

Определение эффективной шероховатости поверхности и угловой зависимости коэффициента отражения в рентгеновском диапазоне длин волн по данным атомно-силовой микроскопии

Н.В.Востоков, С.В.Гапонов, В.Л.Миронов¹, А.И.Панфилов,
Н.И.Полушкин, Н.Н.Салашенко, А.А.Фраерман

ИФМ РАН, 603600, Нижний Новгород, ГСП-105, Россия

M.N.Haidl

Carl Zeiss, D – 73446, Oberkochen, Germany

В работе методами рентгеновской рефлектометрии и атомно-силовой микроскопии (АСМ) исследованы шероховатости стеклянных пластин, применяемых в качестве подложек для изготовления многослойных интерференционных зеркал рентгеновского диапазона длин волн. Предложен метод расчета параметров отражения рентгеновского излучения от шероховатой поверхности по ее профилю, полученному с помощью атомно-силового микроскопа. Показано, что величина среднеквадратичной шероховатости и угловая зависимость коэффициента отражения в рентгеновском диапазоне длин волн, рассчитанные непосредственно по АСМ профилям поверхности стеклянных подложек, хорошо согласуются с результатами рентгеновских измерений.

Введение

В настоящее время для определения шероховатости поверхности подложек применяются в основном два метода - рентгеновская рефлектометрия и атомно-силовая микроскопия [1-5]. В рентгеновской рефлектометрии для оценки шероховатости поверхности в основном используют две методики: измерение угловой зависимости интенсивности зеркальной компоненты отраженного излучения [5,7] и измерение углового распределения рассеянной компоненты рентгеновского излучения [4]. Общим недостатком этих методик является то, что для интерпретации результатов необходимо привлекать модельные представления о характере шероховатостей поверхности, при этом произвол в выборе моделей приводит к существенному разбросу получаемых статистических параметров. Атомно-силовая микроскопия является прямым методом, позволяющим получать рельеф поверхности в виде функции $z = f(x, y)$ и рассчитывать все ее статистические характеристики. Однако АСМ измерения имеют свою специфику. Многочисленные исследования показали, что для различных материалов наблюдается масштабная зависимость среднеквадратичной шероховатости поверхности от размера кадра зондового микроскопа [1,2,5,8]. При этом распределение по высотам в кадре часто не является гауссовым, что приводит к существенным расхождениям в оценке среднеквадратичной шероховатости поверхности по данным АСМ и рентгеновской рефлектометрии, где гауссова модель поверхности применяется достаточно широко [5]. В настоящей работе проведен сравнительный анализ результатов измерений среднеквадратичной шероховатости поверхности, полученных методами атомно-силовой микроскопии и рентгеновской рефлектометрии для подложек из стекла.

Эксперимент

Исследования рельефа поверхности стеклянных подложек методом атомно-силовой микроскопии проводились с помощью АСМ "Solver P4-SPM" фирмы NT MDT (г. Зеленоград, Россия). Минимальный шаг сканирования составлял 0.01 нм, максимальное поле обзора составляло 10 мкм, кадр представлял собой массив данных размерностью 1024×1024

¹ E-mail: mironov@ipm.sci-nnov.ru

элементов. При исследовании шероховатости подложек снималась серия кадров с одинаковыми размерами с различных участков поверхности. По каждому кадру рассчитывалась среднеквадратичная шероховатость σ :

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N^2} \sum_{ij} (Z_{ij} - \bar{Z})^2} , \quad (1)$$

где: Z_{ij} - значение высоты рельефа в точке поверхности с координатами (i,j) , измеренное с помощью АСМ, $\bar{Z}$ - средняя высота в кадре, N - количество точек в строке сканирования. Затем вычислялось среднее значение $\bar{\sigma}$ по нескольким кадрам.

Наряду с АСМ исследованиями рельефа были проведены измерения угловой зависимости коэффициента отражения зеркальной компоненты рентгеновского излучения от тех же подложек. Измерения проводились на рентгеновском дифрактометре "ДРОН - 3" в диапазоне жесткого рентгеновского излучения ($\lambda_{CuK-\alpha} = 0.154$ нм) при углах скольжения близких к 0° . Влияние среднеквадратичной шероховатости поверхности $\bar{\sigma}$ на угловую зависимость коэффициента отражения учитывалось посредством введения фактора Дебая-Валлера [6]:

$$R(\vartheta) = R_0(\vartheta) \exp \left\{ -\frac{16\pi^2 \bar{\sigma}^2}{\lambda^2} \sin^2 \vartheta \right\} , \quad (2)$$

где $R_0(\vartheta)$ - коэффициент отражения от идеально гладкой поверхности, рассчитываемый по формулам Френеля. Правомерность такого подхода и границы его применимости рассмотрены в работе [7].

Результаты и обсуждение

АСМ исследования морфологии поверхности подложек показали, что на поле 10×10 мкм наблюдаются два типа неровностей с характерными размерами ~ 10 нм и ~ 500 нм. Типичные изображения таких неровностей приведены на рис. 1 (а, б).

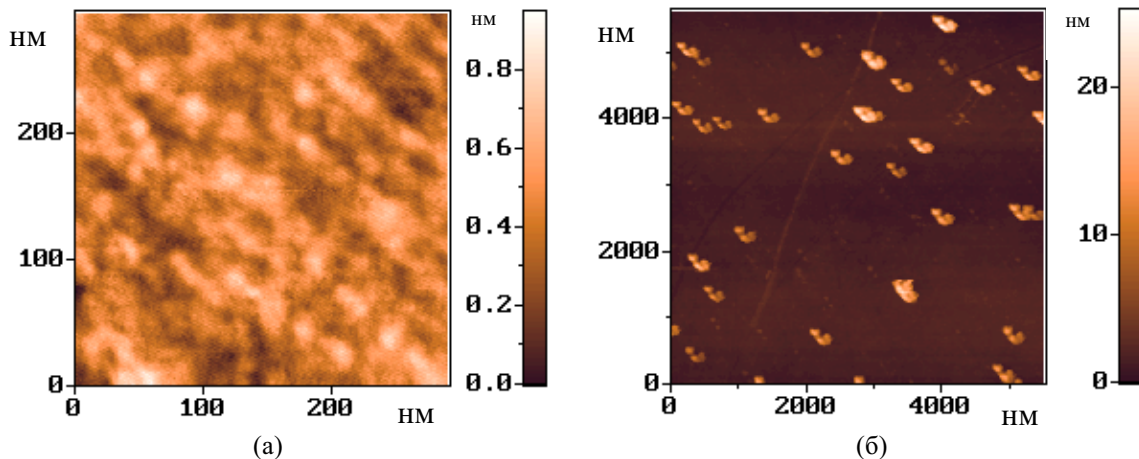


Рис. 1. - Характерные АСМ изображения мелкомасштабных (а) и крупномасштабных (б) шероховатостей на поверхности стеклянных подложек.

Исследования показали, что величина $\bar{\sigma}$ увеличивается с ростом размера кадра (L). На зависимостях $\bar{\sigma}$ от размера кадра (рис. 2) четко прослеживаются два интервала с $L < L_0$ и $L > L_0$, где $L_0 \sim 500$ нм. При $L < L_0$ основной вклад в величину $\bar{\sigma}$ вносят мелкомасштабные шероховатости. С ростом размера кадра увеличивается вероятность

попадания в кадр крупных неровностей и, начиная с L_0 , этот тип шероховатостей вносит преобладающий вклад в величину $\bar{\sigma}$.

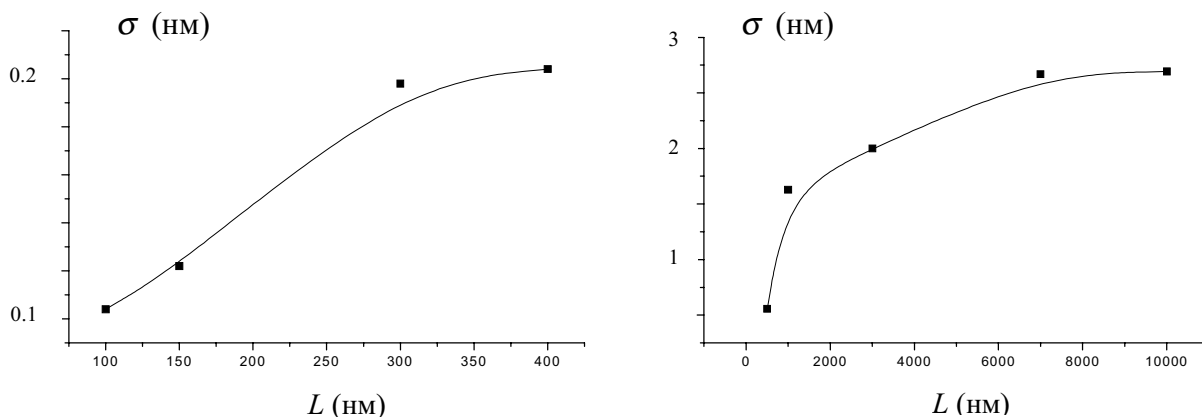


Рис. 2. Зависимости среднеквадратичной шероховатости подложек из стекла, рассчитанной по данным АСМ измерений, от размера кадра.

Исследование угловой зависимости коэффициента отражения зеркальной компоненты рентгеновского излучения показали, что функция распределения по высотам для поверхности стеклянных подложек может быть достаточно хорошо аппроксимирована функцией Гаусса с величиной эффективного среднеквадратичного отклонения высот неровностей $\bar{\sigma} \sim 0.7$ нм.

При сравнении результатов АСМ микроскопии и рентгеновской рефлектометрии обнаруживается резкое несоответствие между значениями величин $\bar{\sigma}$, полученными этими методами. Аналогичное несоответствие между данными атомно-силовой микроскопии и рентгеновской рефлектометрии наблюдалось в работе [4] для подложек из плавленого кварца, содержащих редко расположенные и имеющие большую амплитуду шероховатости типа бугорков (или так называемых вкраплений). Такое расхождение может объясняться тем, что в обоих случаях исследуемые поверхности являются существенно не гауссовыми и, следовательно, для них нельзя учитывать рассеяние рентгеновского излучения в выражении (2) простым фактором Дебая-Валлера. Вклад ансамбля вкраплений в величину среднеквадратичного отклонения высот рельефа поверхности и в рассеяние рентгеновского излучения можно оценить, используя простую модель. Представим поверхность в виде суммы двух некоррелированных функций:

$$f(\vec{\rho}) = f_1(\vec{\rho}) + f_2(\vec{\rho}), \quad (3)$$

где $\vec{\rho}$ - радиус вектор в плоскости образца, $f_1(\vec{\rho})$ - поверхность, имеющая гауссово распределение по высотам, а $f_2(\vec{\rho})$ - функция, описывающая распределение бугорков, которую для определенности выберем в виде случайной пуассоновской функции:

$$f_2(\vec{\rho}) = A \sum_m \varphi(\vec{\rho} - \vec{\rho}_m),$$

где A - амплитуда бугорков. Возьмем $\varphi(\vec{\rho}_m)$ - в виде параллелепипеда с площадью основания S_0 и высотой, равной единице. Тогда дисперсия шероховатости такой поверхности при условии $\langle f_1 f_2 \rangle = 0$ определяется как:

$$\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 = \sigma_g^2 + A^2(p - p^2), \quad \text{где } p = \frac{\sum S_0}{S}$$

здесь σ_g^2 - дисперсия шероховатостей Гауссовой поверхности, p - коэффициент заполнения поверхности случайными бугорками, равный отношению суммарной площади бугорков к общей площади. Видно, что с ростом амплитуды случайных бугорков дисперсия шероховатости растет как A^2 . Иная ситуация имеет место при рассеянии рентгеновского излучения от такой поверхности. Представим коэффициент отражения в виде:

$$R(q) = R_0(q)\psi(q), \quad (4)$$

где $q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \vartheta$ - нормальная к поверхности компонента вектора рассеяния, $R_0(q)$ - Френелевский коэффициент отражения от идеально гладкой поверхности, $\psi(q)$ - функция, определяющая рассеяние излучения на шероховатой поверхности. Для рентгеновского диапазона длин волн в приближении однократного рассеяния эту функцию можно записать в виде:

$$\psi(q) = \left| \frac{1}{S} \int_S e^{iqf(\vec{\rho})} d\vec{\rho} \right|^2 \quad (5)$$

Для поверхностей, имеющих гауссово распределение по высотам, этот фактор равен:

$$\psi(q) = e^{-q^2 \sigma_g^2},$$

где σ_g - среднеквадратичная шероховатость гауссовой поверхности.

В случае поверхности со случайными бугорками фактор рассеяния (5) в приближении малых p имеет вид:

$$\psi(q) = e^{-q^2 \sigma_g^2 - 4p \sin^2(qA/2)},$$

так что эффективная дисперсия шероховатостей может быть написана в виде:

$$\sigma_{eff}^2 = \sigma_g^2 + \frac{4p}{q^2} \sin^2\left(\frac{qA}{2}\right) \quad (6)$$

Эта величина осциллирует с ростом амплитуды бугорков A , оставаясь ограниченной по величине. Таким образом, неровности типа случайных вкраплений по-разному влияют на величину среднеквадратичной шероховатости и на рассеяние рентгеновского излучения. Из выражения (6) видно, что для поверхностей, содержащих случайные бугорки большой амплитуды и имеющих малые коэффициенты заполнения p , основной вклад в рассеяние рентгеновского излучения дает гауссова составляющая поверхности.

Знание АСМ рельефа поверхности позволяет рассчитать угловую зависимость коэффициента отражения рентгеновского излучения и величину эффективной среднеквадратичной шероховатости без каких-либо дополнительных предположений о характере неровностей поверхности. Для этого достаточно подставить массив $z = f(x, y)$, полученный с помощью АСМ, в выражение (5) для функции $\psi(q)$ и произвести численное интегрирование. На рис. 4 приведены результаты расчетов фактора рассеяния $\psi(q)$ для поверхности стеклянных подложек.

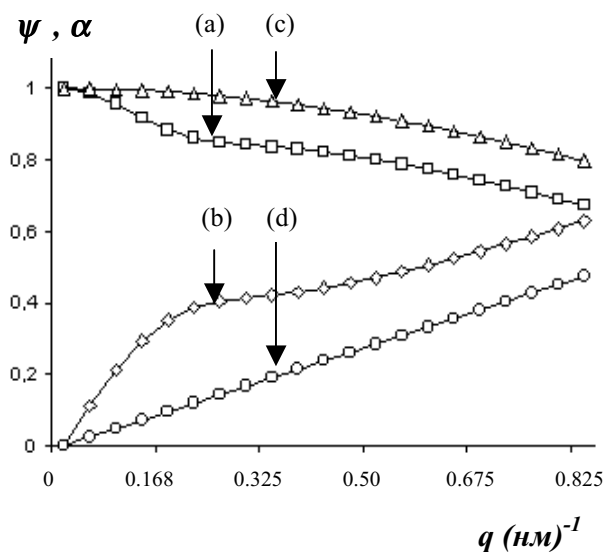


Рис. 4.

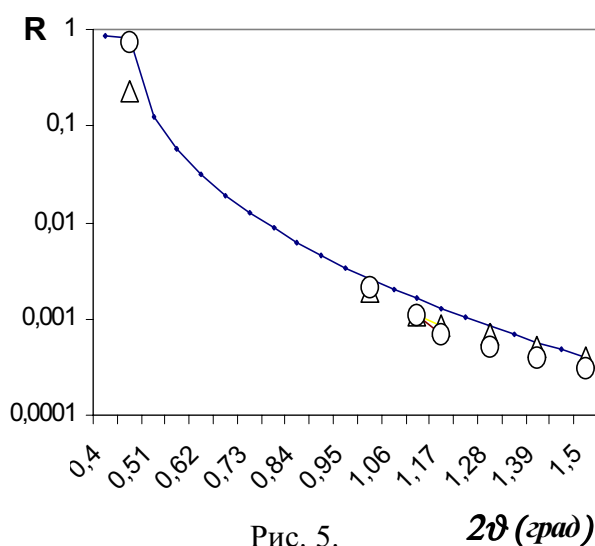


Рис. 5.

Рис. 4. (а), (б) - функции $\psi(q)$ и $\alpha(q)$, рассчитанные для поверхности стеклянных подложек по данным атомно-силовой микроскопии. (с), (д) - аналогичные зависимости для гауссовой поверхности с тем же значением среднеквадратичной шероховатости.

Рис. 5. Угловая зависимость коэффициента отражения рентгеновского излучения от поверхности стеклянных подложек. Экспериментальные значения обозначены Δ и O , сплошная кривая - результаты расчетов с использованием АСМ профиля поверхности.

Из рис. 4 видно, что функция $\psi(q)$ достаточно сильно отличается от гауссовой. Строго говоря, по отношению к отражению рентгеновского излучения для поверхностей, сильно отличающихся от гауссовых, определение эффективной среднеквадратичной шероховатости достаточно условно. В этом случае величина:

$$\sigma_{eff}^2 = -\frac{1}{q^2} \ln \psi(q)$$

является функцией параметра q и можно говорить лишь о некотором среднем значении среднеквадратичной шероховатости поверхности на некотором интервале углов отражения. Для оценки σ_{eff} стеклянных подложек была рассчитана функция $\alpha = (-\ln \psi(q))^{1/2}$. В случае гауссовых поверхностей эта функция является прямой линией, тангенс угла наклона которой равен среднеквадратичной шероховатости σ_g . Как показали расчеты, для поверхности стеклянных подложек функция $\alpha(q)$ (кривая (с) на рис.4) нелинейна, однако в области q , соответствующих углам скольжения большим углу полного внешнего отражения, она хорошо аппроксимируется прямой линией. Оценки среднеквадратичной шероховатости на этом интервале q дают значение 0.6 нм, хорошо согласующееся с величиной, полученной из рентгеновских измерений. Для сравнения на рис. 4 приведены функции $\psi(q)$ и $\alpha(q)$ для гауссовой поверхности с той же среднеквадратичной шероховатостью 0.6 нм.

По данным атомно-силовой микроскопии с использованием формул Френеля, была рассчитана угловая зависимость коэффициента отражения рентгеновского излучения в интервале углов скольжения близких к 0° (рис. 5). Как видно из рис. 5, угловая зависимость, рассчитанная по АСМ профилю, хорошо согласуется с экспериментальными точками, приведенными на том же рисунке.

Заключение

Таким образом, методами рентгеновской рефлектометрии и атомно-силовой микроскопии были исследованы шероховатости стеклянных пластин, применяемых в качестве подложек для изготовления многослойных интерференционных зеркал рентгеновского диапазона длин волн. Обнаружено резкое расхождение в оценке среднеквадратичной шероховатости подложек, полученной из угловых зависимостей коэффициента отражения зеркальной компоненты рентгеновского излучения, и из статистических расчетов по АСМ профилям поверхности. Это объясняется тем, что исследуемые поверхности содержат вкрапления, имеющие большую высоту, так что функция распределения по высотам существенно отличается от гауссовой. Предложен метод расчета параметров отражения рентгеновского излучения от шероховатой поверхности по профилю, полученному с помощью атомно-силового микроскопа, без каких либо предположений о свойствах поверхности. Показано, что средние значения среднеквадратичной шероховатости и угловая зависимость коэффициента отражения в рентгеновском диапазоне длин волн, рассчитанные непосредственно по АСМ профилям поверхности стеклянных подложек, хорошо согласуются с результатами рентгеновских измерений.

Авторы выражают благодарность Коротковой Н.А. за помощь при проведении экспериментов.

Работа выполнена при частичной поддержке фирмы "Carl Zeiss", программы ГКНТ "Фундаментальная метрология" (проект 3.45) и РФФИ (проекты 99-02-16137 и 99-02-16139).

Литература

1. П.А.Арутюнов, А.Л.Толстихина - Сканирующая зондовая микроскопия (туннельная и силовая) в задачах метрологии нанoeлектроники. // Микроэлектроника, 1997, т. 26, № 6, с. 426-439.
2. П.А.Арутюнов, А.Л.Толстихина, В.Н.Демидов - Параметры шероховатости по данным измерений атомно-силового микроскопа. // Микроэлектроника, 1998, т. 27, № 6, с. 431-439.
3. S.J.Fang, W.Chen, T.Yamanaka. C.R.Helms - Comparison of Si surface roughness measured by atomic-force microscopy and ellipsometry // Appl. Phys. Lett., 1996, **68**(20), p. 2837-2839.
4. C.Teichert, J.F.MacKay, D.E.Savage, M.G.Lagally - Comparison of surface roughness of polished silicon wafers measured by light scattering topography, soft-x-ray scattering, and atomic-force microscopy. // Appl. Phys. Lett., 1995, **66**(18), p. 2346-2348.
5. В.В.Протопопов, К.А.Валиев, Р.М.Имамов - Сравнительные измерения шероховатости подложек рентгеновских зеркал методами рентгеновской рефлектометрии и сканирующей зондовой микроскопии. // Кристаллография, 1997, т. 42, № 4, с. 747-754.
6. J.M.Eastman - Scattering by all-dielectric multilayer bandpass filters and mirrors for lasers. Acad. Press Physics of Thin Films. Ed. Harr G., Francombe M.H., 1978, v. 10, p. 167-226.
7. А.И.Лямкин, А.П.Ершов, Е.А.Петров и др. // ДАН СССР, 1988, **302**, с. 611.
8. Д.Г.Волгунов, И.А.Дорофеев, В.Л.Миронов, Ю.Я.Платонов - Применение сканирующего туннельного микроскопа в исследовании поверхности сколов графита и многослойной структуры. // Поверхность, 1993, в.5, с. 43 - 49.