

Модельные временные зависимости средней высоты и шероховатости поверхности тонкой пленки / В.Г. Дубровский // Научное приборостроение. — 1992. — Т.2. — N 4: Поверхность и методы ее исследования. — С. 74—84.

В работе Д.Кашиева "Growth kinetics of dislocation-free interfaces and growth mode of thin films" была предложена аналитическая модель роста тонкой пленки, наносимой на поверхность твердого тела молекулярным пучком. Эта модель позволила аналитически описать кинетику средней высоты пленки. В данной работе модель Кашиева обобщена с тем, чтобы определить кинетику шероховатости рельефа пленки, что является чрезвычайно важным в оптике и микроэлектронике. Получены аналитические выражения для средней высоты и шероховатости, которые находятся в хорошем согласии с результатами Монте-Карло моделирования роста соединений A_3B_5 в методе молекулярно-пучковой эпитаксии. Библ. 13 назв. Ил. 3.

В. Г. Дубровский

(Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург)

МОДЕЛЬНЫЕ ВРЕМЕННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ СРЕДНЕЙ ВЫСОТЫ И ШЕРОХОВАТОСТИ ПОВЕРХНОСТИ ТОНКОЙ ПЛЕНКИ

In the paper "Growth kinetics of dislocation-free interfaces" and growth mode of thin films by D. Kashchiev, there has been proposed an analytical model for the growth of surface thin film deposited by a molecular beam. This model allows an analytical description of the kinetics for medium film thickness. In this paper, the Kashchiev model is generalized in order to find the kinetics of film surface roughness, which is of particular importance in optics and microelectronics. Analytical expressions for medium thickness and surface roughness are obtained which show a fairly good agreement with the results of Monte-Carlo simulations of the molecular beam epitaxial growth of A_3B_5 compounds.

Модель полислоного роста

Рассмотрим процесс формирования объемной пленки, протекающий по механизму, описанному в [1, 2]. В некоторый момент времени плоская подложка, свободная от винтовых дислокаций, приведена в контакт с пересыщенной газовой фазой. Латеральные взаимодействия адсорбированных молекул ведут к нуклеации зародышей первого адсорбционного слоя с высотой h_1 . Последующий латеральный рост зародышей и их слияние друг с другом приводят к образованию сплошных участков первого слоя. Осаждение молекул из газовой фазы на этих сформированных участках, в свою очередь, приводит к нуклеации зародышей второго

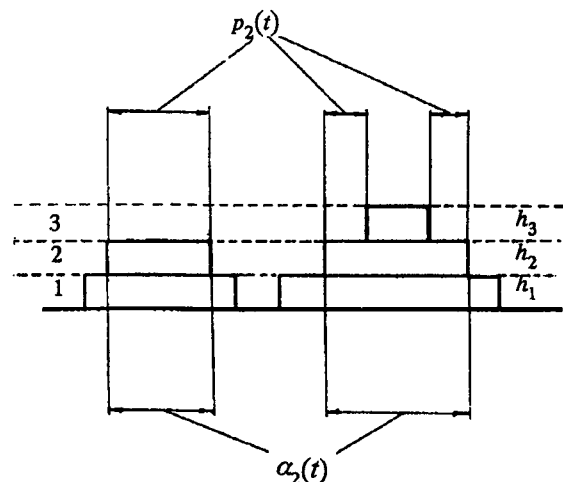


Рис. 1. Профиль полислоной пленки в момент времени t .

$\alpha_2(t)$ — заполненность поверхности вторым слоем,
 $p_2(t)$ — доля свободной части поверхности, h_i —
 высоты различных слоев.

зародышей второго слоя с высотой. Очевидно, что в результате зарождения кластеров каждого последующего слоя на сформированных участках предыдущего образуется трехмерная адсорбционная пленка, профиль которой схематически изображен на рис. 1. Поскольку поверхности каждого слоя имеют различные геометрические и энергетические характеристики, кинетика заполнения разных слоев будет различной.

Если поверхность представляет собой идеальную периодическую решетку, или имеющиеся на ней примеси и дефекты распределены пространственно-однородно, процесс латерального роста

тоже является пространственно-однородным. Тогда можно ввести не зависящие от пространственной координаты в плоскости поверхности заполненности подложки i -м слоем $g_i(t)$ и доли свободной части поверхности i -го слоя $p_i(t)$ (см. рис. 1)

$$\begin{aligned} g_i(t) &= \frac{S_i(t)}{S}, \quad i = 1, 2, \dots, \quad g_0 \equiv 1, \\ p_i(t) &= g_i(t) - g_{i+1}(t), \quad i = 0, 1, \dots, \end{aligned} \quad (1)$$

где $S_i(t)$ — площадь, покрытая i -м слоем в момент времени t , S — полная площадь поверхности подложки.

В отсутствие "крыш", т. е. частей $(i+1)$ -го слоя, нависающих над еще не заполненными участками i -го слоя, функции $p_i(t)$ удовлетворяют условиям: $p_i(t) \geq 0$, $\sum_{i \geq 0} p_i(t) = 1$ и могут интерпретироваться как вероятности обнаружения случайной точки рельефа пленки на высоте $H_i = h_1 + h_2 + \dots + h_i$. Следовательно, средняя высота и шероховатость пленки определяются выражениями

$$\begin{aligned} H(t) &\equiv \langle H \rangle_t = \sum_{i \geq 1} H_i p_i(t), \\ \sigma^2(t) &\equiv \langle (H - H(t))^2 \rangle_t = D(t) - H^2(t), \end{aligned} \quad (2)$$

$$D(t) \equiv \langle H^2 \rangle_t = \sum_{i \geq 1} H_i^2 p_i(t). \quad (3)$$

Пусть функция $f_1(t)$ описывает кинетику формирования первого слоя на свободной от адсорбата части подложки, так что

$$\begin{aligned} g_1(t) &= 1 - \exp[-f_1(t)], \\ f_1(0) &= 0, \quad f_1(t) \rightarrow \infty \text{ при } t \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (4)$$

В случае, когда коагуляция кластеров происходит по механизму твердофазного спекания, функция $f_1(t)$ определяется из самосогласованной модели Колмогорова [3, 4]. Предложенная в [3] самосогласованная модель формирования монослоя дает аналитическое выражение, справедливое для случая неполной конденсации. Большинство используемых в литературе [1, 5] теоретических аппроксимаций для $f_1(t)$ имеет вид $f_1(t) = (\omega_1 t)^{m_1}$, где $m_1 \geq 1$, $t_1 = 1/\omega_1$ есть характерное время заполнения первого слоя.

Однако в настоящей работе мы не будем вводить никаких кинетических ограничений, считая $f_1(\omega_1 t)$ произвольной функцией, возрастающей при $\omega_1 t \gg 1$ не медленнее первой степени. Поэтому все полученные ниже результаты будут справедливы для любых режимов латерального роста кластеров.

Если функции $f_i(t)$, подобно $f_1(t)$, описывают кинетику роста i -го слоя на полностью сформированном предыдущем слое, заполненности $g_{i+1}(t)$ и $g_i(t)$ связаны интегральным соотношением [6]

$$g_{i+1}(t) = \int_0^t dt' F_{i+1}(t-t') g_i(t'), \quad i = 1, 2, \dots$$

$$F_{i+1}(t) \equiv -\frac{d}{dt} \exp[-f_{i+1}(t)]. \quad (5)$$

Данная формула связи означает, что заполненность $i+1$ -го слоя зависит только от собственных кинетических характеристик (ω_i и $f_i(t)$, ω_i — частота заполнения i -го слоя) и степени заполненности предыдущего слоя. Преобразование Лапласа выражений (2) — (5) дает

$$\tilde{H}(\omega) = \sum_{i \geq 1} H_i \tilde{p}_i(\omega), \quad \tilde{D}(\omega) = \sum_{i \geq 1} H_i^2 \tilde{p}_i(\omega), \quad (6)$$

$$\tilde{g}_i(\omega) = \omega^{-1} [1 - \varphi_1(\omega)], \quad (7)$$

$$\tilde{g}_{i+1}(\omega) = [1 - \varphi_{i+1}(\omega)] \tilde{g}_i(\omega), \quad i = 1, 2, \dots, \quad (8)$$

$$\varphi_i(\omega) \equiv \omega \int_0^{\infty} dt \exp[-\omega t - f_i(t)]. \quad (9)$$

Здесь функции с тильдами обозначают лаплас-образы соответствующих величин, т. е. $\tilde{p}_i(\omega) = \omega \int_0^{\infty} dt \exp(-\omega t) p_i(t)$ и т. д. При получении (7) — (9) использовались известные свойства преобразования Лапласа [7]

$$\mathcal{L}(1) = \omega^{-1}, \quad \mathcal{L} \frac{df}{dt} = \omega \mathcal{L}(f) - f(0),$$

$$\mathcal{L} \left[\int_0^t dt' f(t-t') g(t') \right] = \mathcal{L}(f) \mathcal{L}(g).$$

Из формул (1), (7) и (8) для лаплас-образов вероятностей $p_i(t)$ имеем

$$\tilde{p}_i(\omega) = \varphi_{i+1}(\omega) \prod_{j=2}^i [1 - \varphi_j(\omega)] \tilde{g}_1(\omega) = \frac{\varphi_{i+1}(\omega)}{\omega} \prod_{j=1}^i [1 - \varphi_j(\omega)]. \quad (10)$$

Таким образом, если зависимости $f_i(t)$ известны, обратное преобразование

$$p_i(t) = (2\pi i)^{-1} \int_{\lambda-i\infty}^{\lambda+i\infty} d\omega e^{\omega t} \frac{\varphi_{i+1}(\omega)}{\omega} \prod_{j=1}^i [1 - \varphi_j(\omega)]$$

(λ — вещественная константа, лежащая правее всех особенностей подынтегральной функции) позволяет, в принципе, определить заполненность различ-

ных слоев адсорбата и, следовательно, среднюю высоту и шероховатость пленки.

Прежде, чем перейти к аналитическому исследованию выражений (6), (10), отметим один важный частный случай: $f_1(t) = f_2(t) = f_3(t) = \dots = \omega_1(t)$, $h_1 = h_2 = h_3 = \dots$. Физически он соответствует так называемому нормальному механизму роста [1], при котором адсорбированные молекулы немедленно встраиваются в адсорбционные места и практически не диффундируют по поверхности. Равенство кинетических параметров и высот всех слоев означает, что осаждение происходит на собственную подложку. Тогда из (9), (10) имеем

$$\tilde{p}_i(\omega) = \omega^{-1} \varphi_1(\omega) [1 - \varphi_1(\omega)]^i = \omega^i / (\omega + \omega_1)^{i+1}.$$

Взяв обратное преобразование Лапласа (10) и учитывая, что в рассматриваемом случае $H_i = h_1 i$, получаем

$$p_i(t) = \frac{(\omega_1 t)^i}{i!} \exp(-\omega_1 t),$$

$$H(t) = h_1 \omega_1 t, \quad \sigma^2(t) = h_1^2 \omega_1 t. \quad (11)$$

Таким образом, модель полислоного роста в простейшем случае нормального механизма заполнения при напылении на собственную подложку решается точно и приводит к пуассоновскому распределению случайных точек рельефа по высотам H_i . Уже на основании приведенного простого анализа можно заключить, что средняя высота и квадрат шероховатости пленки, по крайней мере при $\omega_1 t \gg 1$ (полностью заполненный первый слой), являются линейно растущими функциями времени. Формула (11) для $H(t)$ очевидна: количество адсорбционного на подложке вещества растет пропорционально времени напыления [1, 2, 8, 9]. Выражение (11) показывает, что шероховатость поверхности пленки тоже возрастает со временем, причем $\sigma(t) \sim t^{1/2}$. Этот результат качественно согласуется с данными эксперимента и численного моделирования МПЭ-роста [10,11], но сильно отличается от вывода работы [9], по которому $\sigma(t) \rightarrow \text{const}$. Данная, качественно неверная зависимость шероховатости от времени является результатом принятого в [8,9] "пирамидального" механизма роста, который не учитывает реальную кинетику заполнения верхних слоев.

При пуассоновском распределении случайных точек рельефа для отношения квадрата шероховатости к средней высоте в приведенных величинах имеем

$$\left[\frac{\sigma^2(t)}{h_1^2} \right] / \left[\frac{H(t)}{h_1} \right] = 1.$$

В связи с этим возникает важный вопрос: каким будет асимптотическое отношение указанных величин при других механизмах латерального роста и возможно ли отыскать режимы, при которых это отношение будет минимальным? Исследованию данного вопроса и посвящен следующий раздел.

Аналитические выражения для средней высоты и шероховатости пленки. Выбор оптимального режима роста

Перейдем к изучению процесса осаждения молекул из газовой фазы на инородную подложку. Для понимания существа дела будем считать, что уже второй слой адсорбата "забывает" о существовании подложки, так что формирование 2-го, 3-го и т.д. слоев идет точно так же, как при напылении на собственную подложку. В этом случае, согласно [1] $h_1 \neq h_2 = h_3 = \dots$, $f_1 \neq f_2 = f_3 = \dots$, $\omega_1 \neq \omega_2 = \omega_3 = \dots$. Физически это предполагает отсутствие дальнедействующих адсорбционных потенциалов на поверхности. Для высоты i -го слоя над поверхностью подложки имеем

$$H_i = h_1 - h_2 + i h_2, \quad H_i^2 = (h_1 - h_2)^2 + 2 h_2 (h_1 - h_2) + h_2^2 i^2. \quad (12)$$

Общая формула связи (10) сводится к выражению

$$\tilde{p}_i(\omega) = \varphi_2(\omega) [1 - \varphi_2(\omega)]^{i-1} \tilde{g}_1(\omega), \quad (13)$$

где функция $\varphi_2(\omega)$ по-прежнему определяется формулой (9). Подстановка (12), (13) в (6) приводит к выражениям

$$\tilde{U}(\omega) = \frac{g_1(\omega)}{\varphi_2(\omega)}, \quad \tilde{V}(\omega) = \left[\frac{2}{\varphi_2(\omega)} - (3 - 2\nu) \right] \tilde{U}(\omega), \quad (14)$$

Здесь введены новые безразмерные функции

$$U(t) = \frac{H(t)}{h_2} - (\nu - 1) g_1(t), \quad V(t) = \frac{D(t)}{h_2^2} - (\nu - 1)^2 g_1(t),$$

где $\nu \equiv h_1 / h_2$ — отношение высот первого и последующих слоев. Уравнения (14) в пространстве оригиналов представляют собой замкнутые интегральные уравнения для неизвестных функций $U(t)$ и $V(t)$. Они могут быть решены точно для случая $f_2(t) = \omega_2 t$ (нормальный режим заполнения верхних слоев) и произвольной функции $f_1(\omega_1 t)$, где ω_1, ω_2 — характерные частоты заполнения первого слоя на чистой подложке и верхних слоев друг на друге. Подставляя значение интеграла (9) $\varphi_2(\omega) = \omega / (\omega + \omega_2)$ в (14) и взяв обратное преобразование Лапласа, получаем

$$U(t) = g_1(t) + \omega_2 \int_0^t dt' g_1(t'), \quad (15)$$

$$V(t) = (2\nu - 1) U(t) + 2\omega_2 \int_0^t dt' U(t'). \quad (16)$$

При выводе формул (15), (16) использовалось свойство преобразования Лапласа

$$\mathcal{L} \left[\int_0^t dt' f(t') \right] = \omega^{-1} \mathcal{L}(f).$$

Возвращаясь к исходным функциям $H(t)$, $\sigma(t)$ и используя определение (4), находим следующие точные аналитические решения для средней высоты и шероховатости рельефа пленки

$$\frac{H(t)}{h_2} = \nu g_1(\omega_1 t) - A_{12}(\omega_1 t) + \omega_2 t, \quad (17)$$

$$\frac{\sigma^2(t)}{h_2^2} = \nu [\nu g_1(\omega_1 t) - 2 A_{12}(\omega_1 t) + 2 \omega_2 t] \times \\ \times \exp(-f_1(\omega_1 t)) + A_{12}(\omega_1 t) [A_{12}(\omega_1 t) (2 B_1(\omega_1 t) - 1) - 1] + \omega_2 t. \quad (18)$$

Здесь $g_1(\omega_1 t) = 1 - \exp[-f_1(\omega_1 t)]$, функции $A_{12}(x)$ и $B_i(x)$ определяются формулами

$$A_{12}(x) = \frac{\omega_2}{\omega_1} K_1(x), \quad B_i(x) \equiv \frac{I_i(x)}{K_i^2(x)}, \quad (19)$$

$$K_i(x) \equiv \int_0^x dx' \exp[-f_i(x')], \quad I_i(x) \equiv \int_0^x dx' x' \exp[-f_i(x')], \quad i = 1, 2. \quad (20)$$

Выражение для средней высоты пленки (17) совпадает с приведенными в [1]. При $\omega_1 t \gg 1$ получим

$$\frac{H(t)}{h_2} = \nu - A_{12}(\infty) + \omega_2 t,$$

$$\frac{\sigma^2(t)}{h_2^2} = A_{12}(\infty) [A_{12}(\infty) (2 B_1(\infty) - 1) - 1] + \omega_2 t.$$

Следовательно, в рассматриваемом случае произвольного механизма заполнения первого слоя и нормального режима роста всех верхних слоев друг на друге асимптотики средней высоты и шероховатости отличаются от пуассоновских зависимостей (11) лишь сдвигом по оси абсцисс. После образования нескольких первых слоев ($\omega_1 t \gg 1$) отношение $\frac{\sigma^2(t)}{h_2^2} / \frac{H(t)}{h_2}$ снова выходит на постоянное значение, равное единице. Это объясняется тем, что асимптотический рельеф зависит только от кинетики заполнения верхних слоев, которая аппроксимировалась той же линейной функцией $f_2(t) = \omega_2 t$, что и в случае нормального роста на собственной подложке.

Обратимся теперь к общему случаю произвольной зависимости $f_2(\omega_2 t)$, т. е. произвольному режиму роста слоев. Аналитические решения для всех $t \geq 0$ здесь найти не удастся, однако построение асимптотических решений при $\omega_2 t \gg 1$ опять не вызывает затруднений. Для этого разложим функцию u_2 в (9) в ряд по ω / ω_2 , считая $\omega / \omega_2 \ll 1$

$$\varphi_2(\omega) = \frac{\omega}{\omega_2} \int_0^{\infty} dx \exp \left[-\frac{\omega}{\omega_2} x - f_2(x) \right] \approx \frac{\omega}{\omega_2} [K_2(\infty) - I_2(\infty) \frac{\omega}{\omega_2}] ,$$

$$\frac{1}{\varphi_2(\omega)} \approx \frac{I_2(\infty)}{K_2^2(\infty)} + \frac{\omega_2}{K_2(\infty) \omega} . \quad (21)$$

Величины $I_2(\infty)$ и $K_2(\infty)$ есть значения интегралов в (20) при $x \rightarrow \infty$. Подставляя (21) в (14), после некоторых вычислений, аналогичных приведенным выше при изучении случая $f_2(t) = \omega_2 t$, получаем следующие аналитические выражения для средней высоты и шероховатости

$$\frac{H(t)}{h_2} = [\nu + B_2(\infty) - 1] g_1(\omega_1 t) - C_{12}(\omega_1 t) + \frac{\omega_2 t}{K_2(\infty)} , \quad (22)$$

$$\frac{\sigma^2(t)}{h_2^2} = B_2(\infty) [B_2(\infty) - 1] g_1(\omega_1 t) + [\nu + B_2(\infty) - 1] \times$$

$$\times \left[(\nu + B_2(\infty) - 1) g_1(\omega_1 t) - 2 C_{12}(\omega_1 t) + \frac{2 \omega_2 t}{K_2(\infty)} \right] \times$$

$$\times \exp [-f_1(\omega_1 t)] + C_{12}(\omega_1 t) [C_{12}(\omega_1 t) (2 B_1(\omega_1 t) - 1) -$$

$$- (2 B_2(\infty) - 1)] + (2 B_2(\infty) - 1) \frac{\omega_2 t}{K_2(\infty)} , \quad (23)$$

где $C_{12}(x) \equiv \frac{A_{12}(x)}{K_2(\infty)} = \frac{\omega_2 K_1(x)}{\omega_1 K_2(\infty)}$. Отметим, что формула (22) устраняет допущенную в [1] неточность в вычислении первых двух членов (обращающихся в константу при $\omega_1 t \gg 1$), которая связана с ошибочным вычислением асимптотик. Формула (23) дает новое аналитическое представление для шероховатости пленки при произвольном режиме латерального роста верхних слоев.

Исследование выражений (22), (23) позволяет сделать следующие выводы. Полученные асимптотические решения обладают правильным поведением и при малых t $H(0) = \sigma(0) = 0$. Численное решение интегральных уравнений (14) для тестовых примеров показывает, что выражения (22), (23) могут с хорошей точностью применяться для всех значений t . При $f_2(t) = \omega_2 t$ решения (22), (23) переходят в (17), (18), поскольку $I_2(\infty) = K_2(\infty) = B_2(\infty) = 1$. Далее, формулы (17), (18) при $f_1(t) = \omega_1 t$, $\omega_1 = \omega_2$, $\nu = 1$ (нормальный механизм латерального роста и осаждение на собственную подложку) дают пуассоновские зависимости (11). Асимптотики выражений (22), (23) при $\omega_1 t \gg 1$ имеют вид

$$\frac{H(t)}{h_2} = \nu + B_2(\infty) - 1 - C_{12}(\infty) + \frac{\omega_2 t}{K_2(\infty)} , \quad (24)$$

$$\frac{\sigma^2(t)}{h_2^2} = B_2(\infty) [B_2(\infty) - 1] + C_{12}(\infty) [C_{12}(\infty) (2B_1(\infty) - 1) - (2B_2(\infty) - 1)] + [2B_2(\infty) - 1] \frac{\omega_2 t}{K_2(\infty)}. \quad (25)$$

Из (24) и (25) следует, что отношение квадрата шероховатости к средней высоте при $\omega_2 t \gg 1$ стремится к константе, которая в случае произвольного механизма роста верхних слоев отлична от единицы

$$\frac{\sigma^2(t)}{h_2^2} \Big/ \frac{H(t)}{h_2} \rightarrow 2B_2(\infty) - 1 \equiv q(\infty).$$

Величина $q(\infty)$ не зависит от характерной частоты заполнения слоев и определяется только поведением функции, поскольку, согласно (19), (20)

$$q(\infty) = \frac{2 \int_0^\infty dx x \exp(-f_2(x))}{\left[\int_0^\infty dx \exp(-f_2(x)) \right]^2 - 1}. \quad (26)$$

При использовании степенных аппроксимаций $f_i(x) = x^{m_i}$, $i = 1, 2$ интегралы $K_i(x)$ и $I_i(x)$ в (20) сводятся к неполным гамма-функциям

$$K_i(x) = \gamma \left(1 + \frac{1}{m_i}, x^{m_i} \right) + x \exp(-x^{m_i}),$$

$$I_i(x) = \frac{\gamma}{2} \left(1 + \frac{2}{m_i}, x^{m_i} \right) + \frac{x^2}{2} \exp(-x^{m_i}),$$

$$\gamma(y, z) \equiv \int_0^z d\xi \xi \exp(-\xi) \xi^{y-1}.$$

Подстановка этих выражений в общее решение (22), (23) определяет явную зависимость средней высоты и шероховатости от времени при степенных законах латерального роста слоев. В этом случае величина $q_{m_2}(\infty)$ зависит от показателя m_2

$$q_{m_2}(\infty) = \Gamma \left(1 + \frac{2}{m_2} \right) \Gamma^2 \left(1 + \frac{1}{m_2} \right) - 1, \quad (27)$$

где $\Gamma(y) \equiv \int_0^\infty d\xi \xi \exp(-\xi) \xi^{y-1}$ — полная гамма-функция. Значение $q_{m_2}(\infty)$ заметно уменьшается с увеличением m_2 , например, $q_1(\infty) = 1$, $q_2(\infty) = 0,31$, $q_3(\infty) = 0,14$, что соответствует переходу к более гладкому рельефу пленки.

Значение показателя m_2 связано с зависимостью скорости латерального роста кластеров от времени. Согласно [9, 12], типичная для конденсации тонких пленок зависимость $v(x)$ представляет собой степенную функцию $v(x) \sim x^\mu$. Самоогласо-

ванная модель формирования моносоля, развитая в [3, 4], приводит к диффузионному закону роста для больших x : $v(x) \sim x^{-1/2}$. Используя формулу Колмогорова [1,3,4] для $f_2(x)$ и учитывая, что по прошествии характерного времени стадии нуклеации x_1 зарождение прекращается, имеем при больших x следующее выражение:

$$f(x) \sim \int_0^{x_1} dx I(x) \left[\int_{x_1}^x dx' v(x') \right]^2. \quad (28)$$

Подставляя в (28) $v_2(x) \sim x^{\mu_2}$, получаем связь между показателем m_2 , определяющим асимптотическое отношение квадрата шероховатости к средней высоте, и величиной μ_2

$$m_2 = 2\mu_2 + 2. \quad (29)$$

При диффузионном законе роста ($\mu_2 = -1/2$) $m_2 = 1$ и $q(\infty) = 1$. При $\mu_2 < -1/2$ $q(\infty) > 1$, т. е. рельеф пленки становится более шероховатым, тогда как при $\mu_2 > -1/2$ $q(\infty) < 1$, что соответствует "выглаживанию" поверхности пленки.

Таким образом, аналитические решения, описывающие динамику средней высоты и шероховатости поверхности пленки, позволяют оптимизировать процесс напыления с целью получения более гладкой поверхности. Как показывает выражение (22), для этого необходимо подбирать режимы латерального роста кластеров с максимально возможными значениями показателя μ_2 . Если на основе теоретических расчетов или экспериментальных измерений зависимость $v(x)$ определена, выражения (27), (29) дают количественные характеристики шероховатости асимптотического рельефа.

Теория и компьютерное моделирование

В данном разделе теоретические зависимости средней высоты и шероховатости пленки от времени напыления (22), (23) сравниваются с результатами компьютерного моделирования роста соединений A_3B_5 (кристаллы типа цинковой обманки) в методе молекулярно-пучковой эпитаксии. Предложенная в работе [13] модель роста строилась следующим образом. Рассматривалось напыление двухкомпонентного потока As_2 и Ga на подложку типа цинковой обманки с гранью (001), разориентированной к грани (011) на $0,95^\circ$. Ширина террасы, т. е. расстояние между

ступенями, равнялась 120 \AA . Считалось, что в процессе роста пленки не происходит реконструкции поверхности. Динамика роста описывалась гамильтонианом межатомного взаимодействия с учетом ближайших и вторых соседей. Кинетические вероятности процессов латеральной диффузии и десорбции брались в аррениусовской форме с учетом зависимости активационных барьеров от занятости соседних узлов. Важно отметить, что скорость роста двухкомпонентных соединений A_3B_5 определяется исключительно потоком металла. В отсутствие потока и при включенном источнике As рост не происходит. Поэтому зависимость средней

ходит. Поэтому зависимость средней высоты пленки от времени определяется так же, как и при напылении однокомпонентных пучков.

На рис. 2 представлены зависимости $H(t)$ и $\sigma(t)$, полученные по данным компьютерного моделирования и найденные по формулам (22), (23) с функциями $A_{12}(x)$, $I_i(x)$, $K_i(x)$, $B_i(x)$ в форме (19), (20). Графики зависимости $H(t)$ имеют слабый провал в области малых t , а затем выходят на линейную функцию. График $\sigma(t)$, полученный по данным компьютерного моделирования (рис.3), имеет вид корневой зависимости $\sigma(t) \sim t^{1/2}$ с наложенными на нее осцилляциями, которые исчезают при увеличении времени напыления.

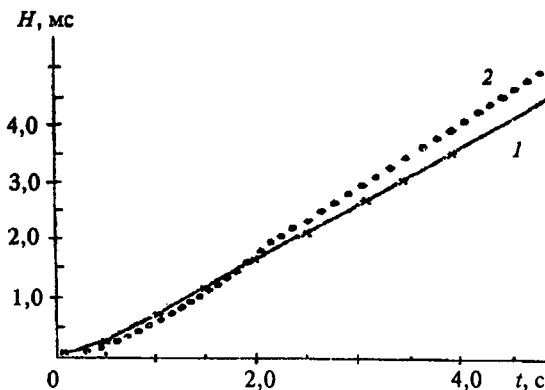


Рис. 2. Зависимость средней высоты пленки от времени напыления.

1 — данные компьютерного моделирования роста соединений GaAs при соотношении потоков $R_{As_2} / R_{Ga} = 3$, $T = 850$ К; 2 — теоретическая кривая при $\nu = 1$, $f_2(x) = x^{m_2}$, $m_2 = 3$, $\omega_1 = 0,6$ с $^{-1}$, $\omega_2 = 0,8$ с $^{-1}$.

Локальные минимумы шероховатости пленки соответствуют характерным временам формирования 1-го, 2-го и т.д. монослоев при послойном механизме роста. Исчезновение осцилляций означает переход от послойного к островковому механизму роста, когда для формирования верхних слоев не требуется полного заполнения предыдущего слоя. Теоретическая кривая $\sigma(t)$ (см. рис. 3) имеет лишь один локальный минимум. Это связано с использованным при выводе формулы (23) предположением $f_1 \neq f_2 = f_3 \dots$, $\omega_1 \neq \omega_2 \neq \omega_3 = \dots$ (кинетика формирования всех верхних слоев одинакова). Для получения формирования локальных минимумов следует ввести усовершенствованную модель $f_1 \neq f_2 \neq \dots \neq f_r = f_{r+1} = \dots$, где $\omega_1 \neq \omega_2 \neq \dots \neq \omega_r = \omega_{r+1} = \dots$, где r есть номер монослоя, после заполнения которого наличие подложки не влияет на характер дальнейшего роста пленки [1]. После фактического исчезновения осцилляций ($t \geq 3$ с, $H \geq 3$ h, h — высота монослоя) теоретическая и расчетная кривые совпадают. В соответствии с формулой (27) асимптотическое отношение квадрата шероховатости к средней высоте $q_3(\infty) = 0,14$ ($m_2 = 3$). Поэтому при $t = 4$ с высота пленки равняется 3,75 монослоев, тогда как шероховатость имеет значение порядка 0,7 монослоя.

Проведенный анализ полислоеного роста тонких пленок позволяет сделать следующие выводы.

1. Простейшая модель нормального механизма формирования слоев при напылении однокомпонентного газа на собственную подложку приводит к пуассоновскому распределению точек рельефа по высоте.

2. После заполнения нескольких первых слоев средняя высота и квадрат шероховатости являются линейно растущими функциями времени. Этот вывод подтверждается как аналитическими выражениями для $H(t)$ и $\sigma(t)$, так и результатами компьютерного моделирования.

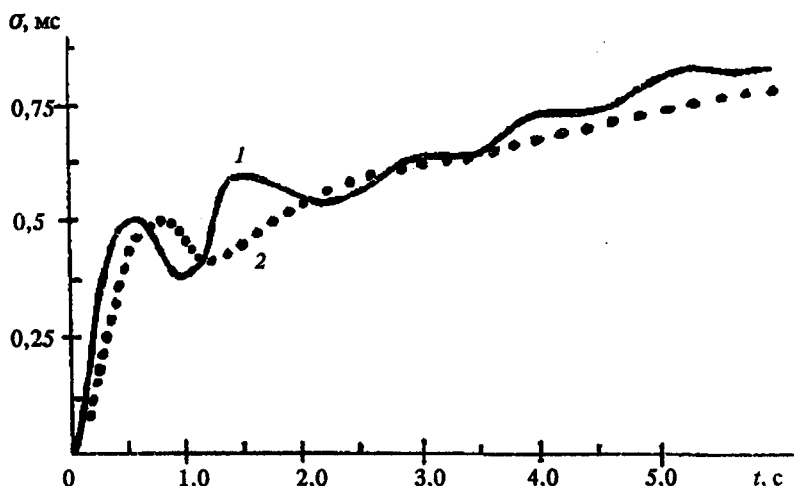


Рис. 3. Зависимость шероховатости пленки от времени напыления.
1 — данные компьютерного моделирования роста соединений GaAs; 2 — теоретическая кривая. Значения параметров те же, что и на рис. 2.

3. Параметр $q(\infty)$, определяющий качество поверхности пленки, зависит от механизма латерального роста. Поэтому дальнейшее развитие теории формирования объемных пленок должно быть связано с изучением детальной кинетики частиц в адсорбционных слоях.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kashchiev D. // J. Cryst. Growth. — 1977. — V.40. — P.29—46.
2. Kashchiev D., van der Eerden J. P., van Leeuwen C. // Ibid. — P.47—58.
3. Dubrovskii V. G. // Phys. Stat. Sol. (b) — 1992. — V.171. — P.345—356.
4. Дубровский В. Г. // Научное приборостроение. - 1991. — №2. — С.75—88.
5. Беленький В. З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации: Феноменологический подход. М., 1980.
6. Веттер К. Электрохимическая кинетика. М., 1967.
7. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М., 1984.
8. Трофимов В. И., Осадченко В. А. // Поверхность. — 1986. №6 — С.29—36.
9. Трофимов В. И., Осадченко В. А. // Там же. — 1987. — №9. — С.5—26.
10. Singh J., Bajaj K. K. // Superlattices and microstructures. — 1986. — V.2, N3. — P.185—195.
11. Thomsen M., Madhukar A. // Jap. J. Appl. Phys.1. — 1988. — V.27, N12. — P.2205—2208.
12. Трофимов В. И. // Поверхность. — 1989. — N12. — С.15—21.
13. Филаретов А. Г., Цырлин Г. Э. // ФТТ. — 1991. — Т.3, N5. — С.1329—1336.