06

Первое получение эпитаксиальных бездвойниковых пленок никеля на подложках из фторида бария

© В.А. Лузанов

Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,
Фрязино, Московская обл., Россия
E-mail: valery@luzanov.ru

Поступило в Редакцию 2 апреля 2025 г.
В окончательной редакции 16 мая 2025 г.
Принято к публикации 18 мая 2025 г.

Впервые продемонстрировано получение эпитаксиальных бездвойниковых пленок никеля на подложках фторида бария (BaF_2) с использованием метода магнетронного напыления. Установлено, что оптимизация условий осаждения, включая температуру подложки, давление рабочего газа и мощность распыления, позволяет достичь высокого структурного совершенства пленок. Полученные результаты открывают перспективы для применения таких структур в магнитных и электронных устройствах.

Ключевые слова: эпитаксиальные пленки, энергия двойникования, рентгеноструктурный анализ.

DOI: 10.61011/PJTF.2025.16.60924.20333

Эпитаксиальные пленки никеля привлекают внимание исследователей благодаря их уникальным магнитным и электрическим свойствам, а также возможности интеграции в гетероструктуры. Традиционно для выращивания таких пленок используются подложки с кубической структурой, такие как Si [1], GaAs [2], Fe [3], Cu [4] или MgO [5–7], однако их параметры решетки не всегда идеально соответствуют Ni, что приводит к образованию дефектов, включая двойники. Фторид бария (BaF_2), обладающий кубической структурой с параметром решетки $a = 6.20$ Å, представляет собой перспективную альтернативу благодаря меньшему рассогласованию с Ni ($a = 3.52$ Å в пересчете на удвоенную ячейку). В настоящей работе впервые описан процесс получения эпитаксиальных бездвойниковых пленок Ni на BaF_2 методом магнетронного напыления, а также исследованы их структурные характеристики.

Осаждение пленок проводилось в вакуумной системе с базовым давлением 10^{-6} Torr. В качестве мишени использовалась поликристаллическая пластина Ni чистотой 99.99 %. Подложки BaF_2 (111) предварительно очищались в ультразвуковой ванне с изопропанолом и отжигались при 500 °C в вакууме для удаления поверхностных загрязнений. Магнетронное напыление осуществлялось в атмосфере аргона (давление $5 \cdot 10^{-3}$ Torr) при мощности источника 100 W. Температура подложки варьировалась в диапазоне 300–600 °C, а толщина пленок составляла 50–200 nm.

Структурный анализ проводился методами рентгеновской дифракции (XRD). Рентгеновская дифрактограмма (рис. 1, *a*) показала наличие только рефлексов Ni (111), BaF_2 (111) и BaF_2 (222), что указывает на эпитаксиальный рост пленок с ориентацией (111). Отсутствие дополнительных пиков, связанных с двойниками или поликристаллическими фазами, подтверждено при температуре подложки 450 °C. Полуширина кривой качания (рис. 1, *b*) составила 0.23°, что свидетельствует о высоком структурном совершенстве полученных пленок.

Кроме того, с целью определения разориентации пленки в плоскости подложки было проведено φ-сканирование, т. е. съемка при отражении от плоскости Ni (113) при вращении образца вокруг нормали к плоскости подложки (рис. 2). Полученная картина указывает на наличие в пленке симметрии третьего порядка, что свидетельствует об отсутствии двойников.

Критическим фактором оказалось поддержание температуры подложки в узком диапазоне (430–470 °C): при более низких значениях наблюдалось формирование поликристаллической структуры, а при более высоких — диффузия фтора из BaF_2, ухудшающая качество пленки. Оптимизация давления аргона ($5 \cdot 10^{-3}$ Torr) позволила минимизировать внутренние напряжения, что также способствовало подавлению двойникования.

Сравнение с традиционными подложками, такими как MgO ($a = 4.21$ Å), показало, что BaF_2 обеспечивает меньшее рассогласование параметров решетки (около 12 % против 20 % для MgO), что снижает вероятность дефектообразования.

Проведем сравнение зависимости энергии образования двойников от величины несоответствия решеток в плоскости (111) для подложек BaF_2 и MgO (subs).

Никель: структура гранецентрированная кубическая (ГЦК), параметр решетки $a_{Ni} = 3.52$ Å.

В плоскости (111) расстояние между атомами $d_{Ni(111)} = a_{Ni(111)}/\sqrt{2} = 3.52/\sqrt{2} \approx 2.49$ Å.

Энергия дефекта упаковки для объемного никеля $\gamma_0 = 120–130\,\mathrm{mJ/m^2}$.

Фторид бария (BaF_2): структура кубическая типа флюорита, параметр решетки $a_{BaF_2} = 6.20$ Å.

В плоскости (111) эффективное расстояние между атомами зависит от расположения атомов Ba и F. Для упрощения примем расстояние между атомами бария

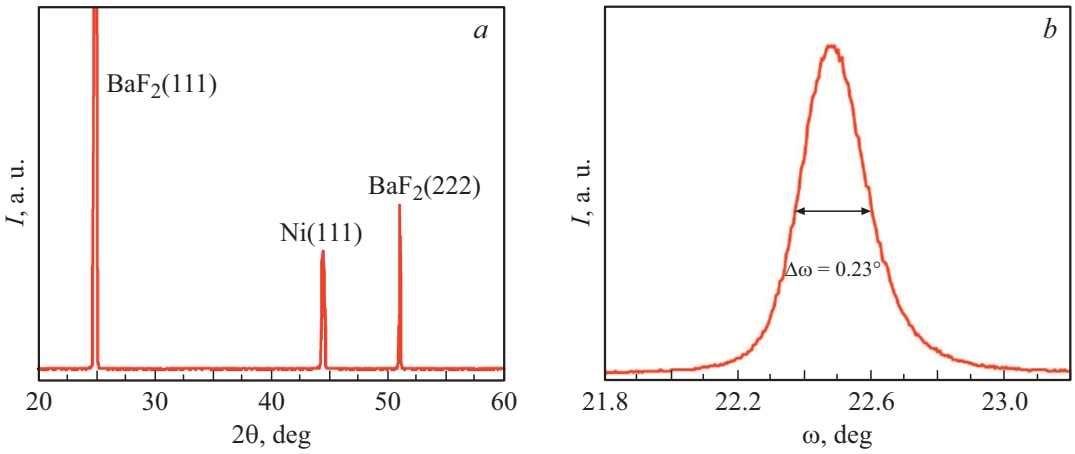

Рис. 1. Рентгеновская дифрактограмма (a) и кривая качания (b) от пленки Ni толщиной 80 nm, осажденной на подложку из фторида бария при температуре 450 °C.

вдоль (111)

$$d_{\mathrm{BaF_2}(111)} = a_{\mathrm{BaF_2}(111)}/\sqrt{2} = 6.20/\sqrt{2} \approx 4.38\,\text{Å}.$$

Несоответствие решеток в плоскости (111) рассчитывается как $\varepsilon = |d_{subs(111)} - d_{\mathrm{Ni}}(111)|/d_{\mathrm{Ni}}(111)$. После подстановки значений получаем $\varepsilon \approx 0.759$ (75.9 %). Казалось бы, здесь имеется очень большое несоответствие. Однако в реальных системах эпитаксиальный рост возможен благодаря совпадению через кратные параметры, когда несколько ячеек никеля совмещается с одной ячейкой BaF_2.

Например, для двух ячеек Ni (111) $2 \cdot 2.49$ Å ближе к 4.38 Å, что снижает эффективное несоответствие до $\varepsilon \approx 0.12$ (12 %).

Аналогичные вычисления для подложки MgO дают величину 0.20 (20 %).

Наиболее распространенный тип двойников в ГЦК-металлах — когерентные двойники по плоскости (111). Энергия образования двойников (γ_t) связана с энергией дефекта упаковки, так как двойник можно рассматривать как последовательность дефектов упаковки. Для Ni энергия дефекта упаковки $\sim 125-130\,\mathrm{mJ/m^2}$ (по данным литературы, например [8,9]). Энергия двойникования в ГЦК-структуре часто принимается $\gamma_t \approx 2\gamma_{sf}$ для когерентного двойника, так как он эквивалентен двум дефектам упаковки в соседних слоях. Возьмем $\gamma_{sf} = 130\,\mathrm{mJ/m^2}$ как среднее значение для Ni. Энергия двойникования $\gamma_t = 260\,\mathrm{mJ/m^2}$. Рассогласование решеток создает упругие напряжения, которые могут уменьшить γ_t. Для оценки используем упрощенную модель

$$\Delta\gamma_t \approx -2k\varepsilon^2 E,$$

где ε — деформация из-за рассогласования (0.12 для пленки Ni на BaF_2 или 0.20 на MgO), E — модуль Юнга никеля, k — коэффициент, зависящий от геометрии.

В реальности $\Delta\gamma_t$ корректируется эмпирически и составляет порядка $20\,\mathrm{mJ/m^2}$ для систем с несоответствием порядка 12 %.

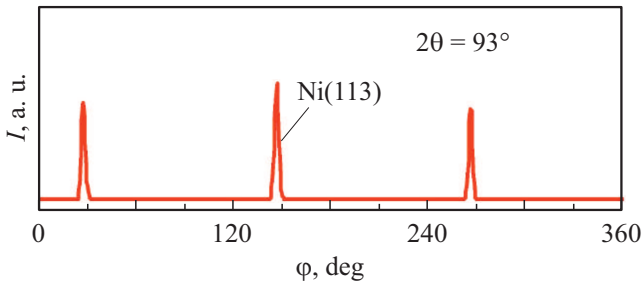

Рис. 2. Рентгеновская дифрактограмма φ-сканирования образца Ni/BaF_2 с шагом 1°.

Поскольку, как видно из приведенного выражения, энергия двойникования пропорциональна квадрату деформации, изменение энергии двойникования для пленок на оксиде магния выше примерно в 2.8 раза. Получаем для структуры Ni/BaF_2 $\gamma_t = 240\,\mathrm{mJ/m^2}$. Для Ni/MgO энергия составит $204\,\mathrm{mJ/m^2}$.

Таким образом, при использовании BaF_2 в качестве подложки вероятность образования двойников примерно на 20 % ниже.

Для сравнения в аналогичных условиях проведено осаждение пленок никеля на подложки MgO (111). На рис. 3 представлено φ-сканирование от полученной пленки.

Видно появление небольшого количества двойников, что подтверждает проведенную сравнительную оценку вероятности их появления.

Впервые методом магнетронного напыления получены эпитаксиальные бездвойниковые пленки никеля на подложках BaF_2. Оптимизированные условия осаждения (температура 450 °C, давление $5 \cdot 10^{-3}$ Torr, мощность 100 W) обеспечивают высокое качество гетероструктур, что делает их перспективными для применения в микроэлектронике и спинтронике и для изготовления бездвойниковых пленок графена известным методом

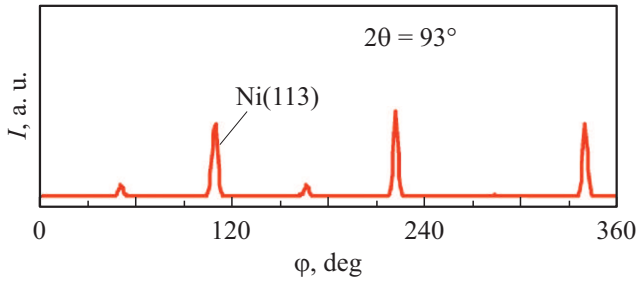

Рис. 3. Рентгеновская дифрактограмма φ-сканирования образца Ni/MgO с шагом 1°.

диффузии углерода сквозь пленку никеля. Дальнейшие исследования будут направлены на изучение электрических свойств и масштабирование технологии.

Финансирование работы

Работа финансировалась за счет средств бюджета института в рамках госзадания № 075-00395-25-00 ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] H. Qiu, G. Sáfrán, B. Pecz, P.B. Barna, A. Kosuge, H. Nakai, S. Yugo, M. Hashimoto, Thin Solid Films, **229**, 107 (1993). DOI: 10.1016/0040-6090(93)90416-M
[2] P. Evans, C. Scheck, R. Schad, G. Zangari, J. Magn. Magn. Mater., **260**, 3 (2003). DOI: 10.1016/S0304-8853(02)01403-8
[3] Z.Q. Wang, Y.S. Li, F. Jona, P.M. Marcus, Solid State Commun., **61**, 10 (1987). DOI: 10.1016/0038-1098(87)90374-7
[4] T. Yan, Y.C. Huang, Y.C. Hou, L. Chang, J. Electrochem. Soc., **165**, D743 (2018). DOI: 10.1149/2.0831814jes
[5] G. Raatz, J. Woltersdorf, Phys. Status Solidi A, **113**, 131 (1989). DOI: 10.1002/pssa.2211130115
[6] H. Qiu, A. Kosuge, H. Maruyama, M. Adamik, G. Safran, P.B. Barna, M. Hashimoto, Thin Solid Films, **241**, 9 (1994). DOI: 10.1016/0040-6090(94)90385-9
[7] P. Sandström, E. Svedberg, J. Birch, J.-E. Sundgren, J. Cryst. Growth, **197**, 849 (1999). DOI: 10.1016/S0022-0248(98)00972-5
[8] L.E. Murr, Thin Solid Films, **4**, 389 (1969). DOI: 10.1016/0040-6090(69)90089-3
[9] D.J. Siegel, Appl. Phys. Lett., **87**, 121901 (2005). DOI: 10.1063/1.2051793