



УДК 548.73/.75+621.315.592

© 2008

Член-кореспондент НАН України **Б. К. Остафійчук, В. М. Ткачук, О. М. Ткачук, В. М. Пилипів, О. О. Григоруку**

Моделювання радіаційних та релаксаційних процесів в імплантованих іонами кисню плівках залізоітрієвого гранату

The mechanisms of the formation of defects in superficial layers of epitaxial yttrium iron garnet films during the implantation by oxygen ions ($E = 90$ keV) are investigated by mathematical modeling methods. Secondary implantation processes and the evolution of the cascade collisions of target atoms up to a thermodynamical equilibrium state are studied.

Процеси, індуковані іонною імплантацією в кристалічні багатокомпонентні мішені, є складними як для експериментального вивчення, так і для модельного дослідження. Їх нерівноважний характер на етапі розвитку та формування каскаду атомних зіткнень (КАЗ) зумовлює значні труднощі для опису фізико-хімічних явищ у приповерхневих шарах, таких як вторинні імплантаційні процеси розпилення, зміщення іонів матриці, розподіл імплантованої домішки, дефектоутворення та фазові перетворення [1].

Експериментальні дослідження таких явищ є малоефективними, оскільки фіксується тільки кінцевий результат після проходження більшості релаксаційних процесів в імплантованій зоні. Метастабільність, “псевдоаморфність” стану модифікованої іонною імплантацією приповерхневої ділянки зумовлює протікання тут релаксаційних процесів навіть при кімнатній температурі протягом проміжків часу, що вимірюються місяцями [2].

Показовими і, до певної міри, модельними для розгляду багатокомпонентними мішенями можуть бути монокристалічні гранатові структури номінального складу $Y_3Fe_5O_{12}$. Чутливість експериментальних методів, таких як конверсійна електронна месбауерівська (КЕМ) спектроскопія та рентгеноструктурні дослідження, дає можливість отримувати детальну інформацію про кристалічну та магнітну мікроструктуру імплантованих шарів [3]. Вхідження до складу матриці елементів зі значною різницею за атомною масою дозволяє вибором типу імплантованого іона ініціювати та оцінювати ті чи інші механізми розвитку імплантаційного каскаду і, як наслідок, постімплантаційних релаксаційних процесів. Поєднання модельних розрахунків та експериментальних досліджень дає можливість проконтролювати правильність закладених в комп'ютерну модель підходів.

Для вивчення розподілу імплантованої домішки за глибиною поверхневого шару (якщо дефектами кристалічної структури можна знехтувати) традиційно використовується метод Монте-Карло. Наближені підходи врахування вторинних ефектів перерозподілу компонент мішені та густини виділеної у кристалічну структуру мішені енергії імплантованого іона дозволяють оцінити можливість виникнення колективних ефектів перебудови кристалічної структури [4]. Метод є принципово неприйнятним, коли мова йде про постімплантаційні релаксаційні процеси, рівень дефектності імплантованої кристалічної структури або її метастабільний стан [1, 3].

Поява потужних комп'ютерних систем дала можливість реалізувати моделювання методом молекулярної динаміки імплантаційних процесів [6], особливо в низькоенергетичній ділянці. Практично розвиток КАЗ в цілому можна розглядати за допомогою методу Монте-Карло, а релаксаційні процеси в окремих ділянках — методами молекулярної динаміки для коректного опису рекомбінаційно-рекристалізаційних ефектів.

В роботі методом модельних досліджень вивчалися процеси дефектоутворення в монокристалі залізоїтрієвого граната при бомбардуванні іонами кисню з енергією 90 кеВ без врахування впливу поверхні. Основна увага приділялася вивченню вторинних імплантаційних процесів (які є визначальними у формуванні всього каскаду атомних зіткнень) за участю основних компонент мішені (кисню, заліза, ітрію). Для моделювання використовувалася гранатова структура $Y_3Fe_5O_{12}$ із 100000 атомів (625 елементарних комірок, стала ґратки 12,32 Å) з періодичними граничними умовами на бокових гранях.

Взаємодія між атомами кластера описувалася з використанням потенціалу парної атом-атомної (Бекінгема) взаємодії у вигляді

$$V(r) = Ae^{-r/\rho} - \frac{C}{r^6}. \quad (1)$$

Для моделювання використано запропоновані в [7] параметри потенціалу A , ρ , C . Рівняння руху атомів системи розв'язувалися з використанням алгоритму Варлета з часовим кроком у межах 1 фс. Для вибраних компонент мішені було виконано по 100 розрахунків КАЗ, кожен із яких відслідковувався до встановлення в ньому термодинамічної рівноваги протягом 5–10 пс.

Основні модельні та експериментальні результати. Як видно із результатів молекулярно-динамічного моделювання, каскад атомних зіткнень при імплантації кисню складається, в основному, із точкових радіаційних дефектів (рис. 1). На КАЗ завжди можна виділити ряд ділянок, де густина енерговиділення в атомну систему мішені перебуває на рівні формування ефекту теплового піка.

Моделювання постімплантаційних процесів в таких ділянках показало, що в 90–95% випадків час їх існування є недостатнім для значного зміщення атомів мішені зі своїх положень рівноваги та формування аморфної структури. Результати моделювання вказують також на те, що визначальними тут є не теплові процеси, а ефекти кінетичного перерозподілу атомів мішені під дією первинних та вторинних імплантаційних процесів. У сформованій при цьому ділянці кристалічної структури виділяється центральна зона, збіднена кисневими атомами, яка перебуває під дією стискаючих напруг оточуючого середовища і являє собою еліпсоїд обертання з півосями у співвідношенні 1 : 2 та розмірами в межах 1–5 об'ємів елементарної комірки. З урахуванням геометрії процесу іонної імплантації переважаючою є просторова орієнтація більшої півосі еліпсоїда від поверхні в глибину вздовж напрямку $\langle 111 \rangle$ в кристалічній структурі. Відповідним є і просторовий розподіл напруг в таких ді-

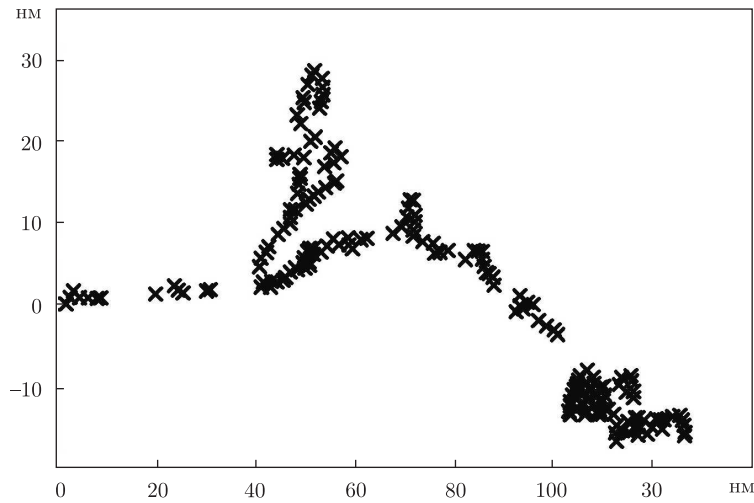


Рис. 1. Каскад атомних зіткнень, викликаний входженням іона O^+ із енергією 90 кеВ в $Y_3Fe_5O_{12}$

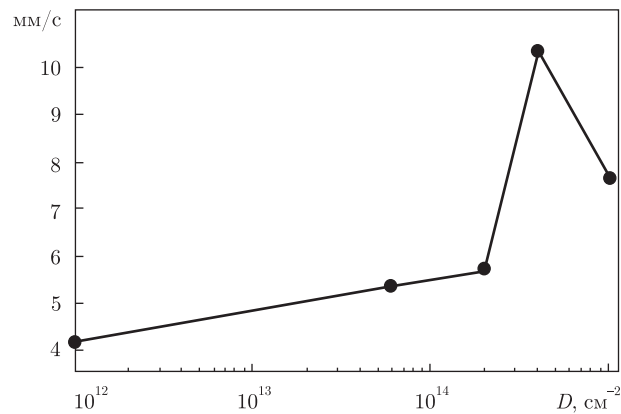


Рис. 2. Дозова зміна ширини парціальних ліній КЕМ спектра $Y_3Fe_5O_{12}$, імплантованого іонами кисню

лянках: з боку поверхні вони нульові або навіть розтягуючі, від'ємні, а з боку об'єму — максимально стискаючі із величиною до $\Delta a/a \sim 10\%$. Магнітне впорядкування таких областей з урахуванням рівня їх дефектності за аніонною підґраткою та зміна геометрії і відстані надобмінних взаємодій вказують на те, що в межах 10–30% вони вже при кімнатній температурі перебувають в парамагнітному стані.

Результати моделювання корелюють із даними експериментальних досліджень КЕМ спектроскопії. Так, на рис. 2, 3 зображена дозова поведінка основних параметрів експериментальних КЕМ спектрів. На початкових етапах набору дози визначальними є два взаємодоповнюючих процеси: з одного боку, це утворення точкових дефектів, які визначають зростання ширин ліній КЕМ спектрів за рахунок спотворення локального оточення резонансного атома, а з другого боку, це формування парамагнітних мікроділянок і зростання парамагнітної фази (див. рис. 3). Важливим є той момент, що, як випливає з результатів моделювання, парамагнітний стан та об'єм таких мікроділянок є чутливими до пружної деформації кристалічної ґратки. Так, деформація ґратки порядку $\Delta a/a \sim 5\text{--}7\%$ веде до різкого зростання як імовірності утворення парамагнітних мікроділянок (в два — три рази), так і їх лінійних розмірів (див. рис. 3).

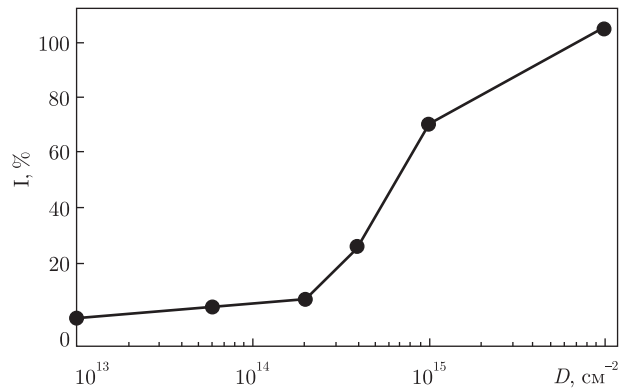


Рис. 3. Відносна інтенсивність парамагнітної фази КЕМ спектра $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, імплантованого іонами кисню

Саме ці фактори пояснюють різке зростання ефективності процесів переходу кристалічної структури в парамагнітний стан при досягненні доз $1 \cdot 10^{14} \div 4 \cdot 10^{14}$ іон/см². Величина дози $4 \cdot 10^{14}$ іон/см² вважається критичною і відповідальною за те, що практично вся імплантована зона від поверхні вглиб кристалу (за даними експериментальних КЕМ-спектрів) переходить до парамагнітного стану. Згідно з рентгеноструктурними дослідженнями [3], саме при цих дозах загальний рівень деформації приповерхневих шарів досягає величин, достатніх для зміни механізмів руйнування магнітного впорядкування: інтенсивні процеси формування точкових радіаційних дефектів стають другорядними порівняно з об'ємними радіаційними процесами в пружно-деформованому імплантованому шарі. Процеси дефектоутворення в межах окремих мікроділянок під впливом пружно-деформованого стану інтенсифікуються не тільки в межах КАЗ, але і по всьому іонно-імплантованому шарі.

1. *Ионная имплантация и лучевая технология* / Под. ред. Дж. С. Вильямса, Дж. М. Поута. – Киев: Наук. думка, 1988. – 360 с.
2. *Мокляк В. В.* Особливості кристалічної та магнітної мікроструктури LaGa-заміщених епітаксійних плівок залізоітрієвого гранату / Автореф. дис. канд. фіз.-мат. наук. – Івано-Франківськ, 2007. – 17 с.
3. *Остафийчук Б. К., Олейник В. А., Пыльпин В. М. и др.* Кристаллическая и магнитная структура имплантированных слоев монокристаллических пленок железиттриевого граната. – Киев, 1991. – 70 с. (Препринт / АН УССР, Ин-т металлофизики.)
4. *Остафийчук Б. К., Ткачук В. М., Ворончак О. М., Яворский Б. И.* О возможном механизме аморфизации поверхности феррит-гранатовых пленок вследствие ионной имплантации / Металлофизика и новейшие технологии. – 1994. – **16**. – С. 51–54.
5. *Оболенский С. В.* Структура кластера радиационных дефектов при нейтронном облучении полупроводников / Тр. 2-го совещания по проекту НАТО STP – 973799 Semiconductors. – Нижний Новгород, 2002. – С. 155–164.
6. *Корнич Г. В., Бетц Г., Бажин А. И.* Молекулярно-динамическое моделирование образования дефектов в кристалле алюминия при бомбардировке ионами низких энергий // Физика тверд. тела. – 2001. – **43**, вып. 1. – С. 30–34.
7. *Donnerberg H., Catlow C. RA.* Atomistic computer simulation of yttrium iron garnet (YIG) as an approach to materials defect chemistry: I. Intrinsic defects // J. Phys.: Condens. Matter. – 1993. – **5**. – P. 2947–2960.

Прикарпатський національний університет
ім. Василя Стефаника, Івано-Франківськ

Надійшло до редакції 27.11.2007