

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/379998727>

Исследование структурных особенностей и релаксации напряжений в тонкой пленке SrIrO_3 , выращенной на подложке NdGaO_3

Conference Paper · December 2023

CITATIONS

0

READS

5

4 authors, including:



Nikita Dubitskiy

Kotel'nikov Institute of Radioengineering and Electronics

4 PUBLICATIONS 0 CITATIONS

SEE PROFILE



G. A. Ovsyannikov

Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics, Russian Academy of Sc...

259 PUBLICATIONS 1,244 CITATIONS

SEE PROFILE



Andrey Mihailovich Petrzhiik

Kotel'nikov Institute of Radioengineering and Electronics

28 PUBLICATIONS 216 CITATIONS

SEE PROFILE

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ И РЕЛАКСАЦИИ НАПРЯЖЕНИЙ В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ SrIrO_3 , ВЫРАЩЕННОЙ НА ПОДЛОЖКЕ NdGaO_3

Дубицкий Н.В.*, Москаль И.Е., Овсянников Г.А., Петржик А.М.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт радиотехники и электроники
им. В.А. Котельникова, Москва, Россия, *РТУ МИРЭА
+7 (985) 948-46-86, nikita.dubitskiy@gmail.com

В работе методом рентгеновской дифракции исследованы структурные особенности и влияние частичной релаксации механических напряжений в тонкой пленке SrIrO_3 , выращенной методом катодного распыления на подложке NdGaO_3 . Из анализа дифракционных данных установлено, что в пленке наблюдается градиент параметра решетки и значительная деформация решетки ($\delta c/c \approx 2.3 \cdot 10^{-3}$) по сравнению с массивным кристаллом SrIrO_3 . Это свидетельствует о возникновении напряжений, обусловленных несоответствием параметров решетки пленки и подложки, что приводит к неоднородной релаксации напряжений в пленке.

Ключевые слова: тонкие пленки SrIrO_3 , электросопротивление, механические напряжения, релаксация напряжений, электротранспортные свойства, эпитаксиальный рост, подложка NdGaO_3 .

Investigation of structural features and stress relaxation in SrIrO_3 thin film grown on NdGaO_3 substrate. Dubitskiy N.V.*, Moskal I.E., Ovsyannikov G.A., Petrzhik A.M. Kotel'nikov Institute of Radio Engineering and Electronics, Russian Academy of Sciences, *RTU MIREA.

The structural features and influence of partial relaxation of mechanical stresses in a SrIrO_3 thin film grown by cathode sputtering on an NdGaO_3 substrate have been investigated by X-ray diffraction. Analysis of the diffraction data has revealed that a gradient of the lattice parameter and significant lattice strain ($\delta c/c \approx 2.3 \cdot 10^{-3}$) are observed in the film as compared to the bulk SrIrO_3 crystal. This indicates the emergence of stresses caused by the lattice mismatch between the film and substrate, which leads to inhomogeneous stress relaxation in the film.

Keywords: SrIrO_3 films, electrical resistivity, mechanical stresses, stress relaxation, electrical transport properties, epitaxial growth, NdGaO_3 substrate.

Введение

Пленки перовскитоподобных оксидов металлов состава ABO_3 проявляют уникальные транспортные свойства, обусловленные сильными электронными корреляциями, что делает их перспективными для применений в спинтронике и электронных устройствах [2]. Особый интерес представляют пленки SrIrO_3 , обладающие высокой электропроводностью и сильной спин-орбитальной связью [3]. Однако для полноценной реализации их потенциала необходим тщательный анализ влияния подложки на структурные и электротранспортные свойства таких пленок [6].

В данной работе методом рентгеновской дифракции проведено исследование структурных особенностей и частичной релаксации механических напряжений тонкой пленки SrIrO_3 , выращенной методом катодного распыления на подложке NdGaO_3 . Установлено, что из-за рассогласования параметров кристаллических решеток пленки и подложки в процессе роста возникают значительные сжимающие напряжения, приводящие к деформации структуры SrIrO_3 , что стимулирует частичную релаксацию напряжений и является причиной формирования неоднородного состояния – часть объема пленки остается когерентно связанной с подложкой, а часть релаксирует.

Важно отметить, что наличие частично релаксированного слоя влияет на электротранспортные свойства пленок SrIrO_3 , вызывая аномальный рост удельного сопротивления по сравнению с объемными кристаллами, что обусловлено структурными искажениями кристаллической решетки по причине неоднородного распределения деформаций.

Эксперимент

Тонкая пленка SrIrO_3 толщиной $t \approx 80$ nm была выращена методом катодного распыления на подложке (110) NdGaO_3 (NGO). Эпитаксиальный рост пленки осуществлялся при температуре подложки 800°C в атмосфере смеси аргона и кислорода при общем давлении 0.25 mbar и соотношении потоков Ar/O_2 , равном 10/35. Время роста составляло 3 часа.

Структурные свойства пленки SrIrO_3 исследовались методом рентгеновской дифракции с использованием дифрактометра Rigaku SmartLab с вращающимся медным анодом. Для определения параметров элементарной ячейки пленки проводились измерения в геометрии параллельного пучка с монохроматором $\text{Ge}(220)\times 2$ ($\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ – длина волны рентгеновского излучения $\text{CuK}_{\alpha 1}$). Фазовый анализ и исследование ориентации пленки осуществлялись с помощью сканирования по схеме $\omega/2\theta$. Для

определения параметров решетки в плоскости подложки и вдоль нормали к ней использовались съемки в симметричной брэгговской геометрии.

Комплексный рентгеноструктурный анализ, включающий фазовый анализ, исследование текстуры и определение параметров решетки, позволил детально исследовать структурные особенности пленки SrIrO_3 .

Экспериментальные результаты и их обсуждение

Анализ параметров кристаллических решеток пленки SrIrO_3 проводился в предположении о псевдокубической элементарной ячейке с параметром $c_{\text{SrIrO}_3} = 4.04 \pm 0.06 \text{ \AA}$, и подложки NdGaO_3 с параметром $c_{\text{NdGaO}_3} = 3.87 \pm 0.005 \text{ \AA}$. Сравнение параметров решетки показывает наличие сжатия ячейки пленки при эпитаксиальном росте.

Величина рассогласования решеток, рассчитанная по формуле $m = (c_f - c_s)/c_s$, где c_f и c_s – параметры кристаллических решеток пленки и подложки соответственно, составляет порядка 4%. Такое рассогласование вызывает возникновение двухосных сжимающих напряжений в плоскости роста пленки SrIrO_3 на подложке NdGaO_3 .

Структура тонкой пленки SrIrO_3 , выращенной на NdGaO_3

Анализ рентгеновской дифрактограммы тонкой пленки $\text{SrIrO}_3/\text{NdGaO}_3$ в режиме брегговского отражения (рис. 1) показал наличие интенсивных пиков от пленки SrIrO_3 и подложки NdGaO_3 . Кроме того, на дифрактограмме присутствует небольшой дифракционный пик от иридия, интенсивность пика которого крайне мала по сравнению с основными линиями, из чего можно заключить, что в структуре пленки SrIrO_3 макровключения кристаллических фаз иридия практически отсутствуют.

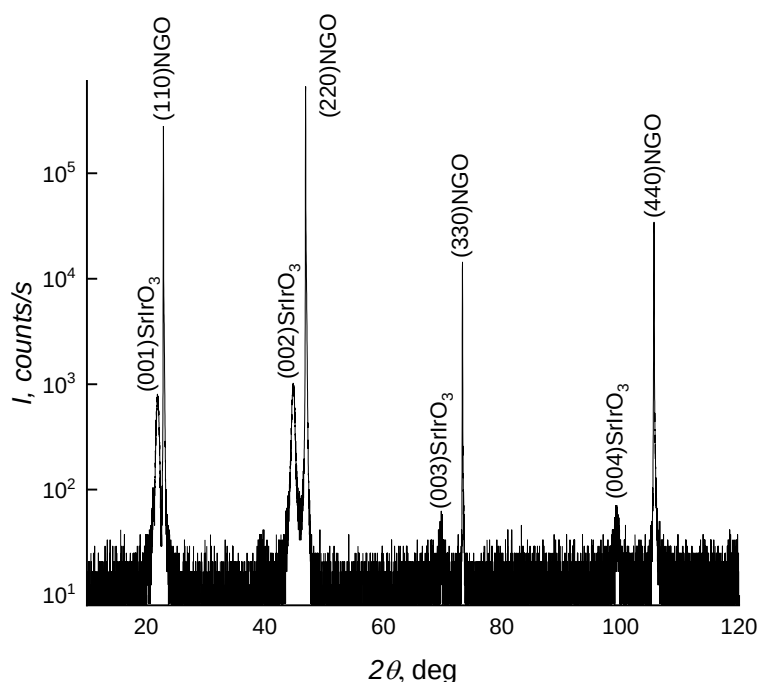


Рисунок 1 – Рентгеновская дифрактограмма тонкой пленки $\text{SrIrO}_3/\text{NdGaO}_3$ (NGO), полученная в симметричной брэгговской геометрии с использованием $\text{CuK}\alpha_1$ излучения.

Для расчета эффективного объема элементарной ячейки пленки V_{eff} использовалось среднее арифметическое значений параметров элементарной ячейки $c_{\text{SrIrO}_3} = 4.04 \pm 0.06 \text{ \AA}$, учитывающее все пики пленки, а также значение параметра элементарной ячейки подложки $c_{\text{NdGaO}_3} = 3.87 \pm 0.005 \text{ \AA}$, полученное также из данных рентгеновской дифрактограммы. Эффективный объем элементарной ячейки пленки рассчитывался как произведение площади основания ячейки подложки $c_{\text{NdGaO}_3}^2$, умноженное на параметр решетки пленки c_{SrIrO_3} . Расчет эффективного объема элементарной ячейки пленки ($V_{\text{eff}} = c_{\text{SrIrO}_3} \cdot c_{\text{NdGaO}_3}^2 = 60.51 \pm 0.03 \text{ \AA}^3$), который заметно меньше объема ячейки идеального монокристалла SrIrO_3 ($V_{\text{crystal}} = c_{\text{SrIrO}_3}^3 = 62.1 \text{ \AA}^3$), указывает на формирование сжатия кристаллической решетки пленки SrIrO_3 , вызванного рассогласованием с подложкой NdGaO_3 [7].

Подобное уменьшение объема элементарной ячейки наблюдалось ранее в манганитных пленках LSMO/LAO и было связано с нарушением стехиометрии вследствие обогащения кислородом [1].

Для сравнения структурных параметров пленки SrIrO_3 и подложки NdGaO_3 был выполнен анализ наложения их дифракционных пиков (002) от пленки и (220) от подложки (рис. 2). Изначально эти пики не совпадают по положению на шкале 2θ , а разнесены на 2.1° . Для проведения корректного сравнения формы линий осуществлено смещение пика подложки на указанную величину с последующей нормировкой интенсивностей. Полученное наложение показывает, что ширина дифракционной линии для пленки SrIrO_3 превышает ширину линии подложки NdGaO_3 .

Такое значительное уширение дифракционного пика SrIrO_3 от пленки может быть обусловлено наличием неоднородно распределенных механических напряжений, связанных с существенным рассогласованием параметров решетки c_{SrIrO_3} и c_{NdGaO_3} ($\Delta c \approx 0.2 \text{ \AA}$). Кроме того, вклад в уширение линии может вносить формирование "внутренних" напряжений вследствие ионного замещения в решетке пленки. Это связано с различием ионных радиусов элементов Sr^{2+} , Ir^{4+} и O^{2-} , что приводит к локальным искажениям решетки.

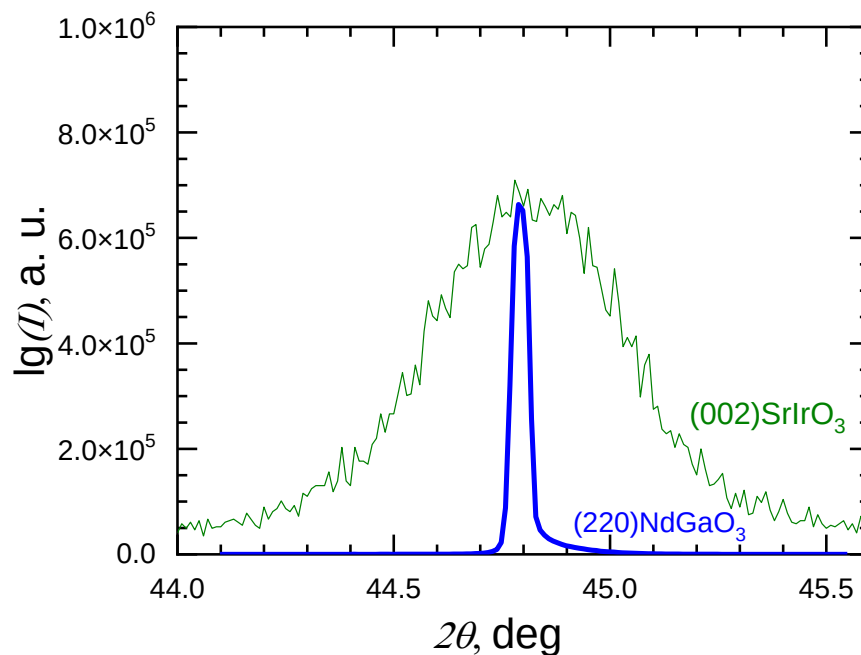


Рисунок 2 – Сравнение ширины дифракционных пиков от пленки (002) SrIrO_3 и от подложки (220) NdGaO_3 . Пик пленки смещен относительно пика подложки на 2.1° для совмещения по шкале 2θ

Для количественной оценки степени деформации кристаллической решетки в пленке $\text{SrIrO}_3/\text{NdGaO}_3$ был проведен анализ ширины дифракционных пиков на рентгеновских сканах. Известно [4], что полуширины пиков $\Delta(2\theta)$, измеренные (00n) $\omega/2\theta$ -сканах, связаны с относительной деформацией решетки $\delta c/c$ и толщиной когерентного слоя t соотношением (1):

$$\Delta(2\theta) = \frac{0.9\lambda}{t \cdot \cos\theta} + \left(\frac{2\delta c}{c}\right) \cdot \tan\theta, \quad (1)$$

где $\Delta(2\theta)$ – полуширина дифракционного пика; t – средний размер кристаллических зерен в пленке или ее толщина, если последняя свободна от межзеренных границ; θ – угол дифракции; $\delta c/c$ – относительная величина вариации межплоскостного расстояния в кристаллической решетке пленки в направлении, перпендикулярном плоскости подложки; $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ – длина волны рентгеновского излучения $\text{CuK}_{\alpha 1}$.

Для оценки параметров деформации решетки был проведен анализ зависимости $\Delta(2\theta) \cdot \cos\theta$ от $\sin\theta$, полученной из данных рентгеновской дифракции для пленки SrIrO_3 (рис. 3). Аппроксимируя эту зависимость прямой линией в соответствии с уравнением (1), можно определить толщину когерентного слоя t по отрезку, отсекаемому на оси ординат, а величину деформации решетки $\delta c/c$ – по наклону прямой.

По полученной зависимости $\Delta(2\theta) \cdot \cos\theta$ от $\sin\theta$ было рассчитано значение толщины когерентного слоя тонкой пленки t , которое составило около 80 нм. Кроме того, из наклона

аппроксимирующей прямой была определена величина деформации кристаллической решетки $\delta c/c \approx (2.3 \pm 1) \cdot 10^{-3}$. Это значение хорошо согласуется с данными для гетероэпитаксиальных пленок [5].

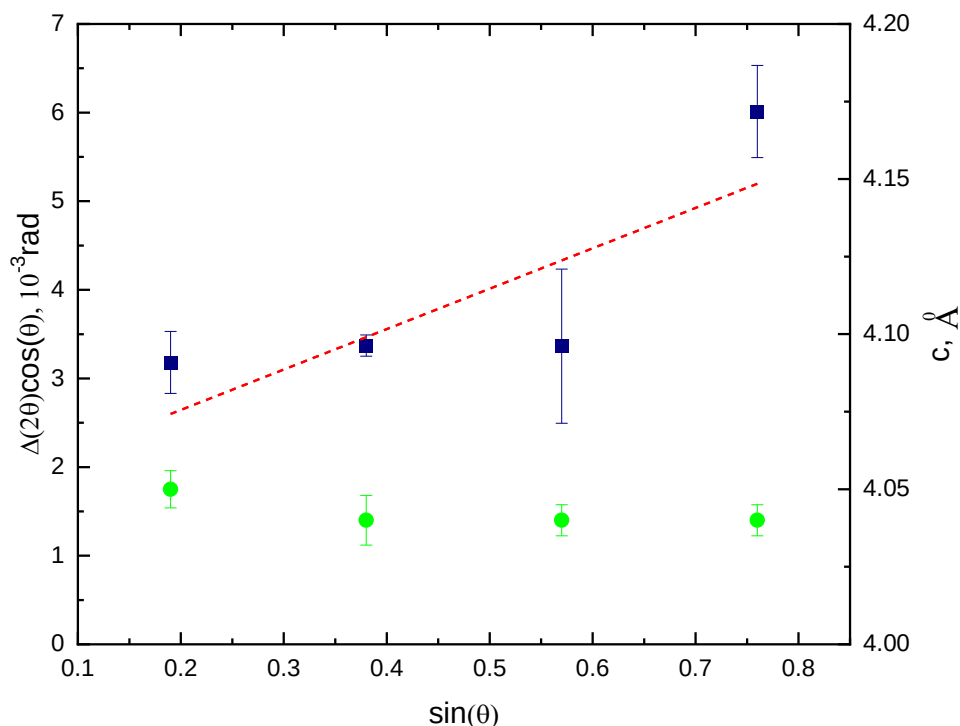


Рисунок 3 – Зависимость $\Delta(2\theta) \cdot \cos\theta$ от $\sin\theta$ для пиков (00n)SrIrO₃. Пунктиром обозначена аппроксимационная кривая, круглыми точками отмечены значения параметров решетки пленки c_{SrIrO_3} , полученные для каждого из пиков пленки

Заключение

В данной работе методом рентгеновской дифракции была исследована структура тонкой пленки SrIrO₃, выращенной на подложке NdGaO₃. Установлено, что из-за рассогласования параметров решетки пленки c_{SrIrO_3} и подложки c_{NdGaO_3} , которое составило около 4%, в пленке формируется двухосное сжатие. Расчет эффективного объема элементарной ячейки показал его уменьшение по сравнению с объемом ячейки массивного кристалла SrIrO₃. Это свидетельствует о формировании неоднородно деформированной структуры вследствие частичной релаксации напряжений в исследуемой пленке.

Литература

1. Boikov Yu.A., Claeson T. Magnetoresistance anisotropy in La_{0.67}Ba_{0.33}MnO₃ films laterally compressed by a neodymium gallate substrate. // Technical Physics. 2014. Vol. 59. N 7. P. 1027-1031.
2. Pannetier M., Fermon C., Goff G.Le, Simola J., Terr T. // Science. 2004. Vol. 204. N 5677. P. 1648.
3. Tokura Y. // Colossal Magnetoresistive Oxides. Amsterdam: Gordon And Breach, 2000. P. 3.
4. Specht E.D., Clausen R.E., Heathly L. // J. Mater. Res. 1990. Vol. 5. N 11. P. 2351.
5. Zuccaro C., Berlincourt H.L., Klein N., Erban K. // J. Appl. Phys. 1997. Vol. 82. P. 5695.
6. Kislinskii Yu.V., Ovsyannikov G.A., Petrzhik A.M., Constantinian K.Y., Andreev N.V., Sviridova T.A. Structure and electron transport of strontium iridate epitaxial films. // Physics of the Solid State. 2015. Vol. 57. N 12. C. 2519-2523. ISSN 1063-7834.
7. Gruenewald J.H., Nichols J., Terzic J., Cao G., Brill J.W., Seo S.S.A. Compressive strain-induced metal-insulator transition in orthorhombic SrirO₃ thin films. // Journal of Materials Research. 2014. Vol. 29, N 21. P. 2491-2496.