей: $\sigma_0 = 2 \text{ \AA}$, $\sigma_1 = 1 \text{ \AA}$, $l_0 = 100 \text{ \AA}$, $l_1 = 150 \text{ \AA}$, толщины слоев $d = 25 \text{ \AA}$, диффузионная длина $\nu = 0.1 \text{ \AA}$. Амплитуда фактора репликации A : 1 — 1 (модель (2) [7]), 2 — 0.98, 3 — 0.95, 4 — 0.8.

где $M = \min\{i, j\}$, $g_0(s)$ и $g_1(s)$ — фурье-компоненты автокорреляционных функций шероховатостей подложки и остальных границ соответственно. Если $g_m(\xi) = \sigma_m^2 \exp(-|\xi|/l_m)$, где $m = 0, 1$, а σ_0 , σ_1 и l_0 , l_1 — среднеквадратичные высоты собственных шероховатостей и длины корреляции для подложки и межслойных границ соответственно, то

$$g_m(s) = 2\sigma_m^2 l_m / (1 + s^2 l_m^2). \quad (5)$$

Расчеты по формулам (3)–(5) показывают, что использование фактора репликации в формуле (2) [7] приводит всегда к неограниченному росту высот шероховатостей с увеличением номера слоя (см. кривые 1 на рис. 1). В то же время из экспериментов следует, что $\sigma(i)$ и $l(i)$ практически не зависят от i при $i \geq 10$ [10, 11]. Можно показать, что единственной причиной такого роста высот шероховатостей является условие $a_i(s) = 1$ при $s = 0$ (см. (2)).

В результате анализа баланса массы частиц вблизи поверхности можно получить следующее уравнение для высоты шероховатостей:

$$\partial f(x, z) / \partial z = \nu \nabla^2 f(x, z) + \eta(x) - \alpha f(x, z), \quad (6)$$

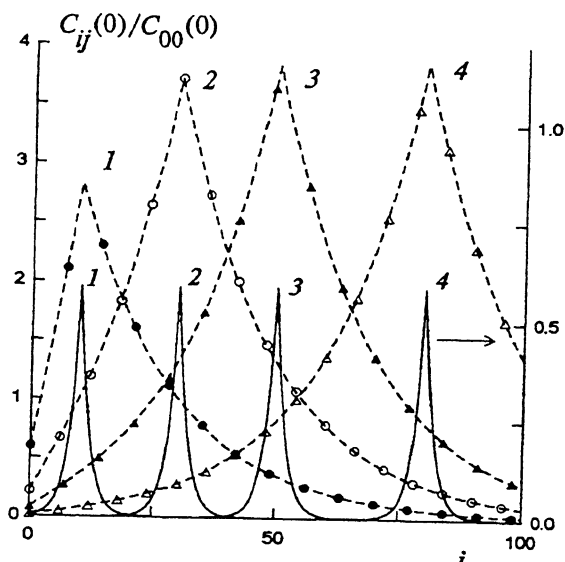


Рис. 2. Функции корреляции шероховатостей $G_{ij}(s)$ в зависимости от номера межслойной границы i при фиксированных значениях j и величине аргумента $s = 0$. Номера слоев j : 1 — 10, 2 — 30, 3 — 50, 4 — 80. Амплитуды фактора репликации $A = 0.95$ (штриховые кривые с точками), $A = 0.6$ (сплошные кривые, правая шкала). Остальные параметры, как на рис. 1.

где $\eta(x)$ — плотность случайных источников, α — феноменологический коэффициент, описывающий вертикальное сглаживание пленки. Уравнение (6) отличается от соответствующего уравнения в [7,8] наличием третьего добавочного слагаемого, которое отвечает за процесс конденсации газа осаждающихся на пленке атомов и их смещение в область с пониженной концентрацией, что аналогично явлению поверхностного натяжения для жидкостей. Величина α зависит от температуры газа и подложки, от материалов, составляющих структуру, и от степени их смачиваемости.

Решение неоднородного уравнения параболического типа (6) приводит к следующему явному виду для фактора репликации, который фактически является фурье-компонентой функции Грина задачи (6):

$$a_i(s) = A_i \exp(-\nu_i d_i s^2), \quad A_i = \exp(-\alpha_i d_i). \quad (7)$$

По сравнению с (2) фактор репликации (7) всегда меньше единицы при $\alpha_i > 0$. Это устраняет отмеченное выше противоречие, связанное с неограниченным ростом $\sigma(i)$, и позволяет моделировать реальные структуры.

На рис. 1 представлены зависимости среднеквадратичной высоты и продольной длины корреляции от числа слоев при разных амплитудах фактора репликации A . Видно, что при $A < 1$, начиная с определенного слоя i_0 , значения $\sigma(i)$ и $l(i)$ выходят на некоторые постоянные уровни. Их величина незначительно уменьшается для $\sigma(i)$ и слабо возрастает для $l(i)$ с увеличением диффузионной длины ν .

Представляет интерес поведение функций $C_{ij}(s)$ в зависимости от разности $i - j$, поскольку характерный масштаб их изменения можно считать равным длине вертикальной корреляции. На рис. 2 приведена серия кривых для некоторых фиксированных значений номера слоя j и двух значений амплитуды A . Видно, что при $A \approx 1$ реализуется ситуация с высокой степенью корреляции, тогда как при достаточно малых значениях A моделируется случай почти полностью некоррелированных шероховатостей.

Таким образом, на основе решения уравнения (6), учитывающего дополнительные механизмы сглаживания межслойных шероховатостей, в работе получен в явном виде фактор репликации, который устраняет существующее в [7] противоречие, связанное с неограниченным ростом среднеквадратичных высот шероховатостей. Решение этой задачи представляет интерес для количественной оценки несовершенства многослойных структур и для понимания процессов формирования межслойных границ в общем случае произвольной корреляции.

Список литературы

- [1] Andreev A. V., Michette A. G., Renwick A. // J. Modern Opt. 1988. V. 35. N 10. P. 1667-1687.
- [2] Phang Y. H., Savage D. E., Kariotis R. et al. // J. Appl. Phys. 1993. V. 74. N 5. P. 3181-3188.
- [3] Payne A. P., Clemens B. M. // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. N 4. P. 2289-3300.
- [4] Ming Z. H., Krol A., Soo Y. L. et al. // Phys. Rev. B. 1993. V. 47. N 23. P. 16373-16381.
- [5] Holy V., Baumbach T. // Phys. Rev. B. 1994. V. 49. N 15. P. 10668-10676.
- [6] Schlomka J.-P., Tolan M., Schwalowsky L. et al. // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. N 4. P. 2311-2317.
- [7] Stearns D. G. // J. Appl. Phys. 1992. V. 71. N 9. P. 4286-4298.
- [8] Edwards S. F., Wilkinson D. R. // Proc. R. Soc. London. Ser. A. 1982. V. 381. N 1. P. 17-28.
- [9] Kaganer V. M., Stepanov S. A., Kohler R. // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. N 23. P. 16369-16372.
- [10] Savage D. E., Schimke N., Phang Y.-H. et al. // J. Appl. Phys. 1992. V. 71. N 7. P. 3283-3293.
- [11] Savage D. E., Phang Y.-H., Rownd J. J. et al. // J. Appl. Phys. 1993. V. 74. N 10. P. 6158-6164.