

ВПЛИВ ІМПЛАНТАЦІЇ ІОНАМИ ГЕЛІЮ НА ФОРМУ ЕЛЕМЕНТАРНОЇ КОМІРКИ У ПРИПОВЕРХНЕВИХ ШАРАХ МОНОКРИСТАЛІВ ГГГ

І.П. Яремій, У.О. Томин, М.М. Уманців, В.І. Кравець

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника (Івано-Франківськ)
Україна*

Надійшла до редакції 05.04.2013

Досліджено трансформацію кристалічної ґратки в іонно-імплантованих шарах монокристалів галій-гадолінієвого гранату. Встановлено, що у площині пластин монокристалів ГГГ при імплантації іонами He^+ деформація кристалічної ґратки в імплантованому шарі відбувається тільки у перпендикулярному до площини пластин напрямку, а елементарна комірка понижує свою симетрію з кубічної до ромбоєдричної.

Ключові слова: профіль деформації, іонна імплантатія, гадоліній-галієвий гранат, елементарна комірка.

ВЛИЯНИЕ ИМПЛАНТАЦИИ ИОНАМИ ГЕЛИЯ НА ФОРМУ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ В ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЯХ МОНОКРИСТАЛЛОВ ГГГ

И.П. Яремий, У.А. Томин, М.М. Уманцев, В.И. Кравець

Исследовано трансформацію кристаллической решетки в ионно-имплантированных слоях монокристаллов галлий-гадолиниевый граната. Установлено, что в результате имплантации ионами He^+ деформация кристаллической решетки в имплантированном слое монокристаллов галлий-гадолиниевый граната происходит только в перпендикулярном к плоскости пластин направлении, а элементарная ячейка снижает свою симметрию с кубической к ромбоэдрической.

Ключевые слова: профиль деформации, ионная имплантация, гадолиний-галлиевый гранат, элементарная ячейка.

EFFECT OF IMPLANTATION BY HELIUM IONS ON THE SHAPE OF THE UNIT CELL IN THE SUBSURFACE LAYERS OF GGG SINGLE CRYSTALS

I.P. Yaremiy, U.O. Tomyn, M.M. Umantsiv, V.I. Kravets

The transformation of the crystal lattice in ion-implanted layers of gadolinium gallium garnet single crystals was investigated. It was determined that the deformation of the crystal lattice in the implanted layer as a result of implantation by He^+ ions occurs only in the perpendicular to the plane of plates direction, and unit cell reduces its symmetry from cubic to rhombohedral.

Keywords: deformation profile, ion implantation, gadolinium gallium garnet, unit cell.

ВСТУП

Для виготовлення сучасних мікроелектронних і оптоелектронних пристроїв, в яких використовуються гетероструктури, надзвичайно важливим є наявність точних даних про атомну концентрацію легуючих елементів, їх розподіл та створені ними напруження в ґратці. Так, наприклад, деформація ґратки пластин монокристалів ГГГ впливає на показник заломлення хвильового шару і є важливим чинником при виготовленні елементів на їх основі [1, 2]. Одним з найпоширеніших методів цілеспрямованої модифікації приповерхневих шарів монокристалів є іонна імплантатія, основними позитивними характеристиками якої є можливості точного контролю кількості введених атомів, використання для

будь-яких комбінацій іон-мішень, а також можливість керування розподілом по глибині іонів-імплантатів, зміщених іонів матриці, механічних напруг та деформації [3].

Метою даної роботи було вивчення деформацій, які виникають в приповерхневих шарах монокристалів галій гадолінієвого гранату після їх імплантатії іонами He^+ .

ОБ'ЄКТИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Пластини монокристалів гадоліній-галієвого гранату ($\text{Gd}_3\text{Ga}_5\text{O}_{12}$) вирощувалися методом Чохральського. Післяростова обробка включала механічну шлі-фовку, механічну, хіміко-механічну та хімічну поліровки; поверхня підкладок відповідала 14 класу чистоти. Імплантатія проводилася на установці МРВ-202 фір-

ми "Balzers" в режимі, що виключає каналювання (під кутом $\sim 7^\circ$ від нормалі до поверхні зразка). Щоб звести до мінімуму ефект самовідпалу густина іонного струму під час імплантації не перевищувала $0,2 \text{ мкА/см}^2$.

X-променеві дифрактометричні дослідження здійснювалися в бездисперсійній двокристалній схемі в геометрії Брега в $\text{Cu}_{\text{K}\alpha 1}$ випромінюванні на дифрактометрі ДРОН-3. В якості монохроматора використовувався досконалий монокристал ГТТ з площиною зрізу (111). Міжплощинна відстань визначалася методом Бонда.

З експериментально одержаних кривих дифракційного відбивання (КДВ) розраховувалися профілі відносної деформації $\Delta d/d(z)$. Дані розрахунки проводилися шляхом моделювання поширення X-променів в неідеальному кристалі засобами динамічної теорії розсіяння X-променів у формі рівнянь Такагі [4, 5]. У зв'язку з тим, що при іонній імплантації у приповерхневому шарі міжплощинна відстань не є сталою по глибині величиною, весь порушений шар розділявся на підшари, в межах яких вона вважалася незмінною. Амплітуда інтенсивності дифрагованої хвилі обчислювалася за допомогою рекурентних співвідношень, одержаних для випадку бікристалу, при цьому для кожного наступного підшару використовувалася амплітуда інтенсивності дифрагованої хвилі від всіх нижчезалегаючих підшарів.

АНАЛІЗ НАПРУЖЕНОГО СТАНУ ІОННО-ІМПЛАНТОВАНИХ ШАРІВ ГТТ ЗА ДОПОМОГОЮ КАРТ ОБЕРНЕНОГО ПРОСТОРУ

Якщо зміну відносної деформації по товщині монокристалу ГТТ можна отримати із КДВ для симетричних (444) і (888) відбивань, то зміну міжплощинної відстані в площині пластини (визначає напружений стан шаруватої структури) через відсутність достатньої точності досить складно визначити навіть із асиметричних відбивань.

При імплантації кристалічна ґратка може спотворюватись як у нормальному до поверхні напрямку, так і в паралельній до поверхні площині. У випадку однакового у всіх напрямках спотворення відхилення дифрагованого променя від брегівського напрямку для будь-якої відбиваючої площини в недеформованій частині кристалу задається умовою

$\Delta\Theta = -\frac{\Delta d}{d} \text{tg}\Theta_B$, де $\Delta d/d$ – відносна зміна міжплощинної відстані. Форма елементарної комірки при цьому не змінюється. В іншому крайньому випадку, коли деформація відбувається тільки в нормальному до поверхні напрямку, змінюються не тільки відстані між сусідніми відбиваючими площинами, але й кут нахилу непаралельних до поверхні площин, що призводить до зміни кутового відхилення дифрагованого променя:

$$\Delta\Theta = -\frac{\Delta d}{d} (\text{tg}\Theta_B \pm \text{tg}\psi),$$

де $\psi = \Theta_B - \Theta_{\text{in}}$, $\Delta d/d$ – відносна зміна міжплощинної відстані косої площини, Θ_{in} – кут ковзання падаючого променя. При цьому елементарна комірка для кристала кубічної сингонії із площиною зрізу (111) з кубічної перетворюється в ромбоєдричну із змінними по глибині сталою ґратки та кутом при вершині ромбоєдра. У більш загальному випадку, коли і нормальна $\Delta d^\perp/d$, і тангенціальна $\Delta d^\parallel/d$ складові деформації залежать від глибини, кутове відхилення

$$\Delta\Theta = -\left(\frac{\Delta d^\perp}{d} + \frac{\Delta d^\parallel}{d} \frac{\text{tg}\Psi}{\cos\Psi}\right) \text{tg}\Theta_B \pm \left(\frac{\Delta d^\perp}{d} - \frac{\Delta d^\parallel}{d}\right) \text{tg}\Psi.$$

Звичайно, для симетричної зйомки при обчисленні профілю деформації не має значення, чи елементарна комірка розширюється в боки, однак і інформацію про таке розширення одержати неможливо. Що ж до асиметричної зйомки, то виникає проблема: котрий з трьох вище вказаних випадків реалізується у досліджуваному матеріалі, оскільки від цього залежить спосіб обчислення профілю деформації.

Для одержання необхідної інформації виконувалися детальні вимірювання карт оберненого простору (КОП), які зображають розподіл розсіяної зразком інтенсивності як функцію координат в оберненому просторі.

Картографія оберненого простору застосовується для збільшення точності і розширення області використання високороздільної X-променевої дифрактометрії (дослідження ступеня релаксації та вимірювання розподілу напруг у шаруватих структурах, встановлення вкладу мозаїчності структури кристалу, гра-

дієнта механічних напруг і дифузного розсіяння у фізичне уширення дифракційних ліній і т.п. [6 – 8]). Для отримання карт оберненого простору використовувався позиційно-чутливий детектор. При розташуванні даного детектора перпендикулярно напрямку дифрагованої хвилі, в оберненому просторі відразу реструється сектор сфери Евальда (комбінація $\omega/2\theta$ - та ω -сканування), який зазвичай розглядають у системі осей q_y, q_x – відповідно по нормалі і вздовж поверхні кристалічної пластини. Варто зауважити, що в симетричній геометрії Брега КОП не несуть якої-небудь нової інформації, в порівнянні з їх перерізами (кривими ω - і $\omega/2\theta$ -сканування) [9]. Релаксація шаруватих структур фіксується на картах розподілу інтенсивності навколо вузлів оберненої ґратки, що відповідають асиметричним брегівським відбиванням [10], для яких вектор дифракції становить деякий кут з нормаллю. Якщо на розподілі інтенсивності центри, що відповідають двом сусіднім шарам або шару і підкладці, розташовані на нормалі (вздовж осі q_y), то між ними не відбулося релаксації і гетерограниця когерентна, якщо ні, – то це вказує на релаксацію. Релаксація буде повною, якщо вузли лежать вздовж напрямку вектора оберненої ґратки.

На рис. 1 представлені карти оберненого простору імпантованих іонами He^+ монокристалів ГТТ. Карти для дози $2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ наведені в роботі [9]. Із даних карт можна зробити висновок, що, незважаючи на значну зміну міжплощинної відстані в перпендикулярному до площини пластини напрямі (до 2,5%), міжплощинна відстань вздовж площини імпантованого шару практично залишається незмінною.

Таким чином, стан іонно-імпантованих шарів монокристалів ГТТ у площині пластини є повністю напруженим.

ДОСЛІДЖЕННЯ ТРАНСФОРМАЦІЇ КРИСТАЛІЧНОЇ ҐРАТКИ ПРИ ІОННІЙ ІМПЛАНТАЦІЇ МЕТОДАМИ ВИСОКОРОЗДІЛЬНОЇ Х-ПРОМЕНЕВОЇ ДИФРАКТОМЕТРІЇ

Повну інформацію про параметри ґратки в іонно-імпантованих шарах монокристалів можна отримати з аналізу КДВ від ряду асиметричних рефлексів [10 – 12].

Як вже було сказано, деформація приповерхневих іонно-імпантованих шарів моно-

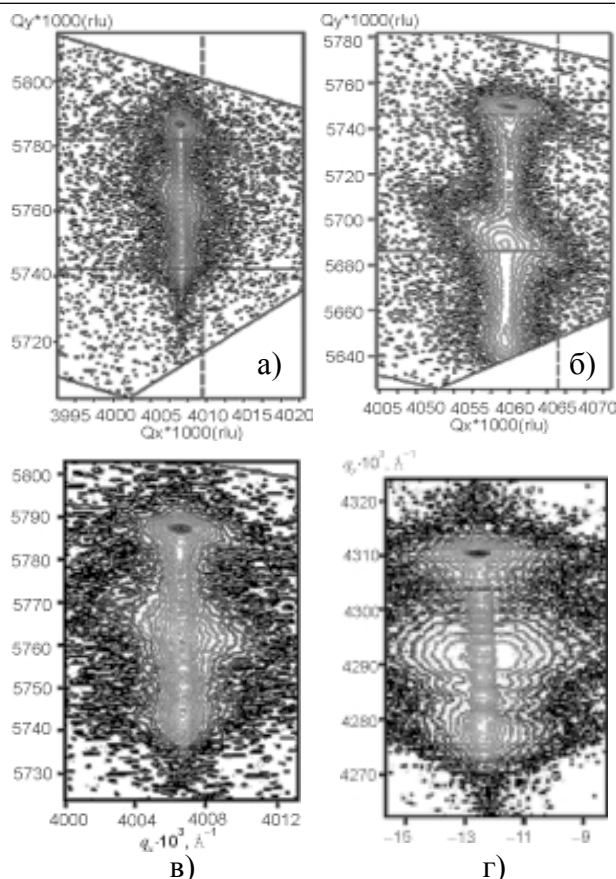


Рис. 1. Карті оберненого простору для імпантованих іонами He^+ монокристалів ГТТ: а), б), в) – поблизу вузла (880) з дозою опромінення $D = 2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$, $6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ та $2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ відповідно; г) – поблизу вузла (444), $D = 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$.

кристалів ГТТ із площиною зрізу (111) приводить до трансформації кристалічної ґратки із кубічної в ромбоєдричну. Для визначення параметрів трансформованої кристалічної ґратки іонно-імпантованого шару було отримано КДВ (рис. 2) від площини (111) (відбивання (444) та (888)) і площини (110) (відбивання (880)), яка розміщена під кутом $\sim 35^\circ$ до площини зрізу зразка.

Для визначення профілів деформації використовується спеціально складена на мові C^{++} Builder програма, яка дозволяє проводити обробку всіх експериментальних КДВ від даного зразка одночасно, тобто моделювати дифракцію Х-променів у кристалі одночасно для декількох відбивань. При обчисленні теоретичних КДВ від іонно-імпантованих монокристалів для розрахунку відхилення дифрагованого променя, виходячи з аналізу КОП, використовувалася формула, яка описує деформацію тільки по нормалі до поверхні порушеного шару. Для наближених теоретичних КДВ

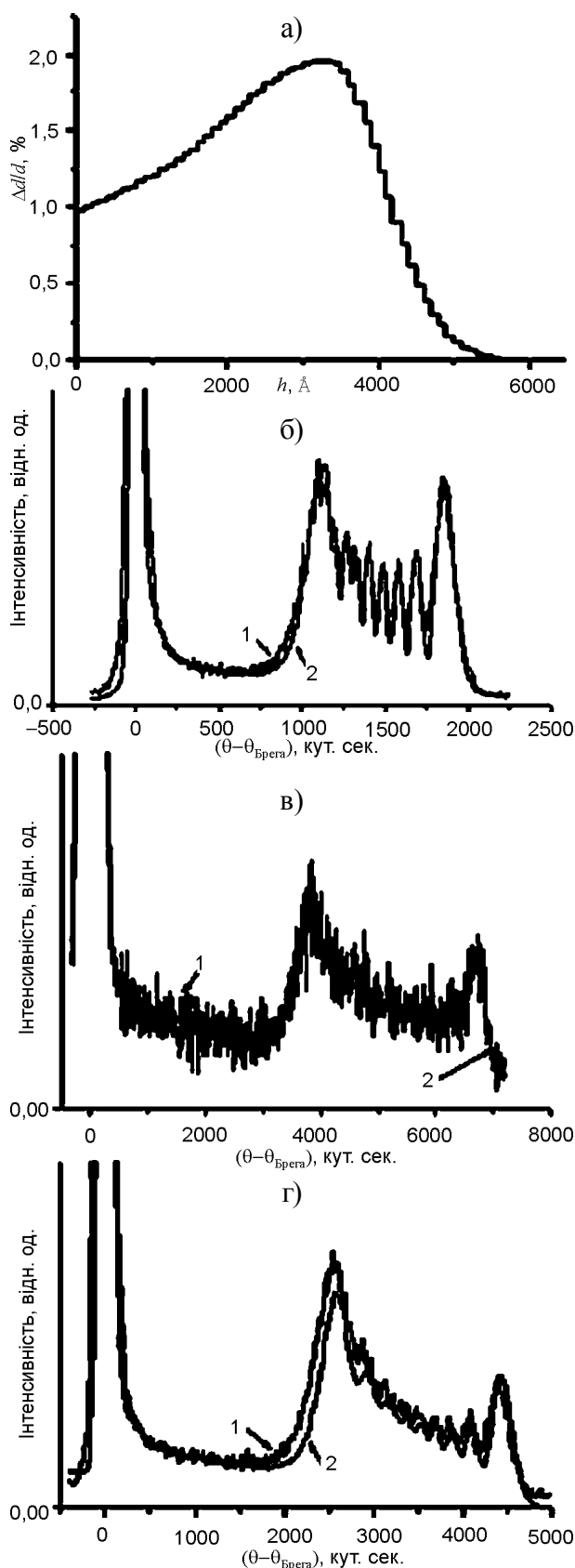


Рис. 2. Профіль відносної деформації в приповерхневому шарі ГІТ, імплантованому іонами He⁺ ($E = 100\text{кеВ}$, $D = 6 \cdot 10^{15}\text{см}^{-2}$) – а), та експериментальні (1) і теоретичні (2) КДВ для відбивань (444) – б), (888) – в), (880) – г). На вставці – залежність максимальної деформації в порушеному шарі від дози опромінення.

до експериментальних використовується одночасне поєднання кількох методів мінімізації функцій багатьох змінних [13, 14]. Обчислені із експериментальних КДВ профілі відносної деформації для кожної з доз є однотипними, товщина порушеного шару із збільшенням дози практично не змінюється, а максимальна деформація – зростає. Приклад обчисленого профілю та експериментальні і теоретичні КДВ для різних відбивань представлені на рис. 3.

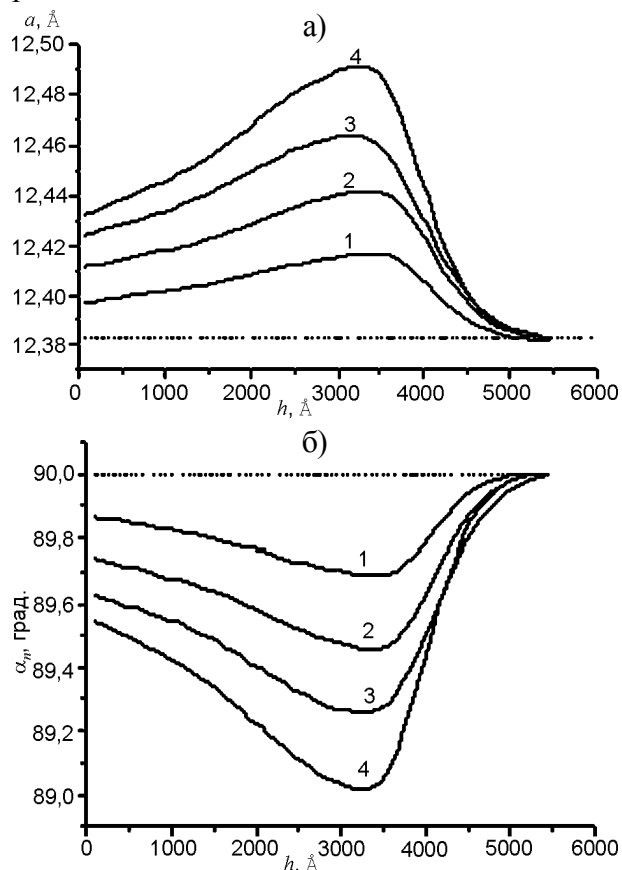


Рис. 3. Зміна сталої ґратки a_p в приповерхневому шарі монокристалів ГІТ імплантованому іонами He⁺ ($E = 100\text{кеВ}$, $D = 2 \cdot 10^{15}\text{см}^{-2}$ – 1, $4 \cdot 10^{15}\text{см}^{-2}$ – 2, $6 \cdot 10^{15}\text{см}^{-2}$ – 3, $1 \cdot 10^{16}\text{см}^{-2}$ – 4) – (а), та кута α при вершині ромбоєдра – (б) з глибиною.

За обчисленими профілями відносної деформації розраховувалися профілі сталих ґратки ромбоєдра a_p та значення кута α при вершині ромбоєдра в деформованому іонно-імплантованому шарі (рис. 3). Як показали розрахунки, в усій товщині порушеного шару a_p є меншою за аналогічні сталі ґратки, обчислені в псевдокубічному наближенні ($a_K = d_{hkl} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$), а кут α менший 90° .

Розрахована в псевдокубічному наближенні стала ґратки є зручною характеристикою деформації в перпендикулярному до площини зрізу зразка напрямі ($\Delta a_K/a_0 = \Delta d_{444}/d_{444}$, де a_0 і d_0 – відповідно стала ґратки і міжплощинна відстань у недеформованій частині кристалу) Із ростом дози опромінення у максимально деформованому шарі стала ґратки a_p зростає, а кут α при вершині ромбоєдра зменшується, тобто ґратка за рахунок радіаційних дефектів витягується вздовж нормалі до площини зрізу (рис. 4).

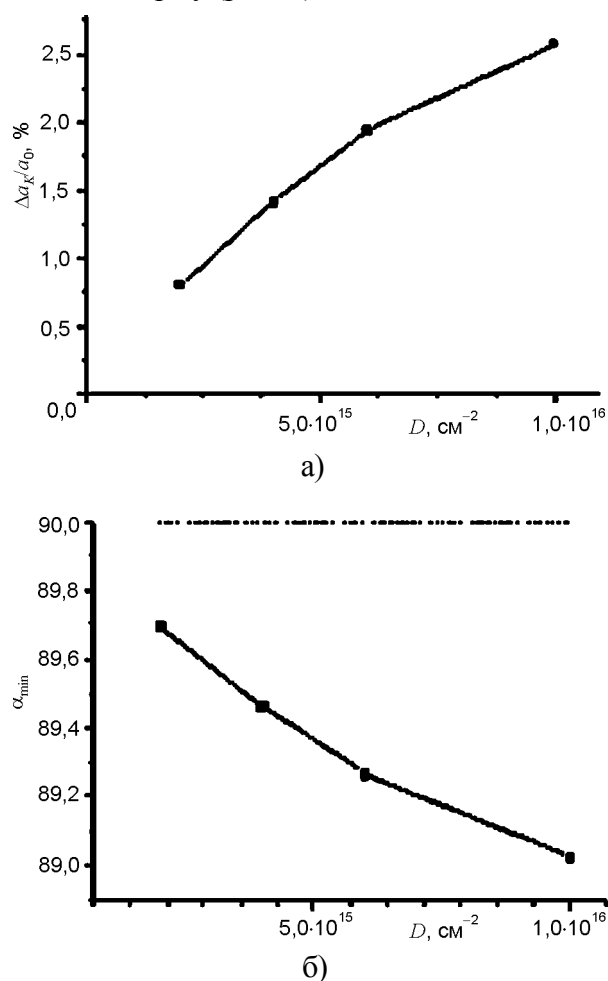


Рис. 4. Залежність значення відносної зміни сталої ґратки (а) та кута при вершині ромбоєдра (б) в максимально деформованому шарі від дози опромінення іонами гелію.

Варто зауважити, що хоча зміна міжплощинної відстані в перпендикулярному до площини зрізу зразка напрямку досягає $\approx 2,6\%$, зміна сталої ґратки майже в 3 рази менша (див. рис. 4а). Цей факт, очевидно, сприяє тому, що ґратка в порушеному шарі деформується, змінює сингонію, але не руйнується.

ВИСНОВКИ

За результатами аналізу параметрів елементарних комірок у деформованих приповерхневих шарах монокристалів ГТТ можна зробити наступні висновки:

1. Стан приповерхневих порушених шарів у площині пластин імплантованих іонами He^+ монокристалів ГТТ є повністю напруженим. При цьому деформація кристалічної ґратки в імплантованому шарі відбувається тільки у перпендикулярному до площини пластин напрямку.
2. Імплантація монокристалів ГТТ іонами He^+ приводить до пониження симетрії кристалічної ґратки деформованого шару з кубічної до ромбоєдричної.
3. В імплантованих іонами He^+ шарах монокристалів ГТТ кут α при вершині ромбоєдра є меншим 90° , причому із ростом дози опромінення величина даного кута зменшується, а стала ромбоєдрично деформованої ґратки зростає.

ЛІТЕРАТУРА

1. Kaladzedze L. Influence of Implantation on the Magneto-Optical Properties of Garnet Surface// Trans. Magn. – 2008. – Vol. 44, № 11. – P. 3293-3295.
2. Townsend P.D., Chandler P.J., Zhang L. Optical effects of ion implantation. – Cambridge: Cambridge University Press, 1994. – 280 p.
3. Риссел Х., Руге И. Ионная имплантация.– М.: Наука, 1983. – 320 с.
4. Ковальчук М.В., Кон В.Г., Лобанович Э.Ф. Измерение малых деформаций в тонких эпителиальных пленках кремния методом фотоэлектронной эмиссии, возбужденной стоячей рентгеновской//ФТТ. – 1985. – Т. 27, № 11. – С. 3379-3387.
5. Vartanyants I.A., Kovalchuk M.V. Theory and applications of x-ray standing waves in real crystals//Rep. Prog. Phys.– 2001. – Vol. 64. – P. 1009.
6. Nesterets Ya.I., Punegov V.I. The statistical kinematical theory of X-ray diffraction as applied to reciprocal space mapping//Acta Cryst. A. – 2000. – Vol. 56. – P. 540-548.
7. Kaganer V.M., Koller R., Schmidbauer M. et. al. X-ray diffraction peaks due to misfit dislocations in heteroepitaxial structures//Phys. Rev. B. – 1997. – Vol. 55, № 55. – P. 1793-1810.
8. Heinke H., Moller M., Hommel D. et. al. Relaxation and mosaicity profiles in epitaxial layers

- studied by high resolution X-ray diffraction//J. Cryst. Growth. – 1994. – Vol. 135, № 1-2. – P. 41-52.
9. Єфанов О.М., Кладько В.П., Мачулін В.Ф., Молодкін В.Б. Динамічна дифракція Х-променів у багат шарових структурах. – К.: Наукова думка, 2008. – 220 с.
 10. Хапачев Ю.П., Чуховский Ф.Н. Деформации и напряжения в многослойных эпитаксиальных кристаллических структурах. Рентгенодифракционные методы их определения// Кристаллография. – 1989. – Т. 34, № 3. – С. 776-800.
 11. Рентгенодифракционная диагностика упруго-напряженного состояния наногетероструктур/Под. ред. Б.С. Карамурзова, Ю.П. Хапачева. – Кабардино-Балкарский государственный университет. – Нальчик, 2008. – 205 с.
 12. Fewster P.E. X-ray diffraction from low-dimensional structures//Semicond. Sci. Technol. – 1993. – Vol. 8. – P. 1915-1934.
 13. Кравець В.І., Пилипів В.М. Моделювання профілів деформації поверхневих шарів монокристалів//Вісник Національного університету “Львівська політехніка”. Прикладна математика. – 2000. – № 411. – С. 192-196.
 14. Яремій І.П., Кравець В.І., Пилипів В.М., Яремій С.І. Структурна діагностика приповерхневих шарів іонно-імплантованих монокристалів та плівок із структурою гранату//Вісник Прикарпатського університету. Математика. Фізика. – 2007. – Вип. III. – С. 59-65.
 5. Vartanyants I.A., Kovalchuk M.V. Theory and applications of x-ray standing waves in real crystals//Rep. Prog. Phys. – 2001. – Vol. 64. – P. 1009.
 6. Nesterets Ya.I., Punegov V.I. The statistical kinematical theory of X-ray diffraction as applied to reciprocal space mapping//Acta Cryst. A. – 2000. – Vol. 56. – P. 540-548.
 7. Kaganer V.M., Koller R., Schmidbauer M. et. al. X-ray diffraction peaks due to misfit dislocations in heteroepitaxial structures//Phys. Rev. B. – 1997. – Vol. 55, № 55. – P. 1793-1810.
 8. Heinke H., Moller M., Hommel D. et. al. Relaxation and mosaicity profiles in epitaxial layers studied by high resolution X-ray diffraction//J. Cryst. Growth. – 1994. – Vol. 135, № 1-2. – P. 41-52.
 9. Efanov O.M., Klad'ko V.P., Machulin V.F., Molodkin V.B. Dinamichna difrakciya H-promeniv u bagatosharovih strukturah. – K.: Naukova dumka, 2008. – 220 s.
 10. Hapachev Yu.P., Chuhovskij F.N. Deformacii i napryazheniya v mnogoslojnyh ‘epitaksial’nyh kristallicheskih strukturah. Rentgenodifrakcionnye metody ih opredleniya//Kristallografiya. – 1989. – T. 34, № 3. – S. 776-800.
 11. Rentgenodifrakcionnaya diagnostika uprugonapryazhennogo sostoyaniya nanogeterostruktur/ Pod. red. B.S. Karamurzova, Yu.P. Hapacheva. – Nal'chik: Kabardino-Balkarskij gosudarstvennyj universitet, 2008. – 205 s.
 12. Fewster P.E. X-ray diffraction from low-dimensional structures//Semicond. Sci. Technol. – 1993. – Vol. 8. – P. 1915-1934.
 13. Kravec' V.I., Pilipiv V.M. Modelyuvannya profiliv deformacii poverhnevih shariv monokristaliv// Visnik Nacional'nogo universitetu “L'vivs'ka politehnika”. Prikladna matematika. – 2000. – № 411. – S. 192-196.
 14. Yaremij I.P., Kravec' V.I., Pilipiv V.M., Yaremij S.I. Strukturna diagnostika pripoverhnevih shariv ionno-implantovanih monokristaliv ta plivok iz strukturoyu granatu//Visnik Prikarpats'kogo universitetu. Matematika. Fizika. – 2007. – Vip. III. – S. 59-65.

LITERATURA

1. Kaladzedze L. Influence of Implantation on the Magneto-Optical Properties of Garnet Surface// Trans. Magn. – 2008. – Vol. 44, № 11. – P. 3293-3295.
2. Townsend P.D., Chandler P.J., Zhang L. Optical effects of ion implantation. – Cambridge: Cambridge University Press, 1994. – 280 p.
3. Rissel H., Ruge I. Ionnyaya implantaciya. – M.: Nauka, 1983. – 320 s.
4. Koval'chuk M.V., Kon V.G., Lobanovich E.F. Izmerenie malyh deformacij v tonkih ‘epitaksial’nyh plenkah kremniya metodom foto‘elektronnoj ‘emissii, vzbuzhdennoj stoyachej rentgenovskoj//FTT. – 1985. – T. 27, № 11. – С. 3379-3387.