

УДК 541.136.2

## Я.Т. Соловко<sup>1</sup>, І.П. Яремій<sup>1</sup>, В.Д. Федорів<sup>1</sup>, І.М. Будзуляк<sup>1</sup>, Б.І. Яворський<sup>2</sup> Модель блочної структури епітаксійних ферит-гранатових плівок

<sup>1</sup>Прикарпатський університет ім. Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76000, Україна  
<sup>2</sup>Медична академія, вул. Галицька, 2, Івано-Франківськ

Методами двокристалльної дифрактометрії досліджено структурну досконалість Ві-заміщених ферит-гранатових плівок (ФГП), вирощених на підкладці галій-гадолінієвого гранату (ГГГ). Запропоновано модель утворення дислокаційних стінок і блочної структури. За аналізом уширення ліній для різних порядків відбивань визначено розміри областей когерентного розсіювання (о.к.р.) і величини мікродеформацій.

**Ключові слова:** ферит-гранатові плівки, двокристалльна дифрактометрія, дислокаційна стінка, блоки когерентного розсіювання.

*Стаття постуила до редакції 18.09.2002; прийнята до друку 25.09.2002.*

Структурним дослідженням епітаксійних шарів ферит-гранатових плівок рентгенівськими дифракційними методами присвячено велику кількість експериментальних робіт, наприклад [1-3]. Ці результати, зокрема, стосуються вирішенню таких проблем: а) вимірювання параметрів ґраток монокристалів і плівок; б) визначення сингоній і орієнтації плівок; в) вивчення структурної досконалості плівок.

В роботах [4 - 7] проведено детальний аналіз півширин рентгенівських відбивань різного порядку вимірюаних в брегівській геометрії. Так в [4, 7] показано, що основними причинами уширення брегівських відбивань монокристалічних плівок є два фактори – дисперсність областей когерентного розсіювання (о.к.р.) і мікродеформації, викликані дислокаціями. Монокристалічні блоки, з яких складається епітаксійна плівка, як правило, чітко орієнтовані як азимутально, так і відносно нормалі до площини підкладки і розділені малокутовими границями [5, 8]. На відміну від полікристалічних тонких шарів епітаксійні плівки вільні від міжкристалічних великокутових границь.

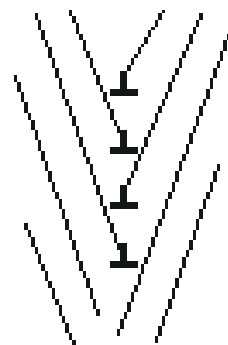
В процесі епітаксійного росту підкладка і плівка, як правило, мають дещо різні параметри ґраток, що приводить до відносного зміщення атомних площин. Така невідповідність приводить до утворення дислокацій невідповідності [1]. Крім того, буде утворюватися рівноважна конфігурація дислокацій в паралельних площинах (дислокаційна стінка) [8].

Мета даної роботи – розробити модель утворення дислокаційних стінок, і відповідно блочної структури, розділеної малокутовими границями, її

експериментальне підтвердження на основі результатів рентгенівської двокристалльної дифрактометрії.

Незважаючи на невелику густину дислокацій в малокутових границях, їхній вплив може бути істотним, оскільки в області границь можуть концентруватися дефекти і домішки, що відтісняються при рості плівки.

Вигляд дислокаційної стінки, яка є границею



**Рис. 1.** Малокутова границя нахилу типу дислокаційна стінка.

двох ділянок кристалу, нахилених одна до одної на малий кут  $\theta$  показано на рис. 1.

Розглянемо механізм утворення дислокаційної стінки. Через різницю у параметрах ґраток плівки і підкладки виникають механічні напруги, які будуть приводити до зміщення шару плівки, яка росте,

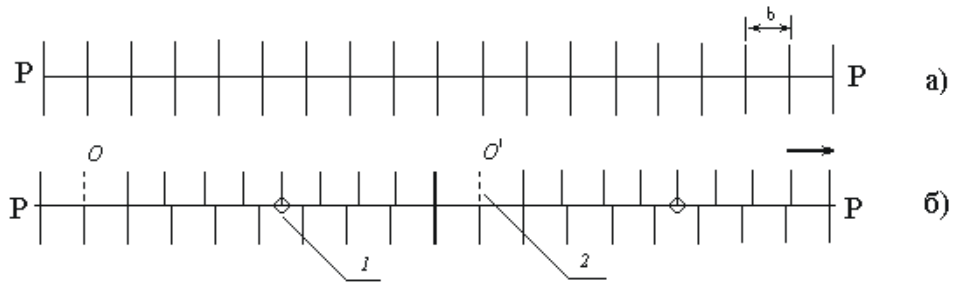
відносно підкладки. Припустимо, що положення підкладки є незмінним, тобто вона не деформується внаслідок значної товщини.

Розглянемо лише верхній шар підкладки і перший шар півки, що утворюється (рис. 2 а). Нехай  $b$  – період верхнього шару,  $PP$  – площина ковзання. Проведемо у площині ковзання  $PP$  зсув і стиснення так, що на безкінечності (а практично на деякій відстані) відновилося правильне взаємне розташування вертикальних площин у верхній і нижній областях. Тоді в площині  $PP$  виникають крайові дислокації і місця, з яких зароджуються рівноважні конфігурації однойменних дислокацій (рис. 2 б).

шару (півки)  $l_r = \sqrt{2}a_{pl}$ , а період підкладки  $l_s = \sqrt{2}a_{pd}$ . Тоді розмір блоку о.к.р. рівний

$$L = \frac{l_r l_s}{2(l_s - l_r)} = \frac{\sqrt{2}a_{pl}a_{pd}}{2(a_{pd} - a_{pl})} \quad (2)$$

При рості півки дислокації, що присутні в підкладці, поширюються і в епітаксійний шар. Крім того, додатковими джерелами виникнення дислокацій в півці є механічні порушення поверхні підкладки при її виготовленні. Детальний опис виникнення дефектів в ферит-гранатових монокристалічних півках подано в роботі [2].



**Рис. 2.** Схема утворення дислокацій: 1 - край обірваної атомної площини (місце утворення крайової дислокації); 2 - місце зародження дислокаційної стінки.

Знайдемо відстань між двома найближчими площинами півки, що співпали з площинами підкладки після зсуву. Це і є величина шуканого блоку. Зробимо це на основі таких міркувань. Після стиснення вертикальних площин в точках  $O$  і  $O'$  (рис. 2б) буде не вистачати по одній площині. В цих точках будуть брати свій початок дислокаційні стінки. Тоді в нижній частині на довжині  $L$  буде вміщатися  $Na_{pd}$  сталих ґраток підкладки, а у верхній  $(N+1)a_{pl}$  сталих ґраток півки. Із вище сказаного випливає, що розмір блоку

$$L = \frac{\sqrt{2} a_{pd} a_{pl}}{2 \Delta a} = \frac{\sqrt{2} a_{pd} (a_{pd} - \Delta a)}{2 \Delta a}, \quad (1)$$

де  $\Delta a = a_{pd} - a_{pl}$ .

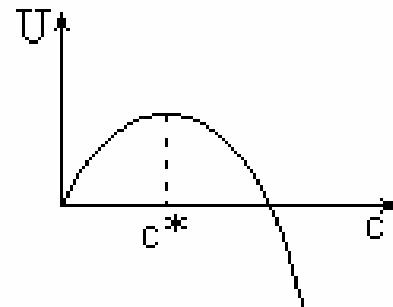
В даній роботі проводилося дослідження кристалічної структури півок  $(YSmCaBi)_3(FeGeSi)_5O_{12}$  вирощених на площині  $\{111\}$  підкладки ГГГ ( $Gd_3Ga_5O_{12}$ ).

В запропонованій вище моделі, як площину зсуву розглядали площину  $\{100\}$ . Періоди шарів для півки і підкладки були рівні сталим ґраток. Для переходу до площини  $\{111\}$  необхідно врахувати зміну у періодах для півки і підкладки.

Деформація кристалічної ґратки епітаксійних півок гранатів, вирощених на площині  $\{111\}$  вивчалася в [1], де було показано, що такі півки мають ромбоєдричну структуру. В цій же роботі зазначено, що “величини невідповідності” у значеннях параметрів ґраток півки і підкладки знімаються дислокаціями невідповідності, що утворюються на границях розділу півки і підкладки. З урахуванням усього сказаного, період верхнього

Скупчення точкових дефектів і дислокацій, обумовлених як ефектами росту, так і невідповідністю між параметрами ґраток півки і підкладки, при певних умовах може призвести до утворення тріщин.

Щоб тріщина зародилася і росла, необхідно виконання двох критеріїв – енергетичного і силового [8]. Енергетичний критерій встановлений Гріффітсом. При певних розмірах тріщини енергія тіла знижується. Як видно із рис. 3, при малій



**Рис. 3.** Залежність енергії тіла з тріщиною від її довжини.

довжині  $c$  тріщини енергія зростає і розкриття тріщини є не вигідним, а при  $c > c^*$  - знижується. Критична довжина тріщини визначається із умови

$$\frac{\partial U}{\partial c} = 0, \text{ де } U = 2\gamma c - \frac{\pi c^2 \sigma^2}{4E} \quad (3)$$

$$\frac{\pi c^2 \sigma^2}{4E} - \text{пружна енергія для розкриття тріщини.}$$

Згідно теоретичних розрахунків для Ві-заміщених ФГП довжина екстинції рівна  $\approx 5 \cdot 10^{-6}$  м;

2) зйомка проводилася для ліній з великими

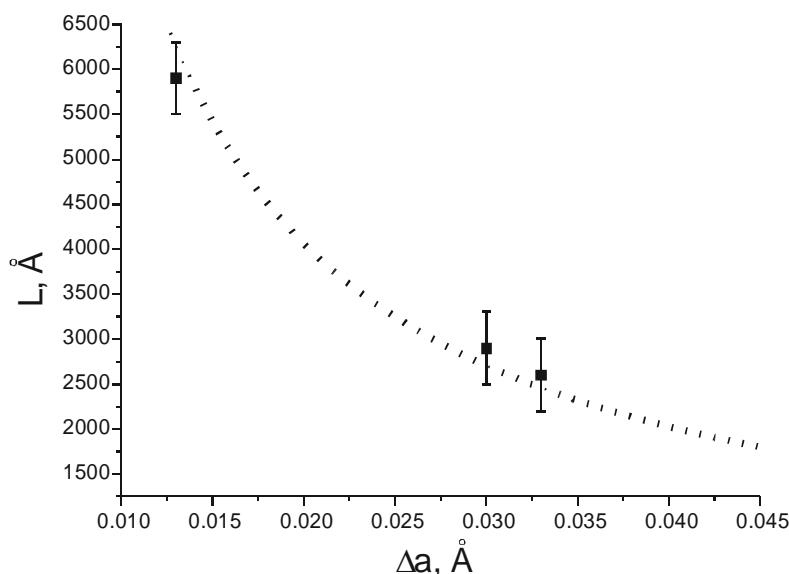


Рис. 4. Залежність величини  $L$  від різниці сталей ґраток плівки і підкладки  $\Delta a$ .

$c^* \approx \frac{\gamma E}{\sigma^2}$ , де  $\gamma$  - поверхнева енергія,  $E$  - модуль Юнга [8].

Енергетична умова  $\frac{\partial U}{\partial c} = 0$  є необхідною. Для зародження і росту тріщини достатньо виконання силового критерію. Він полягає в тому, щоб

індексами НКЛ.

Розміри  $L$  областей когерентного розсіювання (о.к.р.) та величина мікрореформації  $\varepsilon$  визначено методом апроксимації.

В якості зразків для дослідження були вибрані Ві-заміщені ферит-гранатові плівки. Їхні характеристики подані в табл. 1.

Уширення при зйомці визначалося для двох

Таблиця 1

№ зразка	$a_{pl}, \text{Å}$	$a_{pd}, \text{Å}$	$\Delta a, \text{Å}$	$(d/n)_{pd}, \text{Å}$	$(d/n)_{pl}, \text{Å}$
1.	12,349	12,382	0,033	1,7824	1,7871
2.	12,369	12,382	0,013	1,7853	1,7871
3.	12,352	12,382	0,030	1,7828	1,7870
Похибка	$\pm 0,001$	$\pm 0,001$	$\pm 0,001$	$\pm 0,0001$	$\pm 0,0001$

$a_{pl}$  і  $a_{pd}$  - сталі ґраток плівки і підкладки;  $\Delta a = a_{pl} - a_{pd}$  - різниця сталей ґраток;  $(d/n)_{pd}$  і  $(d/n)_{pl}$  - міжплощинні відстані підкладки і плівки.

конфігураційна сила  $F = \frac{dU}{dc}$  була достатньою для

подолання потенціального бар'єру  $U$ , який мішає росту тріщини довжиною  $c$ .

Вимірювання ступеня структурної досконалості монокристалічних ферит-гранатових плівок (ФГП) проводилися на двокристалічному рентгенівському дифрактометрі ДРОН-2.0, методом  $\omega$ -сканування.

Обробка експериментальних результатів виконувалася на основі кінематичної теорії розсіювання рентгенівських променів. Застосування цих розрахунків оправдане такими причинами:

1) товщина плівки менша за довжину екстинції.

порядків рефлексів (444) і (888), виміряних в однакових геометріях.

Теоретичний розрахунок областей когерентного розсіювання проводиться за формулою (1).

Порівняння теоретичних і експериментальних даних подано в табл. 2.

Графік залежності величини  $L$  від  $\Delta a$  подано на рис. 4.

Апроксимацію проведено функцією

$$f(\Delta a) = a a_{pd} (a_{pd} - \Delta a) / \Delta a,$$

$$a = k \frac{\sqrt{2}}{2} = 0.557 \pm 0.021,$$

Таблиця 2

№ зразка	$L_m$ , мкм	$L_e$ , мкм	$\varepsilon$ , $\times 10^{-4}$	$S_{pl}$ , мкм
1.	0,33	0,26	7,94	0,49
2.	0,83	0,59	5,21	1,16
3.	0,36	0,29	7,12	1,25

$L_T$  і  $L_e$  – відповідно теоретичне і експериментальне значення о.к.р.;  $S_{pl}$  – товщина плівки

$$k \approx 0.751, a_{pd} = 12.382 \text{ \AA}$$

Відмінність коефіцієнта  $k$  від одиниці обумовлена тим, що на процес утворення плівки, крім різниці сталих ґраток, впливають і інші фактори. Про вплив цих факторів можна судити за коефіцієнтом  $k$ .

Отже, в роботі було встановлено вплив різниці у сталих ґраток плівки і підкладки на структурну досконалість епітаксійно вирощеної плівки, пояснено утворення блочної структури, одержано формулу для визначення характерного розміру блочної структури монокристалічних плівок та зроблено порівняння теоретичних і експериментальних результатів.

*Автори висловлюють вдячність професору Остафійчуку Б.К. за сприяння у проведенні даного дослідження.*

**Я.Т. Соловко** – аспірант кафедри матеріалознавства і новітніх технологій;

**І.П. Яремій** – аспірант кафедри матеріалознавства і новітніх технологій;

**В.Д. Федорів** – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри матеріалознавства і новітніх технологій;

**І.М. Будзуляк** – кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник кафедри матеріалознавства і новітніх технологій;

**Б.І. Яворський** – кандидат фізико-математичних наук, доцент

- [1] О.Г. Руткин, А.Н. Агеев, Е.Л. Духовская Деформация кристаллической решетки эпитаксиальных пленок иттрий-железного граната // *ЖТФ*, **52**(12), С. 2411-2415 (1982).
- [2] В.И. Гаврилюк, А.Г. Кузьмик, А.О. Матковский, Б.К. Остафийчук, В.М. Пылыпив, И.М. Сольский, В.Д. Федорив, П.И. Шевчук, В.Н. Шевченко Дефекты в монокристаллах гадолиний-галлиевого граната.: Препр. // *АН УССР, Инс-т металлофизики*, **28**(89) – К: 31с. (1989).
- [3] В.И. Пунегов. Кинематическая теория дифракции на дефектной эпитаксиальной пленке с постоянным градиентом деформации // *ЖТФ*, **61**(12), сс.71-81 (1991).
- [4] *Структура и физические свойства твердых тел* // Под ред. Л.С.Палатника, Вища школа, К., (1983).
- [5] Б.М. Гольцман, Ю.А. Бойков, В.А. Данилов Влияние малоугловых границ на диэлектрические свойства эпитаксиальных пленок Ва0.8Sr0.2TiO3 // *ФТТ*, **43**(5), С.874-879 (2001).
- [6] А.А. Русаков. *Рентгенография металлов*, Атомиздат, М, (1977).
- [7] С.С. Горелик, Ю.А. Скаков, Л.Н. Расторгуев. *Рентгенографический и электронно-оптический анализ*, МИСИС, М., 328с. (1994).
- [8] А.Н. Орлов. *Введение в теорию дефектов в кристаллах*, Высшая школа, М., 256 с. (1983).

Y.T. Solovko, I.P. Yaremiy, V.D. Fedoriv, I.M. Budzulyak, B.I. Yavorskiy

## The block structure model of epitaxial ferrite–garnet films

<sup>1</sup>Prekarpathion University named after V.Stefanyk, 57 Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine

<sup>3</sup>Medical Academy, 2 Galitska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine

The structural perfection of Bi-substituted ferrite-garnet films which have been grown on a GGG substrate is investigated by the methods of a two-crystal X-ray diffractometry. The model of creation of dislocation walls and block structure is offered. Analyzing widening of the rocking curves for different reflecting orders is determined sizes of region of coherent dispersing and magnitudes of microstrains.