第 59 卷 第 6 期 2010 年 6 月
1000-3290/2010/59(06)/4150-06

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 59, No. 6, June, 2010
©2010 Chin. Phys. Soc.

AlN/NbN 纳米结构多层膜的共格异结构外延生长研究*

喻利花 薛安俊 董松涛 许俊华†

(江苏科技大学材料科学与工程学院, 江苏省先进焊接技术重点实验室, 镇江 212003)

(2009 年 9 月 9 日收到;2009 年 12 月 1 日收到修改稿)

采用射频磁控溅射法制备了 NbN, AlN 单层膜及不同调制周期的 AlN/NbN 纳米结构多层膜,采用 X 射线衍射仪、小角度 X 射线反射仪和高分辨透射电子显微镜等对薄膜进行了表征. 结果表明:单层膜 AlN 为六方结构, NbN 为面心立方结构;AlN/NbN 多层膜中 AlN 为六方结构, NbN 为面心立方结构,界面处呈共格状态,其共格关系为 c-NbN(111)面平行于 h-AlN(0002)面,晶格错配度为 0.13%. 热力学计算表明:AlN/NbN 多层膜中不论 AlN 层与 NbN 层的厚度如何, AlN 层均不会形成亚稳的立方 AlN,而是形成自身的平衡六方结构,与 NbN 形成异结构外延生长.

关键词: AlN/NbN 纳米结构多层膜, 共格外延生长, 异结构

PACC: 6860, 6855, 6460M

1. 引 言

纳米结构多层膜因其性能的异常效应受到广泛关注[1—5]. 纳米结构多层膜生长方式及超硬效应机理也成为了研究热点[6—10]. 近来研究表明,在制备多层膜时可以将一晶态调制层做为模板,使另一调制层强制形成与自身平衡态结构不一样的晶体,即使另一调制层发生共格外延生长. 而被强制调制层平衡态可以是晶态,也可以是非晶态. 例如,在通常沉积条件下 AlN, NbN, $CrN_{0.6}$为六方结构,但在超晶格陶瓷膜 AlN/TiN, AlN/VN, NbN/TiN 和 $CrN_{0.6}$/TiN 中,由于 TiN, VN 层的模板作用,它们呈现立方结构[11—16]. BN, Si_3N_4, SiO_2 的平衡态为非晶,但在 AlN/BN, AlN/Si_3N_4, AlN/SiO_2 多层膜中,在 AlN 模板的作用下, BN, Si_3N_4, SiO_2 会变成晶态并呈六方结构[17—20],而在 VN/SiO_2, ZrN/Si_3N_4 多层膜中,在 VN 和 ZrN 模板的作用下, SiO_2, Si_3N_4 会变成晶态并呈立方结构[21,22]. 在 Ti/Pd, Ti/V 金属多层膜[23,24]及陶瓷/CN_x 多层膜[25,26]中也发现了类似的现象.

多层膜超硬效应的机理有多种,但都是基于组元具有相同的晶体结构. 本文选择 NbN/AlN 多层膜体系,主要基于以下考虑:NbN 和 AlN 的稳定结构分别为面心立方和密排六方,如果 AlN 能在 NbN 模板的作用下形成亚稳立方结构,则可研究 AlN 的结构转变及由此引起的力学性能的变化;如果 AlN 不能在 NbN 模板上形成立方结构,而是形成自身的稳定六方结构,则可研究薄膜的生长特点及异结构对多层膜力学性能的影响,从而丰富纳米结构多层膜的硬化机理. 本文就 AlN/NbN 纳米结构多层膜的制备与微结构进行研究,力学性能将另文报道.

2. 实验过程

2.1. 薄膜的制备

AlN, NbN 单层膜以及 AlN/NbN 纳米结构多层膜的制备在射频磁控溅射设备上完成. 射频磁控溅射仪有三个溅射靶,分别安装在三个水冷的靶支架上,三个不锈钢挡板分别安放在三个靶前面,通过电脑自动控制. 基片架与靶间的距离为 60 mm. 纯 Al 和 Nb 靶分别安装在独立的射频阴极上,溅射靶直径为 25 mm,厚度为 3 mm. 当溅射系统的本底真空优于 5.0×10^{-5} Pa 时,通入纯度分别为 99.999% 的

* 国家自然科学基金(批准号: 50574044)和江苏省自然科学基金(批准号: BK2008240)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: junhuaxu01@yahoo.com

Ar 气和 99.999% 的 N_2 气．镀膜的基片为Si(100)薄片，多层膜的厚度通过增加多层膜的调制周期数获得，总厚度为 1.0 μm. 沉积之前，通过挡板隔离基片与离子区，Al 靶和 Nb 靶进行 10 min 的预溅射，然后在基片上预先沉积厚度约为 80 nm 的 AlN 衬底层. 工作气压为 0.31 Pa，Ar 气流量为 10 mL/min，N_2 气流量为 2 mL/min，通过计算机精确控制 Al 靶和 Nb 靶前面的挡板在靶前停留的时间，从而在基片上交替沉积 AlN 层和 NbN 层，得到各种调制周期的 AlN/NbN 多层膜，设计的调制比 $l_{AlN}:l_{NbN}=1:1$. Al 靶和 Nb 靶的功率均为 100 W，AlN 和 NbN 的溅射速率均为 8.0 nm/min. 制备过程温度保持在500 ℃.

2.2. 薄膜表征

单层膜和多层膜的晶体结构用 RAD-C 型 X 射线衍射(XRD)仪进行测定，使用 Cu$K\alpha$ 射线，电压为 40 kV，电流为 35 mA，掠入射角为 1°，扫描速度为 0.5°/min. 使用日立公司生产的 H-9000 型高分辨透射电子显微镜(HRTEM)对多层膜样品的横截面进行显微形貌分析，加速电压为 300 kV. 调制周期由 Rigaku ATX-G2 型小角度 X 射线反射(XRR)仪确定，使用旋转的 18 W 阳极 Cu$K\alpha$ 射线，采用 Ge(220)单色器使 X 射线单色化，入射和反射光束被一个宽为 0.05 mm，高为 2.0 mm 的狭缝校准，反射强度通过一个火花计数器测量，镜反射率曲线用 θ-2θ扫描模式记录.

3. 实验结果及讨论

3.1. 多层膜的生长结构

图 1 为部分 AlN/NbN 纳米多层膜的小角度 XRR 谱. 从图 1 可以看出，多层膜的小角度 XRR 谱显示多级衍射峰，表明其具有良好的周期性和清晰的界面结构，形成了良好的成分周期变化的调制结构. 根据 Bragg 公式[27]计算得到相应多层膜的调制周期分别为 3，7.4，10，15 nm.

图 2 为 NbN，AlN 单层膜的 XRD 谱. 分析表明 NbN 单层膜为面心立方结构，AlN 单层膜为六方结构，具有(0002)择优取向，即六方结构的 c 轴垂直薄膜表面. 图 3 为 AlN/NbN 纳米结构多层膜 XRD 谱. 从图 3 可以看出：调制周期小时，衍射峰较弱且较宽，随着调制周期的增加，衍射峰变窄，强度也随之

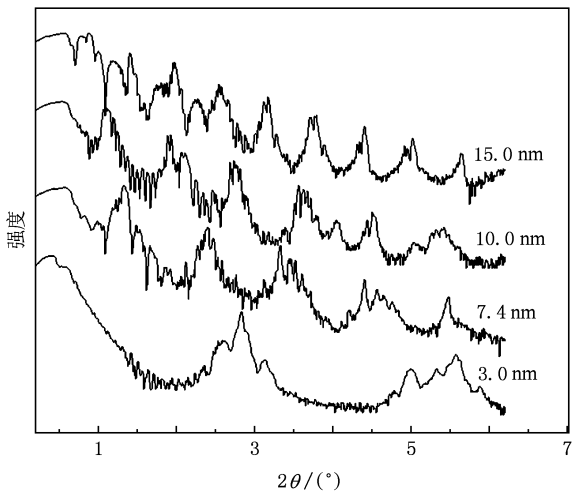

图 1　AlN/NbN 纳米多层膜的 XRR 谱

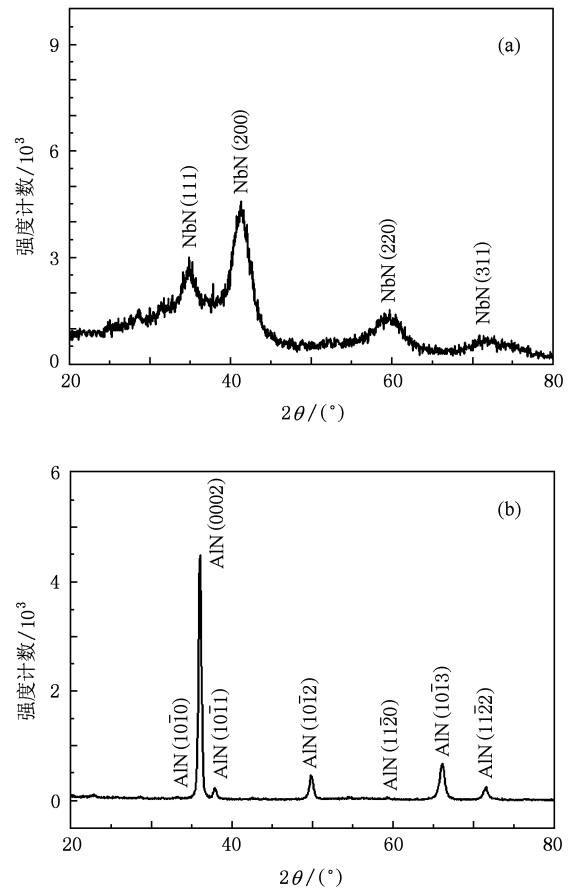

图 2　NbN，AlN 单层膜的 XRD 谱　(a) NbN 单层膜，(b) AlN 单层膜

增加，表明薄膜随着调制周期的增加，晶化程度变好. 调制周期为 3.0 nm 时，在衍射角为 35.04°，60.063°，64.75°和 71.35°处均有衍射峰. 分析认为：

35.04°位置处的衍射峰对应面心立方(fcc)-NbN(111)或六方(h)-AlN(0002),60.063°位置处的衍射峰对应 h-AlN(11$\bar{2}$0)或 fcc-NbN(220),64.75°位置处的衍射峰对应 h-AlN(10$\bar{1}$3),71.35°位置处的衍射峰对应 fcc-NbN(311)或 h-AlN(11$\bar{2}$2). 调制周期从 3.0 nm 变化至 15.0 nm,衍射峰的位置没有明显变化但衍射峰的强度增加了. 调制周期从 26.0 nm 变化至 30.0 nm,出现了 fcc-NbN(200)的衍射峰. 上述分析表明,调制周期从 3.0 nm 变化到 30.0 nm,多层膜中的 NbN 和 AlN 分别以各自的稳定结构面心立方和密排六方结构生长.

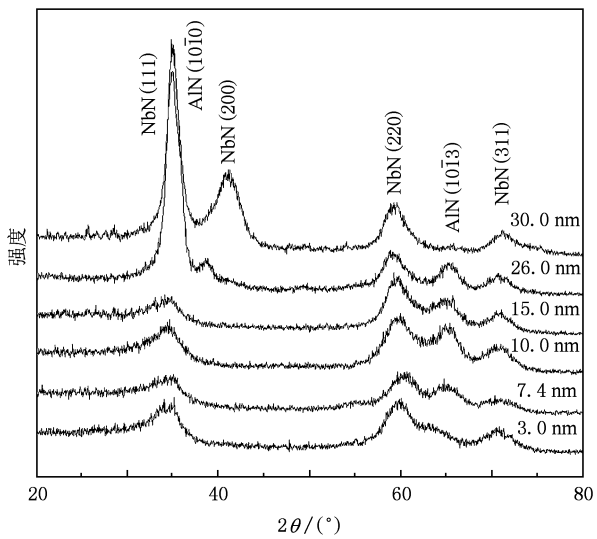

图 3 调制周期为 3.0—30.0 nm 的 AlN/NbN 多层膜的 XRD 谱

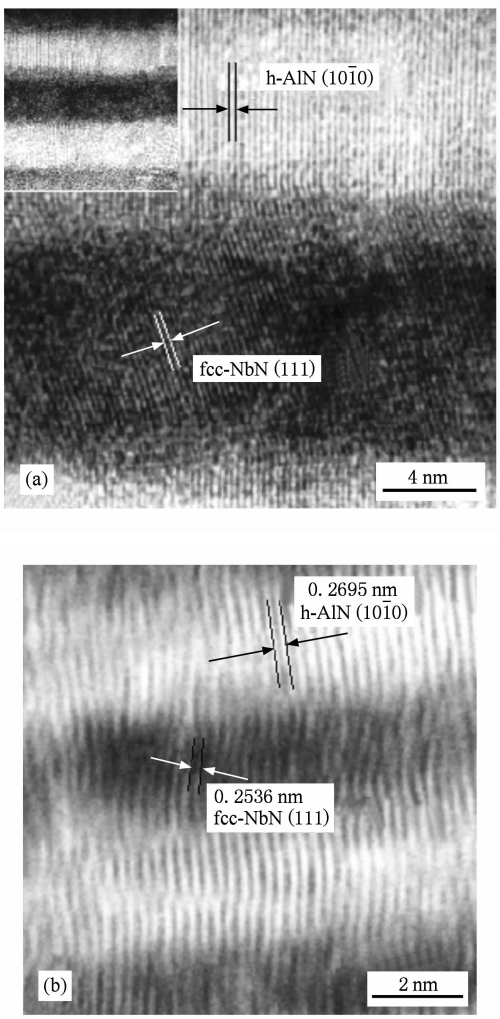

图 4 AlN/NbN 纳米多层膜 HRTEM 像 (a)调制周期为20.0 nm,(b)调制周期为 5.0 nm

图 4 是调制周期分别为 20 和 5 nm 的 AlN/NbN 多层膜 HRTEM 图像. 图 4(a)左上方的低倍像表明多层膜呈现成分周期变化的调制结构,其中浅色区为 AlN 层,深色区为 NbN 层,其层厚比约为 1∶1,与设计值相符. 用 Si 作为内标来测量图 4 中的晶面间距,从而确定其晶面指数. 图 4 中已标注了 HRTEM 晶格条文的分析结果. 分析表明,多层膜在不同的调制周期,NbN 和 AlN 均以各自稳定的面心立方结构和密排六方结构生长,这证实了由 XRD 中得到的结论. 对图 4 的分析还可以知道,AlN 层与 NbN 层界面处立方(c)-NbN 的(111)面平行于 h-AlN 的(0002)面,即在界面处形成如图 5 所示的 c-NbN(111)面平行于 h-AlN(0002)面的晶格关系. 由 XRD 可知,NbN 单层膜的晶格常数 a_{NbN} = 0.4393 nm,AlN 单层膜的晶格常数 a_{AlN} = 0.3111 nm. 根据以上的共格关系,在 NbN(111)和 AlN(0002)共格界面上,存在 0.13% 的晶格错配度. 仔细观察图 4 可以发现,界面处均存在位错,且图 4(b)比图 4(a)的位错密度高. 如果界面处的位错是由于晶格错配产生,那么应该是调制周期大的薄膜产生更多的位错,但实验结果却与之相反. 由图 4 还可以看出,两种调制周期的晶格均发生了扭曲,且调制周期小的晶格扭曲的程度更大. 这说明界面处的位错是由内应力引起的,不是由晶格错配引起的,即在制备薄膜的过程中薄膜中产生了沉积应力,该应力在制备 TEM 样品过程中得到释放,从而产生了位错. 因此可以认为界面处 c-NbN(111)晶面与 h-AlN(0002)晶面为共格界面. 这表明 AlN/NbN 多层膜生长时 AlN 层与 NbN 层发生了异结构外延生长,NbN 模板的作用是使 AlN 层与 NbN 层在界面处发生共格关系,这与通常多层膜生长时的模板效应不完全相同.

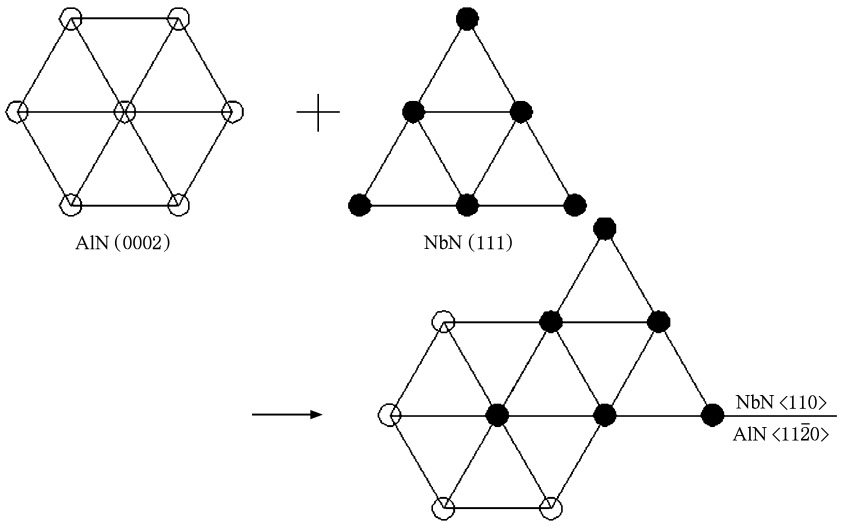

图 5　AlN/NbN 纳米多层膜共格界面取向关系示意图

3.2. 多层膜生长结构的讨论

文献[11,12]指出,在 AlN/TiN,AlN/VN 纳米结构多层膜中,当 AlN 层的厚度小于 2 或 3 nm 时,AlN 以亚稳的 c-AlN 存在并与模板 TiN 形成共格外延的超晶格结构,当 AlN 层的厚度大于 2 或 3 nm 时,界面共格关系被破坏,AlN 以稳定的六方结构存在. NbN 与 TiN,VN 一样为 NaCl 型结构,但 AlN/NbN 多层膜调制周期从 3.0 nm 变化至 26.0 nm,也即 AlN 的厚度从 1.5 nm 变化至 13 nm 时,AlN 均为六方结构,没有形成亚稳的 c-AlN,且与 NbN 层形成共格界面,共格关系为 c-NbN(111)面平行于 h-AlN(0002)面.

下面从热力学角度对多层膜的生长结构进行分析.

AlN 层在 NbN 层上生长时,AlN 层的能量表达式[12]为

$$E(t)_{\mathrm{AlN}} = t(E^{\mathrm{b}}_{\mathrm{AlN}} + E^{\mathrm{s}}_{\mathrm{AlN}}) + E^{\mathrm{i}}_{\mathrm{AlN/NbN}}, \quad (1)$$

其中 $E(t)_{\mathrm{AlN}}$ 表示厚度为 t 时单位面积的 AlN 的总能量,$E^{\mathrm{i}}_{\mathrm{AlN/NbN}}$ 表示单位面积的 AlN 和模板 NbN 的界面能,$E^{\mathrm{b}}_{\mathrm{AlN}}$ 表示单位体积无应变的 AlN 的体积能,$E^{\mathrm{s}}_{\mathrm{AlN}}$ 表示单位面积 AlN 由晶格错配产生的应变能. 由(1)式可以得到 AlN 分别以 c-AlN 和 h-AlN 在 NbN(111)上生长时,能量之差为

$$\begin{aligned} E(t)_{\text{c-AlN}} - E(t)_{\text{h-AlN}} = {} & t\left[(E^{\mathrm{b}}_{\text{c-AlN}} - E^{\mathrm{b}}_{\text{h-AlN}}) \right. \\ & \left. + (E^{\mathrm{s}}_{\text{c-AlN}} - E^{\mathrm{s}}_{\text{h-AlN}})\right] \\ & + (E^{\mathrm{i}}_{\text{c-AlN/NbN}} - E^{\mathrm{i}}_{\text{h-AlN/NbN}}). \end{aligned} \quad (2)$$

c-AlN 与 h-AlN 的化学键基本相同[28],且 c-AlN/NbN(200)和 h-AlN(0002)/NbN(111)均为共格界面,两者的界面能均很小,故可认为 $E^{\mathrm{i}}_{\text{c-AlN/NbN}} - E^{\mathrm{i}}_{\text{h-AlN/NbN}} \approx 0$. $E^{\mathrm{s}}_{\text{c-AlN}}$ 和 $E^{\mathrm{s}}_{\text{h-AlN}}$ 值依赖错配度及弹性模量的大小,错配度及弹性模量大,应变能就大. 由文献[29]知,c-AlN 的体积模量(281 GPa)大于 h-AlN 的体积模量(220 GPa),可以判断 c-AlN 的弹性模量大于 h-AlN 的弹性模量,h-AlN(0002)/NbN(111)错配度为 0.13%,c-AlN 晶格常数为 0.408 nm[11],c-AlN/NbN(200)的错配度为 7.4%,从而 AlN 层厚度相同时,$E^{\mathrm{s}}_{\text{c-AlN}} > E^{\mathrm{s}}_{\text{h-AlN}}$,所以 $E^{\mathrm{s}}_{\text{c-AlN}} - E^{\mathrm{s}}_{\text{h-AlN}} > 0$. 由于[29] $E^{\mathrm{b}}_{\text{c-AlN}} > E^{\mathrm{b}}_{\text{h-AlN}}$,故 $E^{\mathrm{b}}_{\text{c-AlN}} - E^{\mathrm{b}}_{\text{h-AlN}} > 0$. 从而(2)式可简化为

$$\begin{aligned} E(t)_{\text{c-AlN}} - E(t)_{\text{h-AlN}} = {} & t\left[(E^{\mathrm{b}}_{\text{c-AlN}} - E^{\mathrm{b}}_{\text{h-AlN}}) \right. \\ & \left. + (E^{\mathrm{s}}_{\text{c-AlN}} - E^{\mathrm{s}}_{\text{h-AlN}})\right]. \end{aligned} \quad (3)$$

由于 $E^{\mathrm{b}}_{\text{c-AlN}} - E^{\mathrm{b}}_{\text{h-AlN}} > 0$, $E^{\mathrm{s}}_{\text{c-AlN}} - E^{\mathrm{s}}_{\text{h-AlN}} > 0$,故对任何的 AlN 厚度,$E(t)_{\text{c-AlN}} - E(t)_{\text{h-AlN}} > 0$,表明不论 AlN 层的厚度如何,AlN 层在 NbN 层上生长时,六方相能量比立方相能量低,有利于六方相的生长. 这与我们的实验结果一致.

本文研究的 AlN/NbN 纳米结构多层膜中 AlN 的生长结构与 AlN/VN,AlN/CrN 和 AlN/TiN 纳米结构多层膜[11—16]中 AlN 的生长结构不同. 从文献[11,12,30,31]及本文的实验得到不同结构的 NbN,TiN,VN,CrN 和 AlN 的晶格常数一并列于表 1.

表 1 各种薄膜的晶格常数

薄膜	c-NbN	c-TiN	c-VN	c-CrN	c-AlN		h-AlN
a/nm	43.93	42.4	41.4	41.64	40.8	41.2	31.11
c/nm	—	—	—	—	—	—	49.79
数据来源	本实验	文献[11]	文献[12]	文献[30]	文献[11]	文献[31]	本实验

由表 1 可以得到 TiN,VN,CrN 和 NbN 分别与 AlN 形成纳米结构多层膜界面共格时的晶格错配度,结果见表 2,表中异结构共格表示的是立方结构 TiN,VN,CrN 和 NbN 的(111)面与六方结构的 AlN (0002)面呈共格关系.

表 2 多层膜的晶格错配度

多层膜	异结构共格晶格错配度/%	同结构共格晶格错配度 (a_{AlN} = 40.8)/%	同结构共格晶格错配度 (a_{AlN} = 41.2)/%
AlN/TiN	3.60	3.85	2.870
AlN/VN	6.07	1.46	0.484
AlN/CrN	5.50	2.03	1.022
AlN/NbN	0.13	7.40	6.413

由表 2 可知,在 AlN/TiN,AlN/VN 和 AlN/CrN 纳米结构多层膜中,形成异结构界面共格的错配度分别为 3.6%, 6.07% 和 5.5%,而形成同结构外延的错配度分别为 2.87%, 0.484% 和 1.022% (以 a_{AlN} = 4.12 为例). 显然,在 AlN/NbN 纳米结构多层膜中,AlN 的晶体结构与 AlN/VN, AlN/CrN 和 AlN/TiN纳米结构多层膜中 AlN 的晶体结构不同,主要原因是 AlN 与 NbN 共格形成六方 AlN 的晶格错配度远比共格形成立方 AlN 的晶格错配度小,而 AlN/TiN,AlN/VN 和 AlN/CrN 纳米结构多层膜中与 TiN,VN 和 CrN 共格形成立方 AlN 的晶格错配度比共格形成六方 AlN 的晶格错配度小. 对于本文研究的 AlN/NbN 多层膜,AlN 的厚度从 1.5 nm 变化到 13 nm 时均与 NbN 层形成共格关系,但其结构为六方结构. 这是由于共格形成六方 AlN 的晶格错配度比共格形成立方 AlN 的晶格错配度小得多,仅为立方 AlN 的 1/50 左右,即使随着 AlN 层厚度的增加,应变能仍然很小,故 h-AlN 层会始终与 c-NbN 层保持共格关系.

4. 结 论

用射频磁控溅射法制备了 NbN,AlN 单层膜及不同调制周期的 AlN/NbN 纳米多层膜,研究了 AlN/NbN 多层膜的微结构. 分析表明,AlN 的厚度从 1.5 nm 变化至 13 nm,AlN 始终以六方相与面心立方结构的 NbN 形成共格界面,其共格关系为 c-NbN(111)面平行于 h-AlN(0002)面,即使 AlN 层厚度为 1.5 nm 时,也没有与面心立方结构的 NbN 层外延形成亚稳的立方结构. 这主要是因为形成 h-AlN 的体积能和应变能比形成 c-AlN 的体积能和应变能小,且 h-AlN(0002)面平行于 c-NbN(111)面的晶格错配度很小,仅为 c-AlN/c-NbN 的晶格错配度的1/50左右,故 h-AlN(0002)界面与 c-NbN(111)界面始终保持共格关系.

[1] Helmersson U, Todorova S, Barnett S A, Sundgren J E, Market L C, Greene J E 1987 *J. Appl. Phys.* **62** 481

[2] Mirkarimi P B, Hultman L, Barnett S A 1990 *Appl. Phys. Lett.* **57** 2654

[3] Sproul W D 1996 *Science* **273** 889

[4] Söderberg H, Odén M, Molina-Aldareguia J M, Hultman L 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 114327

[5] Barshilia H C, Deepthi B, Rajam K S 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 113532

[6] Wang L Q, Wang M X, Li D J, Yang J, Yu D S, Su J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3435 (in Chinese)[王立群、王明霞、李德军、杨 瑾、余大书、宿 杰 2007 物理学报 **56** 3435]

[7] Hultman L, Barerño J, Flink A, Söderberg H, Larsson K, Petrova V, Odén M, Greene J E, Petrov I 2007 *Phys. Rev.* B **75** 155437

[8] Xu J H, Yu L H, Azuma Y, Fujimoto T, Umehara H, Kojima I 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 4139

[9] Lao J J, Shao N, Mei F H, Li G Y, Gu M Y 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 011902

[10] Wei L, Kong M, Dong Y S, Li G Y 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 074302

[11] Madan A, Kim I W, Cheng S C, Yashar P, Dravid V P, Barnett S A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1743

[12] Kim I W, Li Q, Marks L D, Barnett S A 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 892

[13] Hu X P, Yu X J, Lao J J, Li G Y, Gu M Y 2003 *J. Vac. Sci.*

Technol. B **21** 2411

[14] Li G Y, Lao L J, Tian J W, Han Z H, Gu M Y 2004 *J. Appl. Phys.* **95** 92

[15] Chu X, Wong M S, Sproul W D, Barnett S A 1993 *Surf. Coat. Technol.* **57** 13

[16] Yashar P, Chu X, Barnett S A, Rechner J, Wang Y Y, Wong M S, Sproul W D 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 1987

[17] Xu J H, Yu L H, Dong S R, Kojima I 2008 *Thin Solid Films* **516** 8640

[18] Yu L H, Dong S T, Dong S R, Xu J H 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5151 (in Chinese)[喻利花、董松涛、董师润、许俊华 2008 物理学报 **57** 5151]

[19] Wu X Y, Kong M, Zhao W J, Li G Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2654 (in Chinese)[乌晓燕、孔　明、赵文济、李戈扬 2009 物理学报 **58** 2654]

[20] Zhao W J, Kong M, Huang B L, Li G Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1574 (in Chinese)[赵文济、孔　明、黄碧龙、李戈扬 2007 物理学报 **56** 1574]

[21] Yue J L, Kong M, Zhao W J, Li G Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1568 (in Chinese)[岳建岭、孔　明、赵文济、李戈扬 2007 物理学报 **56** 1568]

[22] Zhao W J, Dong Y S, Yue J L, Li G Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 459 (in Chinese)[赵文济、董云杉、岳建岭、李戈扬 2007 物理学报 **56** 459]

[23] Xu J H, Kamiko M, Zhou Y M, Lu G H, Yamamoto R, Yu L H, Kojima I 2002 *Appl. Phys. Lett.* **81** 1189

[24] Xu J H, Kamiko M, Sawada H, Zhou Y M, Yamamoto R, Yu L H, Kojima I 2003 *J. Vac. Sci. Technol.* B **21** 2584

[25] Li D, Chu X, Cheng S C, Lin X W, Dravid V P, Chung Y W, Wong M S, Sproul W D 1995 *Appl. Phys. Lett.* **67** 203

[26] Wu M L, Guruz M U, Dravid V P, Chung Y W, Anders S, Freire F L Jr, Mariotto G 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 2692

[27] Kim C, Qadri S B, Scanlon M R, Cammarata R C 1994 *Thin Solid Films* **240** 52

[28] Litimein F, Bouhafs B, Dridi Z, Ruterana P 2002 *New J. Phys.* **4** 64

[29] Christensen N E, Gorczyca I 1994 *Phys. Rev.* B **50** 4397

[30] Li Q, Kim I W, Barnett S A, Marks L D 2002 *J. Mater. Res.* **17** 1224

[31] Wang Y Y, Wong M S, Chia W J, Rechner J, Sproul W D 1998 *J. Vac. Sci. Technol.* A **16** 2913

Hetero-structure coherent epitaxial growth in AlN/NbN nano-structured multilayers*

Yu Li-Hua　Xue An-Jun　Dong Song-Tao　Xu Jun-Hua†

(*Key Laboratory of Advanced Welding Technology of Jiangsu Province, School of Materials Science and Engineering, Jiangsu University of Science and Technology, Zhenjiang* 212003, *China*)

(Received 9 September 2009; revised manuscript received 1 December 2009)

Abstract

Monolithic AlN, NbN films and AlN/NbN multilayers with different modulation periods were prepared by reactive magnetic sputtering. The films were characterized by X-ray diffraction, X-ray reflectivity and high-resolution transmission electron microscopy. The results showed that the crystal structure of monolithic AlN and NbN films is close-packed hexagonal (hcp) and face-centered cubic (fcc), respectively. The crystal structure of AlN and NbN is hcp and fcc, respectively, in AlN/NbN multilayers. The interfaces between AlN layers and NbN layers are coherent, i.e., c-NbN (111) // h-AlN(0002). The lattice mismatch of AlN/NbN multilayers is 0.13%. The thermodynamic calculation revealed that no matter how thickness of AlN or NbN layer is, the AlN layer does not form nonequilibrium structure of fcc, but the equilibrium structure of hcp. The AlN layers grow in the way of hetero-epitaxial coherent growth with NbN layers.

Keywords: AlN/NbN nano-structured multilayers, coherent epitaxial growth, hetero-structure

PACC: 6860, 6855, 6460M

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50574044) and the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK2008240).

† Corresponding author. E-mail: junhuaxu01@yahoo.com