

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 $a = 6.20 \text{ \AA}$, представляет собой перспективную альтернативу благодаря меньшему рассогласованию с Ni ($a = 3.52 \text{ \AA}$ 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 $5 \cdot 10^{-3} \text{ Torr}$) при мощности источника 100 W. Температура подложки варьировалась в диапазоне $300\text{--}600^\circ\text{C}$, а толщина пленок составляла $50\text{--}200 \text{ nm}$.

Структурный анализ проводился методами рентгеновской дифракции (XRD). Рентгеновская дифрактограмма (рис. 1, а) 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, б) 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 ($430\text{--}470^\circ\text{C}$): при более низких значениях наблюдалось формирование поликристаллической структуры, а при более высоких — диффузия фтора из BaF_2 , ухудшающая качество пленки. Оптимизация давления аргона ($5 \cdot 10^{-3} \text{ Torr}$) позволила минимизировать внутренние напряжения, что также способствовало подавлению двойникования.

Сравнение с традиционными подложками, такими как MgO ($a = 4.21 \text{ \AA}$), 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 гранцентрированная кубическая (ГЦК), параметр решетки $a_{\text{Ni}} = 3.52 \text{ \AA}$.

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

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

Фторид бария (BaF_2): структура кубическая типа флюорита, параметр решетки $a_{\text{BaF}_2} = 6.20 \text{ \AA}$.

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

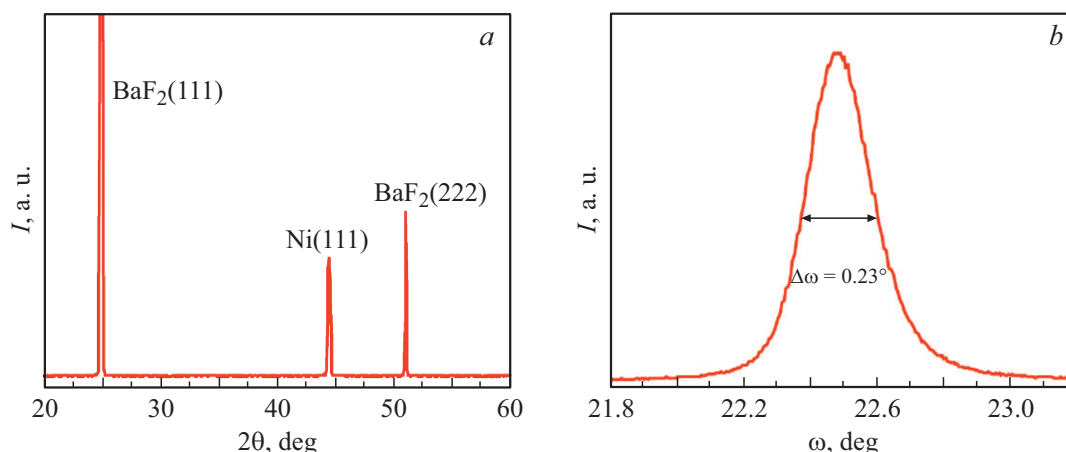


Рис. 1. Рентгеновская дифрактограмма (a) и кривая качания (b) от пленки Ni толщиной 80 nm, осажденной на подложку из фторида бария при температуре 450 °C.

вдоль (111)

$$d_{\text{BaF}_2(111)} = a_{\text{BaF}_2(111)} / \sqrt{2} = 6.20 / \sqrt{2} \approx 4.38 \text{ \AA}.$$

Несоответствие решеток в плоскости (111) рассчитывается как $\varepsilon = |d_{\text{subs}(111)} - d_{\text{Ni}(111)}| / d_{\text{Ni}(111)}$. 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 BaF₂.

Например, для двух ячеек Ni (111) $2 \cdot 2.49 \text{ \AA}$ ближе к $4.38 \text{ \AA}$, 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 $\sim 125\text{--}130 \text{ mJ/m}^2$ (по данным литературы, например [8,9]). Энергия двойникового 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 $\gamma_{sf} = 130 \text{ mJ/m}^2$ как среднее значение для Ni. Энергия двойникового $\gamma_t = 260 \text{ mJ/m}^2$. 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 BaF₂ 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 mJ/m^2 для систем с несоответствием порядка 12%.

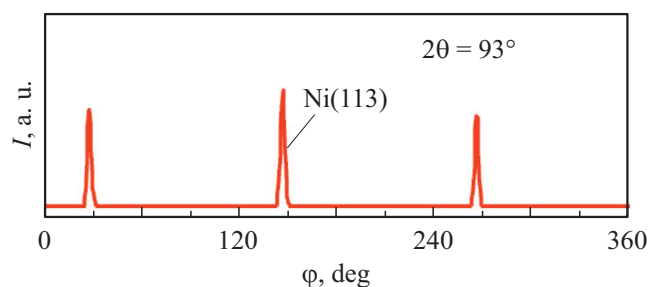


Рис. 2. Рентгеновская дифрактограмма ϕ -сканирования образца Ni/BaF₂ с шагом 1°.

Поскольку, как видно из приведенного выражения, энергия двойникового пропорциональна квадрату деформации, изменение энергии двойникового для пленок на оксиде магния выше примерно в 2.8 раза. Получаем для структуры Ni/BaF₂ $\gamma_t = 240 \text{ mJ/m}^2$. Для Ni/MgO энергия составит 204 mJ/m^2 .

Таким образом, при использовании BaF₂ 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 BaF₂. Оптимизированные условия осаждения (температура 450 °C, давление $5 \cdot 10^{-3} \text{ Torr}$, 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

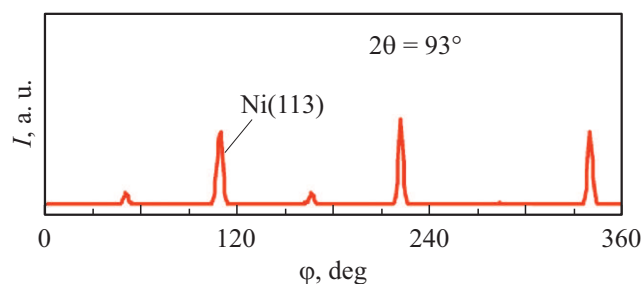


Рис. 3. Рентгеновская дифрактограмма φ -сканирования образца Ni/MgO с шагом 1° .

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. 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