

## АНИЗОТРОПНІ ЕФЕКТИ В ДЕФЕКТНІЙ ПІДСИСТЕМІ ІОННО-ІМПЛАНТОВАНИХ МАТЕРІАЛІВ ІЗ СТРУКТУРОЮ ГРАНАТУ

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника  
вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, 76025, Україна*

Встановлено існування анізотропії в орієнтації призматичних дислокаційних петель, що формуються в приповерхневих шарах монокристалів після іонної імплантації. Записано співвідношення, які дають можливість врахувати анізотропію в орієнтації призматичних дислокаційних петель, для обчислення статичного фактора Дебая-Валлера  $E$  та коефіцієнта екстинкції  $\mu_{ds}$ . Використовуючи отримані співвідношення, обчислено значення статичного фактора Дебая-Валлера та коефіцієнта екстинкції для відбивань (444), (888) та (880) та призматичних дислокаційних петель з векторами Бюргерса, паралельними до напрямків виду  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  та  $\langle 100 \rangle$ . Розроблені підходи застосовано при аналізі кристалічної структури приповерхневих шарів Ві-заміщених ферит-гранатових плівок, імплантованих іонами бору. Проаналізовано вплив імплантаційно наведених напруг на магнітну мікроструктуру приповерхневих шарів ФГП та особливості формування в них смугової доменної структури.

**Ключові слова:** ефекти анізотропії, призматичні дислокаційні петлі, монокристали гадоліній-галієвого гранату, ферит-гранатові плівки, іонна імплантація, X-променева дифрактометрія.

U.O. Tomyn, I.P. Yaremiy

## ANISOTROPIC DEFECT SUBSYSTEM EFFECTS IN ION-IMPLANTED MATERIAL STRUCTURE OF GRENADINES

*Vasyl Stefanyk' Precarpathion National University  
57, Shevchenko St., Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine*

The existence of anisotropy in the orientation of the formed in the subsurface layers of single crystals after ion implantation prismatic dislocation loops was found in the dissertation work. The expressions, that make it possible to take into account the anisotropy in the orientation of the prismatic dislocation loops in calculating of the static Debye-Waller factor  $E$  and the extinction coefficient  $\mu_{ds}$ , were derived. The values of static Debye-Waller factor and the extinction coefficient for reflections (444), (888) and (880) and prismatic dislocation loops with Burgers vectors parallel to the directions of the  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  and  $\langle 100 \rangle$  types were calculated using obtained expressions. Developed approaches were applied for analysis of crystal structure of subsurface layers of Bi-substituted ferrite-garnet films, implanted by boron ions.

**Keywords:** effects of anisotropy, prismatic dislocation loops, gadolinium-gallium garnet single crystals, ferrite-garnet films, ion implantation, X-ray diffractometry.

### Вступ

Однією із центральних проблем сучасного матеріалознавства є визначення взаємозв'язків між властивостями функціональних монокристалічних матеріалів і характеристиками дефектів в них, як ростовими, так і цілеспрямовано індукованими.

Зручними модельними зразками із складним базисом для дослідження розподілу структурних дефектів (ростових та наведених післяростовою обробкою) в об'ємі та приповерхневих шарах монокристалів є кристали гадоліній-галієвого гранату (ГГГ,  $Gd_3Ga_5O_{12}$ ), які використовуються в якості матеріалів оптоелектронної техніки (хвилеводи, люмінофори для світлодіодів), а також в якості підкладок для ферит-гранатових плівок (ФГП). Епітаксійні монокристалічні ФГП застосовуються в НВЧ-техніці, магнітооптиці, сенсорах магнітних полів, що робить їх важливими з прикладної точки зору дослідження.

Одним із методів цілеспрямованої зміни властивостей приповерхневих шарів матеріалів є іонна імплантація. Рухаючись в твердому тілі, іони втрачають свою енергію внаслідок взаємодії з електронами (як зв'язаними, так і вільними) та ядрами мішені. Вздовж траєкторії руху імплантованих

іонів утворюються вакансії та міжвузельні атоми, які у подальшому можуть об'єднуватися, утворюючи кластери та дислокаційні петлі. В результаті у кристалі утворюється приповерхневий шар із зміненою структурою, властивості якого визначаються як розподілом радіаційних дефектів та імпантованих домішкових іонів, так і тензором напруг, наведених у результаті зміни міжплощинної відстані. Сумарне поле зміщень у певній точці є результатом накладання полів зміщень дефектів різного типу. Таким чином, структурні характеристики імпантованого шару залежатимуть від розподілу полів напруг, параметри яких, в свою чергу, визначатимуться формою, розмірами, концентрацією дефектів, а у випадку дислокаційних петель та циліндричних чи дискових кластерів – ще й їх просторовою орієнтацією. Визначити чисельні характеристики радіаційних дефектів можна методами Х-променевої дифрактометрії. При цьому достовірність отриманих результатів визначається фізичною обґрунтованістю моделі системи дефектів, використаної при розрахунку кутового розподілу інтенсивності Х-променів, дифрагованих на реальному кристалі з порушенням приповерхневим шаром. Існуючі на сьогодні методики базуються на припущенні, що дефекти утворюються у всіх кристалографічних площинах з однаковою імовірністю, що не завжди відповідає дійсності.

Отже, актуальним питанням на сьогодні є вивчення складних радіаційних дефектів у іонно-імпантованих шарах монокристалів та плівок із структурою гранату, особливо при одночасному заміщенні іонів у кількох підгратках, а також вплив імпантації на магнітну мікроструктуру ФГП. Також необхідним є вироблення нових та удосконалення існуючих методик визначення числових характеристик дефектів, зумовлених іонною імпантацією, які б враховували анізотропію в орієнтації сферично несиметричних дефектів.

Основною метою роботи було отримання аналітичних виразів чутливих до дефектів параметрів Х-променевої дифрактометрії, які б враховували ефекти анізотропії в орієнтації призматичних дислокаційних петель, та застосування розроблених підходів до дослідження іонно-імпантованих матеріалів зі структурою гранату.

## Результати дослідження та їх обговорення

Врахування ефектів анізотропії в орієнтації радіаційно індукованих дислокаційних петель при дослідженні матеріалів з допомогою статистичної динамічної теорії розсіяння Х-променів дасть можливість розширити можливості діагностики, покращити точність розшифровки експериментальних КДВ, отримати коректніші значення параметрів дислокаційних петель, зумовлених іонною імпантацією. Встановлені в роботі параметри кристалічної структури та магнітної мікроструктури іонно-імпантованих ФГП можуть бути використані для оптимізації режимів їх іонної імпантації та створення профілів напруг наперед заданого типу.

Незважаючи на велику кількість праць, що висвітлюють основні положення динамічної теорії розсіяння Х-променів монокристалами з дефектами, та вагомий розвиток цієї теорії за останні роки, який дав можливість здійснювати Х-променеву діагностику матеріалів на суттєво вищому рівні, обчислення статичного фактора Дебая-Валлера та коефіцієнта екстинкції здійснювалися в припущенні, що петлі формуються у всіх кристалографічно еквівалентних площинах з однаковою імовірністю. Але, як показують експериментальні дані, дислокаційні петлі, що формуються в приповерхневих шарах монокристалів після їх імпантації, зустрічаються в різних площинах з різною імовірністю. Тому при розрахунку статичного фактора Дебая-Валлера та коефіцієнта екстинкції потрібно враховувати взаємну орієнтацію вектора дифракції  $H$  та векторів Бюргерса  $b$  наявних в кристалі петель. Це дасть можливість не тільки коректніше обчислювати дифузну складову інтенсивності розсіяних Х-променів, але, через коефіцієнти Фур'є-поляризованості, – і когерентну. У свою чергу це значно підвищить точність діагностики дефектної підсистеми матеріалів, зокрема імпантованих шарів монокристалів, а, отже, властивостей матеріалу, що визначаються дефектною підсистемою.

Для призматичних дислокаційних петель аналітичний вираз статичного фактора Дебая-Валлера вперше записано в роботах М. А. Кривоглаза [1] та П. Дедерікса [2]:

$$L = \frac{cR_0^3}{V} (Hb)^{3/2} \eta(H^0, b^0), \quad (1)$$

де  $c$  – середня концентрація дефектів,  $R_0$  – усереднений радіус петлі,  $V$  – об'єм елементарної комірки кристалу,  $\vec{b}^0 = \vec{b}/b$  – одиничний вектор у напрямку вектора Бюргерса петлі  $\vec{b}$ ,  $\vec{H}^0 = \vec{H}/H$  – одиничний вектор у напрямку вектора дифракції  $\vec{H}$ . Коефіцієнт  $\eta(\vec{H}^0, \vec{b}^0)$  у загальному випадку залежить від взаємної орієнтації вектора дифракції  $\vec{H}$  та вектора Бюргерса петлі  $\vec{b}$ . У припущенні, що петлі формуються у всіх кристалографічних площинах з однаковою імовірністю, коефіцієнт  $\eta(\vec{H}^0, \vec{b}^0)$  є близьким до 0,5. Саме це значення коефіцієнта  $\eta(\vec{H}^0, \vec{b}^0)$  зазвичай береться при обчисленнях статичного фактора Дебая-Валлера.

Коефіцієнт поглинання внаслідок дифузного розсіяння (коефіцієнт екстинкції)  $\mu_{ds}(\Delta\theta)$  визначається за формулою:

$$\mu_{ds} = c C^2 E^2 m_0 \left| \frac{i}{2} (J^1(k_0) + J^2(k_0)) \pm W(1+W^2)^{-2} \frac{1}{2} (J^1(k_0) - J^2(k_0)) \right| \quad (2)$$

де  $W = -\left| K + \frac{1}{2} \vec{H} \right| \vec{H} / CK^2 |\chi_H| e^{-L}$ ;  $K = 2\pi/\lambda$  – модуль хвильового вектора падаючої хвилі;  $C = 1$  для  $\sigma$ -поляризації,  $C = \cos 2\theta_B$  для  $\pi$ -поляризації;  $k_0$  – величина відхилення вузла оберненої ґратки (Оґ)  $H$  від сфери Евальда;  $m_0 = \frac{\pi V}{4} \left( \frac{H |\chi_H|}{\lambda} \right)^2$ ;  $\lambda$  – довжина хвилі випромінювання;  $\chi_H$  – дійсна компонента діелектричної сприйнятливості кристалу  $\chi_H$ ,  $J^i(k_0) = \frac{1}{\pi} \int dS_{\vec{q}} F(\vec{q})$  – інтеграл по сфері Евальда поблизу вузла Оґ;  $dS_{\vec{q}}$  – елемент площі на площині, яка апроксимує сферу Евальда біля вузла Оґ,  $F(\vec{q}) = |\vec{v}_i|^2$ ,  $\vec{v}_i = \vec{H} \vec{u}_i$ ,  $\vec{u}_i$  – фур'є-компонента поля зміщень довкола дефекту,  $i = 1, 2$ .

Після усереднення по всіх можливих напрямках вектора Бюргерса дислокаційних петель  $J^1$  стає рівним  $J^2$  і вираз (2) значно спрощується:

$$\mu_{ds} = c C^2 E^2 m_0 \left( \frac{\pi b R_0^2}{V} \right)^2 D(\vec{H}^0, \vec{b}^0) \ln \frac{q_m^2}{q_c^2} \quad (3)$$

Тут коефіцієнт  $D(\vec{H}^0, \vec{b}^0) = \left| \frac{4}{15} + \frac{1-1+6\nu+3\nu^2}{30(1-\nu)^2} \cos^2 \theta_b \right|$  і, у зв'язку з усередненням, не залежить

від взаємної орієнтації вектора дифракції  $\vec{H}$  та вектора Бюргерса петлі  $\vec{b}$ ;  $\nu$  – коефіцієнт Пуассона;  $q_m$  – межа розділу областей дифузного розсіяння Хуаня і Стокса-Вільсона;  $q_c$  – параметр обрізання зі сторони малих  $q$ .

Вперше коефіцієнт  $\mu_{ds}(\Delta\theta)$  був введений в [3] і незалежно в [2], причому в останній роботі вираз отриманий при умові  $\Delta\theta = 0$ . На практиці для діагностики реальних кристалів широко застосовується метод кривих гойдання, тому для його адекватного застосування, а також для врахування динамічних ефектів в дифузній компоненті відбиваючої здатності, необхідне врахування залежності коефіцієнта  $\mu_{ds}(\Delta\theta)$  від відхилення падаючого променя від точної умови Бреґа. Також потрібно було врахувати комплексний характер імпульсу  $\vec{q}$ , переданого за рахунок розсіяння на спотвореннях, викликаних дефектами, і те, що дифузне розсіяння має різний характер у двох областях: Хуаня і Стокса-Вільсона. Усі перелічені зауваження були враховані В. Б. Молодкіним із співробітниками (див. напр. [4]), що не тільки дало можливість коректно описати поведінку диференційної інтенсивності дифузного розсіяння в області асимптотичного дифузного розсіяння ( $k \gg k_m$ ), але й позбавило необхідності введення параметра обрізання при малих  $q$ , цим самим зробивши коректним обчислення коефіцієнта екстинкції для великих дефектів. У цьому випадку

$$J(k_{\parallel}) = \begin{cases} J_{H^+}(k_{\parallel}) + J_{H^-}(k_{\parallel}), & |k_{\parallel}| < k_0 \\ J_{SW}(k_0), & |k_{\parallel}| \geq k_0 \end{cases} \quad (4)$$

$$\text{де } J_{H^+}(k_{\parallel}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{k_m - k_0} dk'^2 F^H(q), J_{H^-}(k_{\parallel}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{k_m^2 - k_0^2}^{\infty} dk'^2 F^H(q), J_{SW}(k_0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} dk'^2 F^{SW}(q)$$

$$\text{Функція } F^{SW}(q) = \left( \frac{\pi b R_0^2}{l} \right)^2 \left( \frac{4}{15} - \frac{1 - 1 + 6\nu + 3\nu^2}{15(1-\nu)^2} \frac{(H^0 \vec{q})^2}{|q|^2} \right) \frac{1}{|\vec{q}|^2} \quad \text{відповідає зоні дифузного}$$

розсіяння Хуаня,  $F^{SW}(q) = F^H(q) \frac{k_0^2}{|\vec{q}|^2}$  - дифузному розсіянню в зоні Стокса-Вільсона.

Вираз для функції  $F^H(q)$  також записаний після проведення усереднення по всіх напрямках вектора Бюргерса дислокаційних петель.

У кристалі можливий тільки обмежений дискретний набір еквівалентних орієнтацій несиметричних дефектів (наприклад, дислокаційних петель) вздовж певних кристалографічних напрямків. Вище вказаним колективом авторів було записано співвідношення для обчислення коефіцієнта екстинкції, в яких усереднення проведено окремо для дислокаційних петель з векторами Бюргерса, паралельними до напрямків  $\langle 110 \rangle$  та  $\langle 111 \rangle$ .

Монокристалічні пластинки гадоліній-галієвого гранату з площиною зрізу (111), які досліджувалися у роботі, було отримано із буля, вирощеного методом Чохральського. Монокристалічні плівки номінального складу  $(YSmBiCa)_3(FeSi)_5O_{12}$  вирощувалися на підкладках ГГ з орієнтацією (111) методом рідкофазної епітаксії з розчину-розплаву на основі  $PbO-B_2O_3-Bi_2O_3$ . Імплантація іонів  $He$  та  $B$  проводилася на імплантаторі МРВ-202 фірми "Balzers" в режимі, що виключає каналування.

Дослідження кристалічної структури неімплантованих та іонно-імплантованих приповерхневих шарів проводилося методами дво- та трикристальної Х-променевої дифрактометрії на установках ДРОН-3 та трикристальному дифрактометрі "X'Pert PRO MRD XL" у бездисперсійній схемі з використанням  $CuK_{\alpha 1}$  випромінювання. Розрахунок теоретичних КДВ, для отримання інформації про структуру досліджуваних кристалів, здійснювався із використанням статистичної динамічної теорії розсіяння Х-променів.

Для отримання незалежної інформації про структуру та властивості ФГП використовувався метод конверсійної електронної мессбауерівської спектроскопії, який дає можливість здійснювати аналіз кристалічної структури та магнітної мікроструктури тонкого приповерхневого шару ФГП, співрозмірного з глибиною імплантаційних пошкоджень. Зйомка спектрів від вихідних та імплантованих ФГП проводилася у режимі постійного прискорення із використанням ядерного гамма-резонансного спектрометра ЯГРС-4М. Спектри  $Fe^{57}$  отримувалися при кімнатній температурі з використанням джерела гамма-квантів  $Co^{57}$  в хромовій матриці.

Ефективним та неруйнівним методом аналізу морфології та магнітної мікроструктури поверхні плівок є атомно- та магнітно-силова мікроскопія. Зйомки відповідних зображень для неімплантованих та імплантованих ФГП проводилися в динамічному режимі з використанням скануючого зондового мікроскопа NanoScope IIIa Dimension 3000.

Аналіз дво- та трикристальних кривих дифракційного відбивання, карт оберненого простору та результатів моделювання дифракції Х-променів у іонно-імплантованих монокристалах ГГ засобами статистичної динамічної теорії дав можливість встановити, що об'єднання радіаційно індукованих точкових дефектів у приповерхневому шарі відбувається не в усіх кристалографічних площинах, а тільки в паралельній площині поверхні зразка. Для коректного аналізу імплантованих приповерхневих шарів це необхідно враховувати у теоретичних підходах Х-променевої дифрактометрії, що стало причиною пошуку відповідних аналітичних виразів для структурно чутливих до дефектів параметрів.

Коефіцієнт  $\eta(H^0, b^0)$ , що входить в формулу статичного фактора Дебая-Валлера та містить в собі інформацію про взаємну просторову орієнтацію вектора Бюргерса петлі  $b$  та вектора дифракції  $H$ , обчислювався за формулою [5]:

$$\eta(H^0, b^0) = \frac{\sqrt{\pi}}{6} \int d\Omega \left| \bar{H} \cdot \tau(\Omega, b^0) \right|^2. \quad (5)$$

це  $\tau(\Omega, b^0)$  – поле зміщень атомів у кристалі.

Значення коефіцієнта  $\eta(H^0, b^0)$  обчислено для петель з векторами Бюргерса, паралельними до напрямків виду  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  та  $\langle 100 \rangle$  при відбиваннях з векторами дифракції, паралельними до напрямків  $[111]$ ,  $[110]$  та  $[100]$ . В табл. 1 наведені результати обчислень для дислокаційних петель з векторами Бюргерса в напрямках  $\langle 111 \rangle$ .

Таблиця 1

$\bar{H} \setminus \bar{b}$	[111]	[111]	[111]	[111]	[111]	[111]	[111]	[111]	Сер. знач.
[100]	0,511	0,532	0,532	0,511	0,511	0,532	0,532	0,511	0,521
[110]	0,768	0,188	0,188	0,768	0,768	0,188	0,188	0,768	0,478
[111]	1,028	0,237	0,284	0,292	0,292	0,284	0,237	1,028	0,460

Як бачимо, середні значення коефіцієнта  $\langle \eta(H^0, b^0) \rangle$  для різних типів відбивань та наборів дислокаційних петель, як і в [1, 2] є близькими до 0,5. При цьому значення коефіцієнта  $\eta(H^0, b^0)$  для конкретного відбивання та конкретного напрямку вектора Бюргерса петлі значно відрізняються від 0,5. Зокрема, якщо в кристалі наявні дислокаційні петлі з векторами Бюргерса, паралельними до напрямку  $[111]$ , то у випадку відбивання з вектором дифракції, паралельним до напрямку  $[111]$  (симетричне відбивання для типових плівок ферит-гранатів), коефіцієнт  $\eta(H^0, b^0) = 1,028$ , а при відбиванні з вектором дифракції, паралельним напрямку  $[110]$  (один із найінтенсивніших асиметричних рефлексів, доступних для зйомки в геометрії Брега), коефіцієнт  $\eta(H^0, b^0) = 0,768$ . Коли ж  $\bar{b} \perp \bar{H}$ , коефіцієнт  $\eta(H^0, b^0)$  є значно меншим 0,5 і для відбивання з вектором дифракції, паралельним до напрямку  $[110]$ , є рівним 0,188.

У зв'язку з широким використанням як підходу [2], так і [4], було записано співвідношення для обчислення коефіцієнта екстинкції з врахуванням ефектів анізотропії для кожного з них.

**Підхід 1.** Згідно з [2\*], для конкретного напрямку вектора Бюргерса петлі  $\bar{b}$  коефіцієнт екстинкції визначається за формулою (3). В цьому випадку коефіцієнт  $D(H^0, b^0)$  не залежить ні від концентрації, ні від радіуса дислокаційної петлі, а тільки від взаємної просторової орієнтації вектора Бюргерса петлі  $\bar{b}$  та вектора дифракції  $\bar{H}$ :

$$D(H^0, b^0) = \frac{1}{2} [j(\bar{e}_1) + j(\bar{e}_2) \mp W(1+W^2)^{-2} (j(\bar{e}_1) - j(\bar{e}_2))], \quad (6)$$

де  $\bar{e}_1 = (K + H) / |K + H|$ ,  $\bar{e}_2 = \bar{K} / |\bar{K}|$ , інтеграли  $j(\bar{e}_i)$  мають вигляд:

$$j(\bar{e}_i) = \int_{\kappa \perp \bar{e}_i} \frac{d\varphi}{2\pi} \left[ 2(\bar{H}^0 \cdot \bar{b}^0)(\bar{b}^0 \cdot \bar{q}^0) + \frac{1}{1-\nu} (\bar{H}^0 \cdot \bar{q}^0) - \frac{1}{1-\nu} (\bar{H}^0 \cdot \bar{q}^0)(\bar{b}^0 \cdot \bar{q}^0)^2 \right] \quad (7)$$

За допомогою математичного пакету Maple 13 було отримано значення коефіцієнта  $D(H^0, b^0)$  для відбивань (444), (888) та (880). При цьому розглядалися дислокаційні петлі з векторами Бюргерса, паралельними до напрямків виду  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$  та  $\langle 111 \rangle$ . Обчислення показали, що значення коефіцієнта  $D(H^0, b^0)$ , а отже, і коефіцієнта екстинкції  $\mu_b$ , залежить від орієнтації вектора Бюргерса петлі  $\bar{b}$  і в більшості випадків відрізняється від значення, порохованого з використанням

усереднення. Так, у випадку наявності в кристалі дислокаційних петель з вектором Бюргерса в напрямку [111] коефіцієнт  $D(\vec{H}^0, \vec{b}^0)$  при відбиванні (444) буде рівним 1,055, при відбиванні (888) – 0,626, при відбиванні (880) – 0,467. Найменших значень коефіцієнт  $D(\vec{H}^0, \vec{b}^0)$  набуває при  $\vec{b} \perp \vec{H}$ , зокрема при відбиванні (880) його значення становить 0,041.

**Підхід 2.** Базуючись на роботах авторів [4], записано вираз та здійснено обчислення коефіцієнта екстинкції з врахуванням ефектів анізотропії, в якому, як і в роботах згаданих авторів, враховується відхилення падаючого променя від точної умови Вульфа-Брега, комплексний характер імпульсу  $\vec{q}$ , переданого при дифузному розсіянні, та різний характер дифузного розсіяння в області Хуаня і Стокса-Вільсона. Для цього функцію  $F^H(\vec{q})$  було записано у вигляді:

$$F^H(\vec{q}) = \left( \frac{\pi b R_0^2}{V_c} \right)^2 \left\| 2(\vec{H}^0 \vec{b}^0) \frac{(\vec{b}^0 \vec{q})}{|\vec{q}|} + \frac{\nu (\vec{H}^0 \vec{q})}{1-\nu} \frac{1}{|\vec{q}|} - \frac{1}{1-\nu} \frac{(\vec{H}^0 \vec{q}) (\vec{b}^0 \vec{q})^2}{|\vec{q}|^3} \right\| \frac{1}{|\vec{q}|^2}. \quad (8)$$

Щоб зробити можливим інтегрування виразу (8) по  $dS_i$ , було проведено ряд математичних перетворень, в результаті чого отримали:

$$F_i^H(\vec{q}) = \left( \frac{\pi b R_0^2}{V_c} \right)^2 \{g_1 + g_2 + g_3 + g_4 g_5\} \frac{1}{p_3^2} \quad (9)$$

Тут введені наступні позначення:  $g_1 = 4(\vec{H}^0 \vec{b}^0) \cdot p_1$ ,  $g_2 = \frac{\nu}{(1-\nu)^2} p_1$ ,  $g_3 = \frac{p_1 p_2}{(1-\nu)^2 p_3} \left| \frac{p_1}{p_3} - 2\nu \right|$

$$g_4 = \frac{4}{1-\nu} (\vec{H}^0 \vec{b}^0) \left( \nu - \frac{p_1}{p_3} \right), \quad g_5 = \left( (\vec{b}^0 \vec{k}') + (\vec{b}^0 \vec{k}_0) \right) \left( (\vec{H}^0 \vec{k}') + (\vec{H}^0 \vec{k}_0) \right) + \mu^2 (\vec{b}^0 \vec{n}) (\vec{H}^0 \vec{n}).$$

Коефіцієнти  $p_1$ ,  $p_2$ , та  $p_3$  мають вигляд:  $p_1 = \left( (\vec{b}^0 \vec{k}') + (\vec{b}^0 \vec{k}_0) \right)^2 + \mu^2 (\vec{b}^0 \vec{n})^2$ ,

$$p_2 = (\vec{H}^0 \vec{q})^2 = \left( (\vec{H}^0 \vec{k}') + (\vec{H}^0 \vec{k}_0) \right)^2 + \mu^2 (\vec{H}^0 \vec{n})^2, \quad p_3 = |\vec{q}|^2 = k_0^2 + k^2 + \mu^2.$$

З допомогою математичного пакету Maple 13 розраховувалися значення коефіцієнта  $\mu_h(\Delta\theta)$  для відбивань (444), (888) та (880). Обчислення здійснювались для петель з векторами Бюргерса, паралельними до напрямку [111], оскільки існування таких петель є найбільш імовірним у матеріалах зі структурою гранату. В результаті було отримано ряд масивів для набору значень кутового відхилення від точного положення Брега  $\Delta\theta$ , а також радіуса  $R$  та концентрації  $c$  дислокаційних петель. Значення радіусів дислокаційних петель змінювались в діапазоні  $R = 10-300 \text{ \AA}$  з кроком  $2 \text{ \AA}$ , концентрації – в діапазоні  $c = 1 \cdot 10^{10} - 1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ .

З метою виведення функціональної залежності коефіцієнта екстинкції, обчисленого з врахуванням ефектів анізотропії для петель з векторами Бюргерса напрямку [111], від параметрів  $R$ ,  $c$ ,  $\Delta\theta$ , з допомогою програми Origin здійснювався пошук функції, яка б задовільно наближала обчислені дані. Самі ж наближення виконувались в написаній в середовищі C++ Builder програмі, що використовує при наближенні поєднання ряду градієнтних методів.

Залежність коефіцієнта екстинкції від  $\Delta\theta$  при всіх значеннях  $R$ , та  $c$  мала вигляд двох віток експоненти – зростаючої та спадної, що дзеркально відображали одна одну. Функціональна залежність для спадної вітки при відносній деформації  $\Delta d/d = 0$ :

$$\mu_h(\Delta\theta) = y_0(R, c) + A(R, c) (e^{-\nu t_1(R, c)} + e^{-\nu t_2(R, c)}).$$

Вигляд залежностей при інших відносних деформаціях знаходиться шляхом зсуву даної функції по кутовій змінній. Коефіцієнти  $A(R, c)$ , та  $y_0(R, c)$  наближались функціями виду:  $A(R, c) = a_1(c) R^{h_1(c)}$ ,  $y_0(R, c) = a_2(c) R^{h_2(c)}$ , коефіцієнти  $t_1(R, c)$ ,  $t_2(R, c)$  – псевдо-Войтом. Залежність більшості коефіцієнтів псевдо-Войта та коефіцієнтів показникових функцій від концентрації лінійна, а інших – параболічна.

Також хороше наближення для обчислення  $\mu_{\text{в}}(\Delta\theta)$  для петель з векторами Бюргерса, паралельними до напрямку [111], отримується при введенні коефіцієнта нормування  $\alpha(\Delta\theta, R)$ . на який необхідно домножити значення  $\mu_{\text{в}}(\Delta\theta)$ , обчислене за статистичною динамічною теорією без врахування анізотропії. Виявилось, що функціональна залежність коефіцієнта  $\alpha(\Delta\theta, R)$  від  $\Delta\theta$  практично не залежить від концентрації дислокаційних петель. В зоні Хуаня коефіцієнт нормування змінюється за законом  $y = ax^2 + bx + c$ , де  $a = \frac{(\alpha(\Delta\theta_m, R) - \alpha(0, R))}{2\Delta\theta_m^2}$ ,  $b = -2a\Delta\theta_m$ ,  $c = \alpha(0, R)$ ,  $\Delta\theta_m$

значення кутового відхилення, яке відповідає межі розділу зон Хуаня і Стокса-Вільсона при даному  $R$ . У табл. 2 наведено значення  $\alpha(0, R)$  та  $\alpha(\Delta\theta_m, R)$  для відбивань (444), (888) та (880).

У зоні Стокса-Вільсона коефіцієнт нормування  $\alpha(\Delta\theta, R)$  сталий і не залежить ні від концентрації, ні від радіуса дислокаційних петель, а визначається типом відбивання та просторовою орієнтацією вектора Бюргерса петлі.

Таблиця 2

Відбивання	$\alpha(0, R)$	$\alpha(\Delta\theta_m, R)$
(444)	3,265216	2,741393
(888)	2,241189	2,761509
(880) (сильно поглинуті хвильові поля)	2,311944	1,556514
(880) (слабо поглинуті хвильові поля)	1,021488	2,286351

Вплив ефектів анізотропії в орієнтації радіаційно зумовлених дислокаційних петель на вигляд кривих гойдання, розрахованих для монокристалу ПТ з приповерхневим порушеним шаром, в якому є дислокаційні петлі радіусом  $70 \text{ \AA}$  і концентрацією  $1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ , продемонстровано на рис. 1. Зважаючи на те, що розподіл згенерованих під час іонної імплантації радіаційних дефектів є сильно неоднорідним, під час моделювання концентрація дефектів у приповерхневому порушеному шарі задавалася пропорційною профілю дефектів. Як видно з рис. 1, навіть при близьких до одиниці значеннях статичного фактора Дебая-Валлера, інтенсивність дифузного фону може відрізнитися майже на порядок.

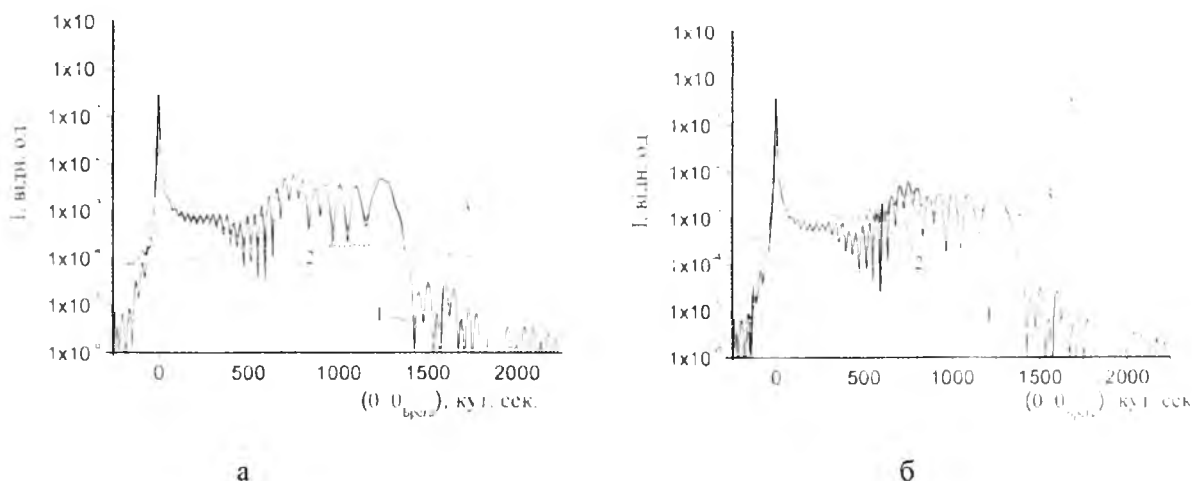


Рис. 1. Теоретичні КДВ (відбивання (444), 1 – когерентна складова, 2 – дифузна, 3 – сумарна): а – розраховані без врахування ефектів анізотропії (з використанням усереднення по всіх імовірних напрямках вектора Бюргерса призматичних дислокаційних петель), б – з врахуванням ефектів анізотропії (для петель з вектором Бюргерса напрямку [111])

За результатами моделювання КДВ для різних відбивань, радіусів, концентрацій та орієнтацій дефектів встановлено, що значення статичного фактора Дебая-Валлера найбільше впливає на інтенсивність останніх осциляцій додаткової осциляційної структури КДВ, які відповідають максимальній деформації, а значення коефіцієнта екстинкції – на інтенсивність КДВ за межами

додаткової осциляційної структури. Для відбивань (888) та (880), порівняно з відбиванням (444), різниця у відповідних КДВ є суттєво більшою. При цьому різниця інтенсивностей КДВ для типових в імплантованих монокристалах значень фактора Дебая-Валлера та коефіцієнта екстинкції суттєво переважає експериментальну похибку і чітко фіксується засобами високороздільної Х-променевої дифрактометрії.

Використаємо результати розробленого підходу до дослідження кристалічної структури, магнітної мікроструктури, морфології поверхні та оптичних властивостей Ві-заміщених епітаксійних плівок ферит-гранатів, імплантованих іонами бору.

Монокристалічні ФГП номінального складу  $(YSmCaBi)_3(FeSi)_5O_{12}$  товщиною  $h = 1,2$  мкм були імплантовані іонами В в режимі:  $E = 80$  кеВ,  $D = 1 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup>;  $E = 110$  кеВ,  $D = 1 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup>; та двократно імплантовані –  $E = 60$  кеВ,  $D = 1 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup> +  $E = 150$  кеВ,  $D = 0,7 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup>. Вони мають значну різницю в сталих ґратки плівки і підкладки ( $a_{пл} = 12,383$  Å,  $a_{пл} = 12,343$  Å), однак їх стан в площині плівки є повністю напруженим. Профілі відносної деформації при використаних дозах імплантації іонами В є монотонно спадним, а на їх вигляд впливає також накладання поля ростових механічних напруг, яке приводить до зміщення деформованих областей вглиб плівки на відстань більше 1000 Å відносно обчисленого за допомогою програми SRIM профілю розподілу дефектів. Встановлено, що основним типом складних радіаційних дефектів у приповерхневому порушеному шарі є розміщені в площині (111) дислокаційні петлі радіусом 30 Å.

Інтегральною характеристикою іонно-імплантованого шару, що відображає вплив радіаційних дефектів, є оптичні спектри поглинання плівок у видимому діапазоні та значення показника заломлення порушеного шару. Вимірний методом кута Брюстера показник заломлення приповерхневого шару однократно імплантованих ФГП, в порівнянні з неімплантованою, зменшується з 2,087 до 2,076, що є результатом зменшення густини матеріалу внаслідок дефектоутворення. Для двократно імплантованих плівок показник заломлення приповерхневого шару збільшується до 2,136, що пов'язане із зростанням поглинання (близько 9% для довжини хвилі 6500 Å) за рахунок росту концентрації радіаційних дефектів та впроваджених іонів бору.

Для отримання незалежної інформації про структуру ФГП, використовуючи метод КЕМС, фіксувався вплив наведених механічних напруг на параметри магнітної мікроструктури приповерхневого шару (рис. 2) [6]. Розраховані на основі месбауерівських даних та на основі відносного вмісту оксидів у шихті значення заселеностей підґраток у межах точності розрахунків співпадають, що підтверджує коректність обчислених для розрахунку теоретичних КДВ значень поляризованостей плівки. В складі спектру фіксується наявність парамагнітної складової, яка однозначно пояснюється наявністю іонів  $Fe^{57}$  в а-позиції з числом магнітних сусідів  $< 2$ , і формує дублетну складову спектру з квадрупольним розщепленням  $\Delta = 1,97$  мм/с, що відповідає зниженню валентності заліза з 3 до 2. Кут між вектором магнітного моменту окремих підґраток та нормаллю до площини плівки близький до 32°. Іонна імплантація приводить до появи у приповерхневому шарі магнітопружної анізотропії, в результаті чого кут між вектором магнітного моменту окремих підґраток та нормаллю до площини плівки зростає.

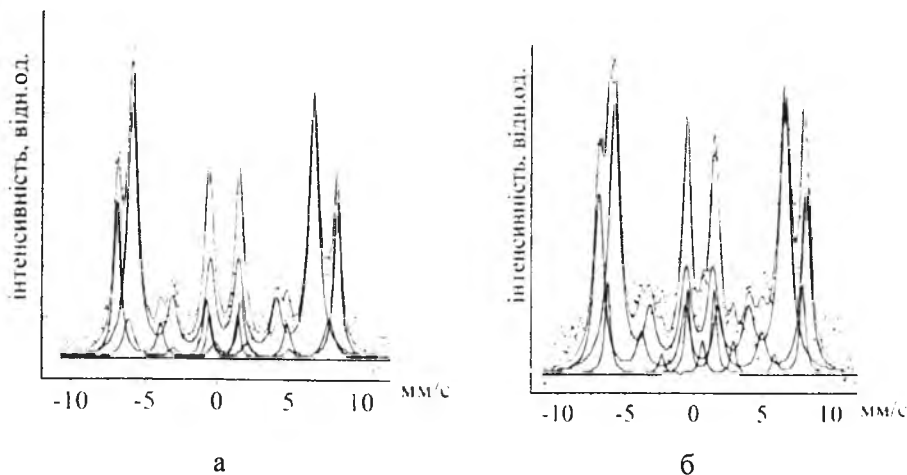


Рис. 2. Месбауерівські спектри Ві-заміщених ФГП: а – неімплантована, б – імплантована в режимі  $E = 80$  кеВ,  $D = 1 \cdot 10^{14}$  см<sup>-2</sup>



Цей результат повністю узгоджується з отриманими методами АСМ та МСМ даними про морфологію та доменну структуру плівок (рис. 3). Перепад висот для неімплантованої плівки рівний 2,8 Å, а для імплантованих – близько 2,0 Å, тобто імплантація іонами бору згладжує нерівності поверхні приблизно на 30 %.

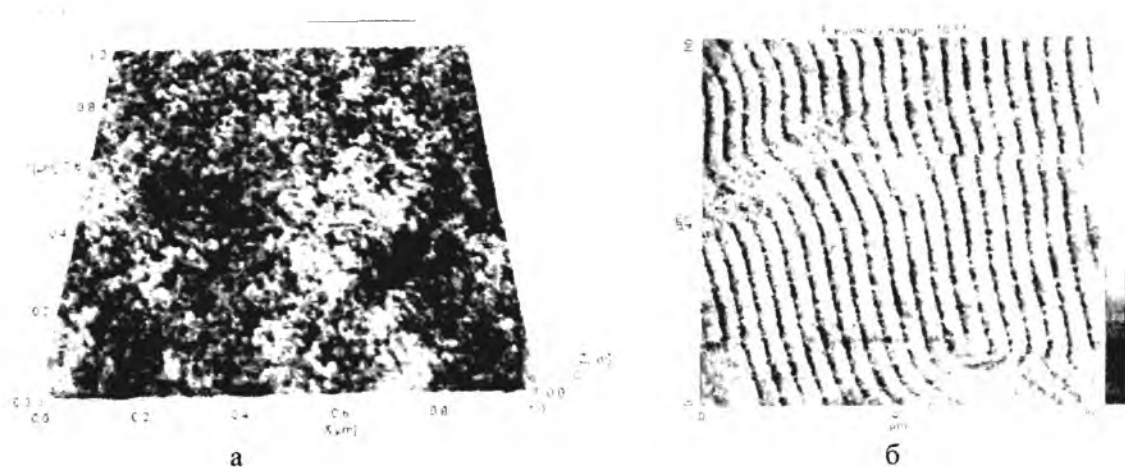


Рис. 3. АСМ (а) та МСМ (б) зображення поверхні  $Bi$ -заміщеної ФГП, двократно імплантованої іонами  $B^+$  ( $E = 60$  кеВ,  $D = 1 \cdot 10^{14}$  см $^{-2}$  +  $E = 150$  кеВ,  $D = 0.7 \cdot 10^{14}$  см $^{-2}$ )

З аналізу серії МСМ-зображень можна зробити висновок, що іонна імплантація привела до зростання ступеня однорідності магнітних властивостей у приповерхневому шарі, про що свідчить збільшення областей із впорядкованою смуговою доменною структурою при іонній імплантації (особливо це стосується подвійно імплантованого зразка). Очевидно, однією з причин такого впорядкування є згладження поверхні. Період доменної структури неімплантованого зразка 3,86 мкм, а в іонно-імплантованих у всіх режимах знаходиться в межах 3,95 – 4,04 мкм, що є результатом наведених імплантацією механічних напруг та нахилу вектора намагніченості в доменах до площини плівки.

## Висновки

1. В іонно-імплантованих приповерхневих шарах монокристалів із структурою гранату з площиною зрізу (111) об'єднання точкових радіаційних дефектів у дислокаційні петлі відбувається не у всіх еквівалентних кристалографічних площинах, а тільки в площинах, паралельних до поверхні зразка. Дану анізотропію в орієнтації дислокаційних петель необхідно враховувати при аналізі процесів, які відбуваються в іонно-імплантованих приповерхневих шарах.

2. В рамках статистичної динамічної теорії отримано аналітичні вирази для коефіцієнта екстинкції, які враховують ефекти анізотропії в орієнтації дислокаційних петель в кристалі. З метою спрощення обчислень виведено функціональні залежності та розраховано коефіцієнти, за допомогою яких із задовільною точністю можна отримати значення  $\mu_{ds}$ , в яких враховано ефекти анізотропії в орієнтації дислокаційних петель.

3. Структурно чутливі параметри в статистичній динамічній теорії розсіяння Х-променів – статичний фактор Дебая-Валлера  $E$  та коефіцієнт екстинкції  $\mu_{ds}$  – для конкретних відбивань та напрямів вектора Бюргерса дислокаційних петель відрізняються від значень, розрахованих з використанням усереднення по всіх кристалографічно еквівалентних напрямках вектора Бюргерса. При дозах імплантації, для яких профіль деформації можна вважати пропорційним розподілу індукованих дефектів, значення коефіцієнта екстинкції найбільше впливає на інтенсивність КДВ за межами додаткової осциляційної структури, а значення статичного фактора Дебая-Валлера – на інтенсивність останніх осциляцій додаткової осциляційної структури КДВ, які відповідають максимальній деформації. При цьому різниця інтенсивностей КДВ, розрахованих з різних модельних уявлень про орієнтацію дислокаційних петель, суттєво переважає експериментальну похибку і чітко фіксується засобами високороздільної Х-променевої дифрактометрії.

4. Отримані співвідношення та розроблені методичні підходи успішно апробовано при аналізі структурної досконалості приповерхневих шарів Ві-заміщених ФГП, імплантованих іонами бору. На основі результатів зазначеного аналізу та проведених досліджень магнітної мікроструктури, морфології поверхні та оптичних властивостей плівок встановлено, що:

- плівка знаходиться в повністю напруженому стані;
- основним типом складних радіаційних дефектів у приповерхневому порушеному шарі є розміщені в площині (111) дислокаційні петлі радіусом 30 Å;
- профілі відносної деформації є монотонно спадними, а деформовані іонною імплантацією області простягаються в глибину плівки на відстані, які значно (більше, ніж 1000 Å) перевищують проективний пробіг іонів-імплантантів;
- механічні напруги в іонно-імплантованому шарі приводять до росту періоду смугових доменів та збільшення кута між напрямком вектора намагніченості та нормаллю до поверхні плівки;
- показник заломлення іонно-імплантованого шару за рахунок зростання поглинання світла на дефектах із ростом кількості впроваджених іонів-імплантантів змінюється немонотонно: незалежно від енергії імплантації (80 – 110 кеВ), він зменшується, а при рості сумарної дози опромінення (більше  $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ ) – зростає.

1. Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах / М.А. Кривоглаз. – К.: Наук. думка, 1983. – 408 с.
2. Dederics P. H. Effect of defect clustering on anomalous x-ray transmission / P.H. Dederics // Physical review B. – 1970. – V. 1, № 4. – P. 1306-1317.
3. Молодкин В.Б. Влияние диффузного рассеяния на эффект Бормана / В.Б. Молодкин, Е.А. Тихонова // Физика металлов и металловедение. – 1967. – Т. 24, № 3. – С. 385-394.
4. Молодкин В.Б. Многопараметрическая кристаллография на основе многообразности картины многократного рассеяния брэгговских и диффузных волн (метод стоячих диффузных волн) / В.Б. Молодкин, А.П. Шпак, М.В. Ковальчук [и др.] // Успехи физических наук. – 2011. – Т. 181, № 7. – С. 681-712.
5. Врахування ефектів анізотропії в орієнтації радіаційних дефектів під час розрахунку статичного фактора Дебая-Валлера та коефіцієнта екстинкції / Б.К. Остафійчук, І.П. Яремій, У.О. Томин, С.І. Яремій, І.М. Фодчук, І.І. Гуцуляк // Науковий вісник Чернівецького університету. Фізика. Електроніка. – 2012. – Т. 2, № 1. – С. 93-102.
6. Вплив системи імплантаційно-індукованих дефектів на структурні, магнітні та морфологічні характеристики приповерхневих шарів ФГП за умови врахування ефектів анізотропії / Б.К. Остафійчук, І.П. Яремій, У.О. Томин, В.О. Коцюбинський, П.М. Литвин, М.Л. Мохнацький // Науковий вісник Чернівецького університету. Фізика. Електроніка. – 2013. – Т. 3, № 1. – С. 37-49.

**Томин Уляна Олексіївна** – аспірант кафедри матеріалознавства і новітніх технологій ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»;

**Яремій Іван Петрович** – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри матеріалознавства і новітніх технологій ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника».

#### **Рецензент**

**Рувінський М.А.** – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри фізики і хімії твердого тіла ДВНЗ «прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника».