

PACS numbers: 61.05.cp, 61.72.Dd, 61.72.Nh, 61.80.Jh, 61.82.Fk, 68.55.Ln

## **Моделювання та діагностика деформацій у приповерхневих шарах монокристалів гадоліній-галієвого гранату, імплантованих йонами $F^{+}$**

**В. О. Коцюбинський, В. М. Пилипів, Б. К. Остафійчук, І. П. Яремій,  
О. З. Гарпуль, О. С. Скакунова\*, В. Б. Молодкін\*, С. Й. Оліховський\***

*Прикарпатський національний університет ім. Василя Стефаника,  
вул. Шевченка, 57,  
76025 Івано-Франківськ, Україна  
\*Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,  
бульв. Акад. Вернадського, 36,  
03680, МСП, Київ-142, Україна*

На основі оброблення експериментальних даних високороздільчої Рентгенової дифрактометрії із застосуванням статистичної динамічної теорії дифракції Рентгенових променів у дефектних кристалах одержано розподіл пружних деформацій за глибиною приповерхневого шару монокристалів гадоліній-галієвого гранату, яких було імплантовано йонами  $F^{+}$  з енергією у 90 кеВ. Проаналізовано залежність характеристик деформованого стану кристалу від дози йонної імплантації.

На основе обработки экспериментальных данных рентгеновской дифрактометрии высокого разрешения с применением статистической динамической теории дифракции рентгеновских лучей в дефектных кристаллах получены распределения упругой деформации по глубине приповерхностного слоя монокристаллов гадолиний-галлиевого граната, которые были имплантированы ионами  $F^{+}$  с энергией в 90 кэВ. Проанализирована зависимость характеристик деформированного состояния кристалла от дозы ионной имплантации.

Elastic strain distributions through depth in the subsurface layer of gadolinium-gallium garnet single crystals implanted by  $F^{+}$  ions with energy of 90 keV are determined by means of the high-resolution X-ray diffraction measurement data processing with using the statistical dynamical theory of X-ray diffraction in imperfect crystals. The dependences of strained-crystal characteristics on the implantation dose are analysed.

**Ключові слова:** деформація, йонна імплантація, гадоліній-галієвий гранат, статистична динамічна теорія дифракції.

(Отримано 17 червня 2014 р.)

## 1. ВСТУП

Монокристали гадоліній-галієвого гранату (ГГГ)  $Gd_3Ga_5O_{12}$  використовуються як підкладки при епітаксійному вирощуванні ферит-гранатових плівок (ФГП), що мають широкі можливості для практичного застосування як активні середовища при конструюванні пристроїв функціональної електроніки [1]. Одним з ефективних методів післяростового оброблення приповерхневого шару ФГП є йонна імплантація, яка дозволяє створити в кристалі локальні ділянки із заданими структурними характеристиками, що становить практичний інтерес для магнетомікроелектроніки та інтегральної магнетооптики [2]. Таким чином, дослідження процесів, які відбуваються в приповерхневому шарі ФГП при їх епітаксійному вирощуванні на монокристалічній підкладці та наступній модифікації йонною імплантацією, стає необхідною передумовою створення функціональних матеріалів з прогнозованими часо- та температуростабільними властивостями.

Роботу присвячено встановленню взаємозв'язків між умовами імплантації йонами  $F^+$  та розподілом пружних деформацій в приповерхневих шарах монокристалів ГГГ. Результати роботи важливі для пояснення перебігу процесів радіаційного дефектоутворення в монокристалічних ФГП.

## 2. ОБ'ЄКТИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Досліджувалися монокристали ГГГ, вирощені методом Чохральського із кристалографічною площиною зрізу (111). Імплантацію йонами  $F^+$  виконували на прискорювачі МРВ-202 за умов, що виключали каналювання йонів-імплантантів та відпал йонним пучком. Встановлювався розподіл пружних деформацій в приповерхневих шарах монокристалів ГГГ, імплантованих йонами  $F^+$  з енергією  $E = 90$  кеВ та дозами у  $10^{13}$ ,  $2 \cdot 10^{13}$ ,  $4 \cdot 10^{13}$ ,  $6 \cdot 10^{13}$  та  $10^{14}$   $см^{-2}$ .

Експериментальні криві дифракційного відбивання (КДВ) одержували методом високороздільної двокристалльної Рентгенової дифрактометрії в симетричній геометрії дифракції за Бреґгом із застосуванням двох монохроматорів у взаємно дисперсійному розташуванні. Для встановлення характеристик деформованого стану імплантованого шару при аналізі експериментальних результатів використано модель динамічної дифракції Рентгенових променів у монокристалах з випадково розподіленими дефектами та просторово неоднорідним профілем напруг [3].

Моделювання процесу йонної імплантації методом Монте-Карло

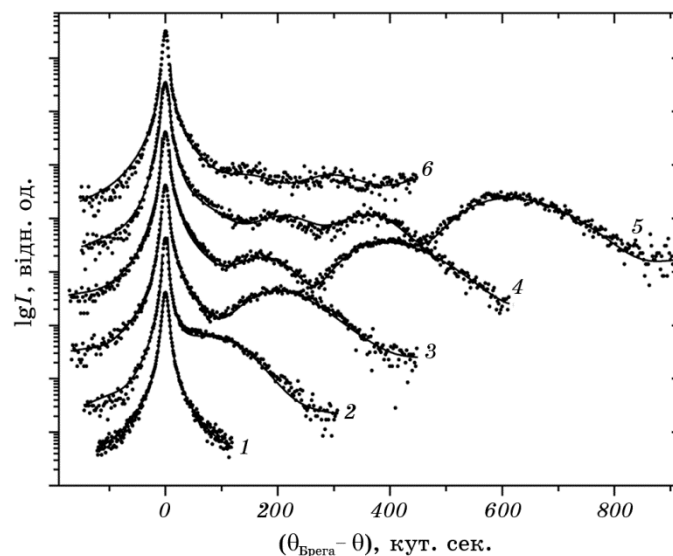
виконано за допомогою програми SRIM-2008 [4].

### 3. ОДЕРЖАНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ АНАЛІЗ

На експериментальних КДВ, одержаних для імплантованих ГГГ, виявлено осциляції інтенсивності, зумовлені дифракцією Рентгенових променів на деформованому імплантованому шарі (рис. 1).

Розрахунок теоретичних КДВ за умови підбору типу просторового розподілу напруг дозволив одержати інформацію щодо пружньо деформованого стану йонно-імплантованого шару півки. Вплив структурних дефектів на розподіл деформацій в неімплантованих монокристаллах ГГГ та епітаксійних півках на підкладці ГГГ розглядався нами в роботах [5, 6].

При застосованих в роботі режимах імплантації товщина пошкодженого шару не перевищує 0,3 мкм, тому відносна інтенсивність додаткових піків на КДВ складає близько 1% інтенсивності Бреґґового максимуму монокристалу. Для вихідного зразка та зразка, імплантованого з дозою  $10^{13} \text{ см}^{-2}$ , КДВ зображено в одному масштабі інтенсивності, а інтенсивності кожної наступної кривої (для кращої візуалізації на логаритмічній шкалі) збільшено на порядок. Радіаційні дефекти зумовлюють підвищення інтенсивності дифуз-



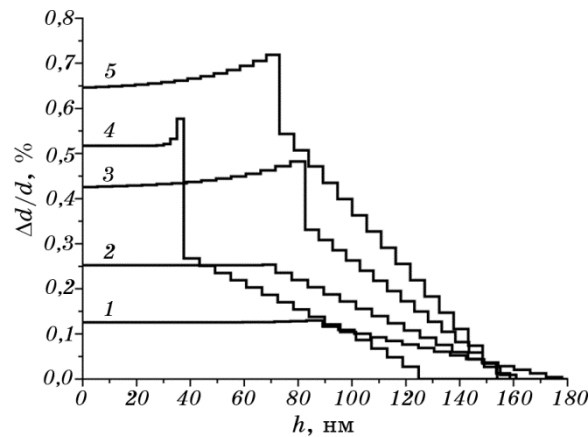
**Рис. 1.** КДВ (симетричне відбивання (444)), одержані для монокристалів ГГГ: вихідного (1) та імплантованих йонами  $F^{+}$  ( $E = 90 \text{ кеВ}$ ) з дозами у  $10^{13}$  (1),  $2 \cdot 10^{13}$  (2),  $4 \cdot 10^{13}$  (3),  $6 \cdot 10^{13}$  (4) та  $10^{14}$  (6)  $\text{см}^{-2}$  (точки — експеримент, суцільні лінії — розрахунок).

ної складової розсіяння Рентгенових променів, що супроводжується зростанням фону дифракційної картини, сформованої випромінюванням, когерентно розсіяним в імплантованому шарі з градієнтом міжплощинної відстані. Збільшення дози імплантації на величину дифузної складової розсіяння Рентгенових променів впливає незначно.

При побудові моделі кристалу та розрахунку його дифракційних параметрів використовували алгоритми, описані в роботах [7, 8]. Для вибору моделі деформації в йонно-імплантованих шарах використовують карти оберненого простору від несиметричних рефлексів, які дають можливість встановити характеристики напруженого стану деформованих йонною імплантацією приповерхневих шарів. Аналіз перерізів оберненого простору біля вузла оберненої ґратниці (880) шляхом поєднання  $\omega$ - та  $2\theta$ -сканування показав, що міжплощинні відстані в пошкодженому шарі та в ідеальній частині півки в площині росту залишаються незмінними, тобто цей шар перебуває в повністю напруженому стані.

В результаті апроксимації експериментальних КДВ теоретично розрахованими на основі динамічної теорії розсіяння Рентгенових променів, одержано розподіли пружних деформацій з глибиною імплантованого приповерхневого шару монокристалу в напрямку, перпендикулярному до площини зрізу (рис. 2). При цьому розрахунок кожного профілю відносної деформації відбувався без апріорних припущень про особливості його вигляду.

Імплантований шар розбивався на кілька десятків (30–40) підшарів, відносна деформація в кожному з яких змінювалася нами для одержання максимального узгодження між експерименталь-



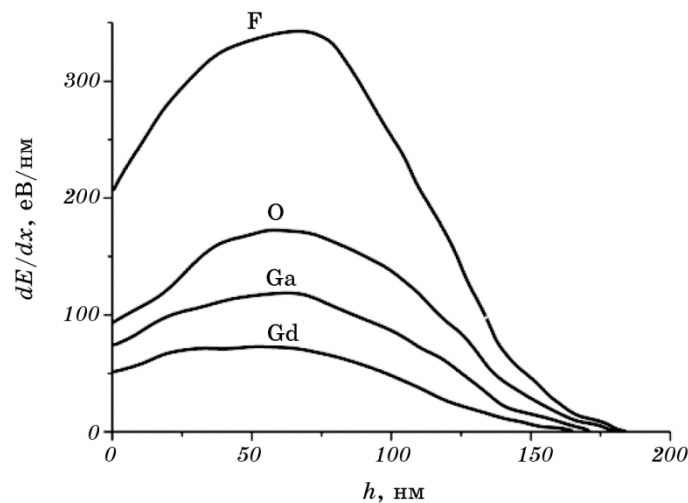
**Рис. 2.** Розподіл нормальних деформацій в приповерхневих шарах монокристалів ГТТ, імплантованих різними дозами йонів  $F^+$  ( $E = 90$  кеВ). Залежності 1–5 відповідають дозам, наведеним у тому ж порядку, що й на рис. 1.

ною та теоретично розрахованою КДВ. Дифузна складова, зумовлена розсіянням на точкових дефектах, моделювалася кривою у формі псевдо-Фойгта. Збільшення дози імплантації в діапазоні  $(1-6) \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$  призводить до лінійного зростання максимальної відносної деформації при незначних змінах товщини пошкодженого шару, яка складає 160–180 нм, що узгоджується з результатами моделювання процесу дефектоутворення, зокрема, з протяжністю профілів розподілу енерговиділення при пружньому гальмуванні та кількості йонів мішені, зміщених імплантантом на одиниці довжини пробігу (рис. 3 і 4).

Відносна деформація в нормальному до поверхні монокристалу напрямку набуває максимальних значень в інтервалі глибин 70–80 нм, тобто в області, де максимальною є кількість зміщених йонів матриці. Релаксація напруг, відображена зменшенням максимальної величини відносної деформації, розпочинається при дозі у  $10^{14} \text{ см}^{-2}$ . Експериментально встановлена критична доза збігається з даними, одержаними чисельними методами.

Ріст максимального та інтегральних значень відносної деформації з набором дози імплантації відбувається за аналогічними лінійними законами, що відображає пружній характер генерованих при імплантації механічних напруг (рис. 5).

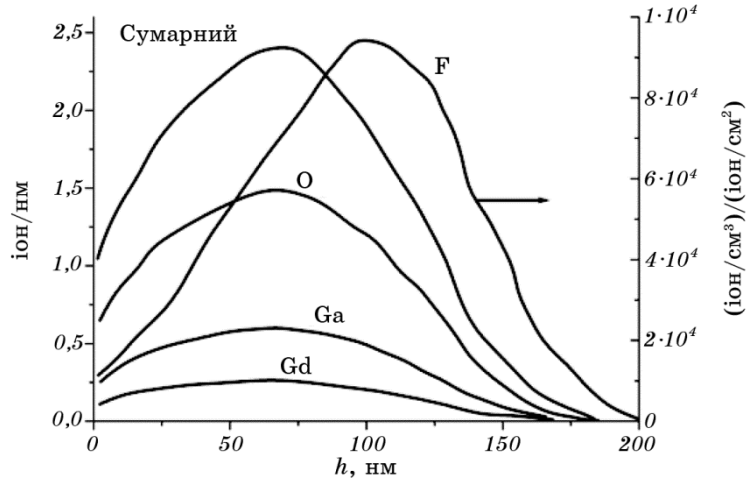
Додаткову інформацію одержано з порівняння експериментальної залежності максимальної відносної деформації від дози імплантації та побудованої з базуванням на результатах моделювання процесу дефектоутворення дозової залежності ступеня відносного розупорядкування структури ГТТ (рис. 6). Виявлено, що руйнуван-



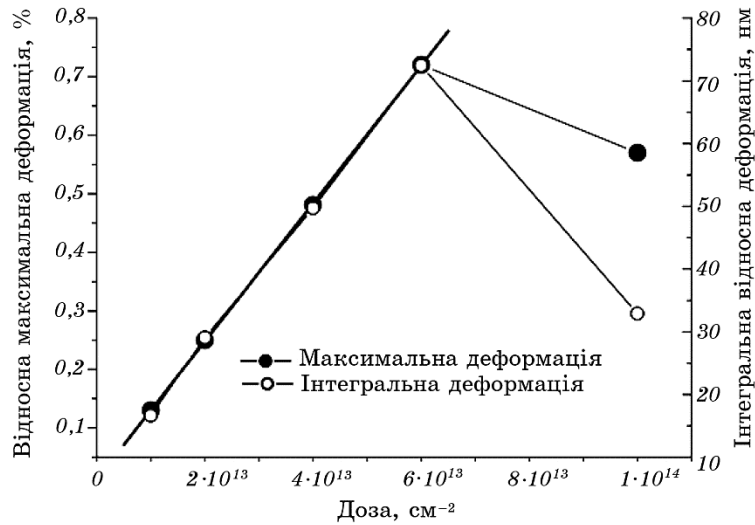
**Рис. 3.** Розподіл енерговиділення при пружніх зіткненнях імплантанту та зміщених йонів кристалу.

ня ґратниці відбувається при відносному розупорядкуванні, близькому до 30%.

Таким чином, аморфізація імплантованого шару розпочинається при зміщенні з регулярних позицій приблизно третини йонів крис-



**Рис. 4.** Поелементні розподіли кількості йонів мішені, зміщених на 1 нм пробігу імплантанту, та нормований до дози опромінення профіль імплантованих в монокристал ГГГ йонів  $F^+$  ( $E = 90$  кеВ).

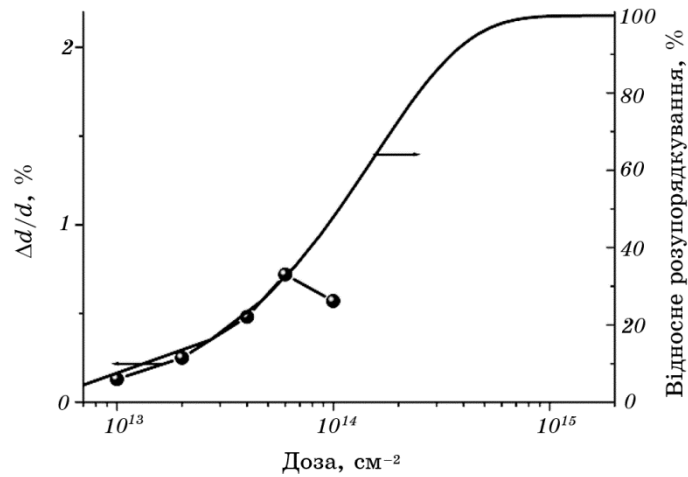


**Рис. 5.** Дозові залежності максимального та інтегрального значень відносної деформації в нормальному напрямку для приповерхневого шару монокристалу ГГГ, імплантованого йонами  $F^+$  ( $E = 90$  кеВ).

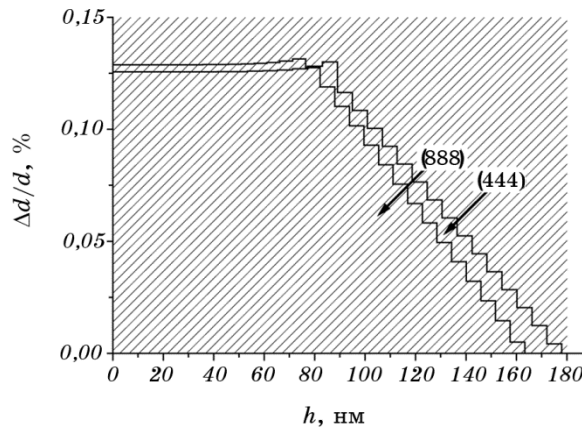
талічної ґратниці. Одержаний висновок корелює з результатами моделювання.

Для перевірки вірогідності застосованих методів аналізу здійснено розрахунок профілів відносної деформації на основі КДВ, одержаних для двох симетричних відбивань (444) та (888) одного і того ж зразка (доза імплантації —  $10^{13} \text{ см}^{-2}$ ) (рис. 7).

Відмінності в одержаних результатах спостерігаються тільки для



**Рис. 6.** Дозові залежності максимальної відносної деформації (експеримент, точки) та ступеня відносного розупорядкування (розрахунок, суцільна крива) для монокристалу ГПГ, імплантованого йонами  $F^+$  ( $E = 90 \text{ кеВ}$ ).



**Рис. 7.** Розподіл пружних деформацій в кристалі ГПГ, імплантованому йонами  $F^+$  ( $E = 90 \text{ кеВ}$ , доза —  $10^{13} \text{ см}^{-2}$ ) в напрямку, перпендикулярному до поверхні (розраховано із КДВ для рефлексів (444) та (888)).

значень товщини пошкодженого шару, в той час як форма профілю та максимальне значення деформації повністю збігаються.

#### 4. ВИСНОВКИ

Проаналізовано деформований стан приповерхневих шарів монокристалів ГГГ, імплантованих йонами  $F^+$  з енергією 90 кеВ. Одержано інформацію про залежність від дози імплантації розподілу напруг в нормальному напрямку до площини зрізу монокристалу. Встановлено, що ріст дози імплантації в діапазоні  $(1-6) \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$  зумовлює лінійне зростання максимальної відносної деформації при незначних змінах товщини пошкодженого шару, яка складає 160–180 нм. За аналогічним лінійним законом зростає з набором дози імплантації інтегральна відносна деформація, що свідчить про пружний характер ґенерованих напруг.

Відносна деформація в напрямку, перпендикулярному до поверхні монокристалу, набуває максимальних значень на глибині 70–80 нм, що відповідає області максимуму ефективності радіаційного дефектоутворення. Релаксація напруг в імплантованому шарі розпочинається при дозі опромінення  $10^{14} \text{ см}^{-2}$ . Пластичні процеси в ґратниці ГГГ фіксуються при значеннях відносного розупорядкування, близьких до 30%. Адекватність застосованого підходу, базованого на динамічній теорії розсіяння Рентгенових променів, підтверджено близькістю характеристик профілів відносної деформації, розрахованих на основі аналізу КДВ, одержаних для відбивань (444) та (888) одного зразка.

#### ПОДЯКА

Роботу виконано при підтримці Національної академії наук України.

#### ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Л. М. Летюк, В. Г. Костишин, А. В. Гончар, *Технология ферритовых материалов магнетoeлектроники* (Москва: МИСиС: 2005).
2. Дж. С. Вильямс, Дж. М. Поут, *Ионная имплантация и лучевая технология* (Киев: Наукова думка: 1988).
3. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, T. P. Vladimirova, E. S. Skakunova, R. F. Seredenko, and B. V. Sheludchenko, *Phys. Rev. B*, **78**, No. 22: 224109 (2008).
4. J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, and J. P. Biersack, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, **268**, Issues 11–12: 1818 (2010).
5. В. М. Пилипів, Б. К. Остафійчук, Т. П. Владімірова, Є. М. Кисловський, В. Б. Молодкін, С. Й. Оліховський, О. В. Решетник, О. С. Скакунова, С. В.



- Лізунова, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*, **9**, вип. 2: 375 (2011).
6. В. М. Пилипів, С. Й. Оліховський, Т. П. Владімірова, О. С. Скакунова, В. Б. Молодкін, Б. К. Остафійчук, Є. М. Кисловський, О. В. Решетник, С. В. Лізунова, О. З. Гарпуль, *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 9: 1147 (2011).
  7. M. Wormington, C. Panaccione, K. M. Matney, and D. K. Bowen, *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A*, **357**: 2827 (1999).
  8. A. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction* (Oxford: Oxford University Press: 2003).

## REFERENCES

1. L. M. Letyuk, V. G. Kostishin, and A. V. Gonchar, *Tekhnologiya Ferritovykh Materialov Magnitoelektroniki* (Moscow: MISiS: 2005) (in Russian).
2. J. S. Williams and J. M. Poate, *Ionnaya Implantatsiya i Luchevaya Tekhnologiya (Ion Implantation and Radiation Technology)* (Kiev: Naukova Dumka: 1988) (Russian translation).
3. V. B. Molodkin, S. I. Olikhovskii, E. N. Kislovskii, T. P. Vladimirova, E. S. Skakunova, R. F. Seredenko, and B. V. Sheludchenko, *Phys. Rev. B*, **78**, No. 22: 224109 (2008).
4. J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, and J. P. Biersack, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, **268**, Issues 11–12: 1818 (2010).
5. V. M. Pylypiv, B. K. Ostafiychuk, T. P. Vladimirova, Ye. M. Kyslovskyy, V. B. Molodkin, S. J. Olikhovskyy, O. V. Reshetnyk, O. S. Skakunova, and S. V. Lizunova, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotekhnologii*, **9**, Iss. 2: 375 (2011) (in Ukrainian).
6. V. M. Pylypiv, S. J. Olikhovskyy, T. P. Vladimirova, O. S. Skakunova, V. B. Molodkin, B. K. Ostafiychuk, Ye. M. Kyslovskyy, O. V. Reshetnyk, S. V. Lizunova, and O. Z. Garpul', *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **33**, No. 9: 1147 (2011) (in Ukrainian).
7. M. Wormington, C. Panaccione, K. M. Matney, and D. K. Bowen, *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A*, **357**: 2827 (1999).
8. A. Authier, *Dynamical Theory of X-Ray Diffraction* (Oxford: Oxford University Press: 2003).