

Я.Т. Соловко, В.М. Пилипів, І.М. Будзуляк, Б.І. Яворський

РОЗРАХУНОК СЕРЕДНЬОКВАДРАТИЧНОГО ТЕПЛООВОГО ЗМІЩЕННЯ АТОМІВ ФЕРИТ-ГРАНАТОВИХ ПЛІВОК ЗА ДАНИМИ РЕНТГЕНОДИФРАКЦІЙНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

За даними рентгенодифракційних досліджень Ві-заміщених ферит-гранатових плівок із врахуванням розподілу інтенсивності рентгенівського випромінювання внаслідок теплового руху атомів, розраховано фактор Дебая-Валера середньоквадратичне теплове зміщення атомів, власну частоту коливань атомів і здійснено теоретичне обґрунтування експериментальних результатів.

При дослідженні плівкових ферит-гранатів, які широко використовуються в сучасних мікроелектронних пристроях і різноманітних магнітооптичних системах [1-3], важливе місце має визначення їх магнітних і структурних властивостей для подальшого керування ними з метою покращення характеристик працюючих об'єктів та виявлення нових сфер і можливостей майбутнього практичного застосування.

Основні методи вивчення структурних властивостей ферит-гранатових плівок ґрунтуються на використанні ефекту Месбауера та дифракції рентгенівських променів. При аналізі результатів рентгенодифрактометричних досліджень важливим є врахування фактору Дебая-Валера, за яким можна судити про структурну досконалість досліджуваних об'єктів, а також про середньоквадратичне теплове зміщення атомів. В літературних джерелах, наприклад [4], висвітлено методики визначення фактору Дебая-Валера та середньоквадратичного теплового зміщення атомів для твердих розчинів і зовсім не відображено розрахунків для монокристалічних ферит-гранатових плівок.

Метою даної роботи є розрахунок середньоквадратичного зміщення атомів у монокристалічних епітаксійних ферит-гранатових плівках, головна ідея якого полягає в тому, що тепловий рух атомів не розширює дифракційну лінію, а тільки зменшує її інтенсивність, причому початкова інтенсивність перерозподіляється між самою лінією та її бічними "напливами" [5].

Об'єктами дослідження були монокристалічні плівки номінального складу $(YSmCaBi)_3(FeGeSi)_5O_{12}$, вирощені на площині {111} підкладки ГГГ ($Gd_3Ga_5O_{12}$) методом рідкофазної епітаксії. Товщина плівки, стала ґратки плівки і підкладки за даними

рентгенодифрактометрії такі: $h = 0,49$ мкм, $a_{pl} = 12,349 \text{ \AA}$, $a_{pd} = 12,382 \text{ \AA}$.

Розрахунок середньоквадратичного теплового зміщення атомів здійснювався за кривими дифракційного відбивання, отриманими методом ω -сканування на двокристалльному рентгенівському дифрактометрі ДРОН-2.0. Експериментальні зйомки проводилися для двох порядків рефлексів (444) і (888), виміряних в однакових геометріях (п, -п). Згідно [5], фактор Дебая-Валера e^{-2M} для кубічної ґратки задається рівнянням:

$$I = I_0 \exp(-2M) = I_0 \exp\left(-\frac{1}{3} Q^2 \langle u^2 \rangle\right), \quad (1)$$

де $\langle u^2 \rangle$ - середньоквадратичне теплове зміщення; Q - довжина дифракційного вектора, $Q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$; λ - довжина хвилі; θ - брегівський кут; I_0 - інтенсивність відбитих променів, обчислених без врахування впливу теплових коливань [6]; I - істинна інтенсивність.

В нашому випадку за I взято інтегральну інтенсивність гаусіанів, якою апроксимувались експериментальні криві (рис. 1).

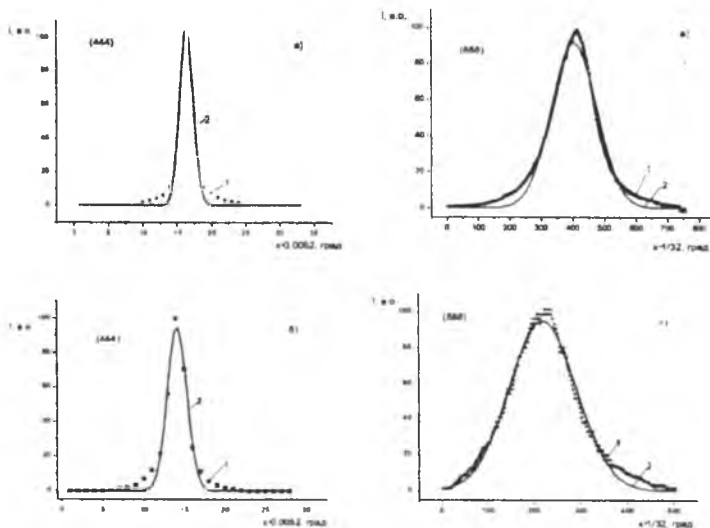


Рис. 1. Криві дифракційного відбивання (рефлекси (444) і (888)), експеримент. – 1, апроксимовані гаусіанами – 2: а) і в) – плівка; б) і з) – підкладка.

При гармонічному наближенні фактор послаблення амплітуди краще всього обчислювати, враховуючи, що розподіл ймовірності теплового зміщення \bar{u} , а з врахуванням хвильового вектора скалярний добуток $\bar{Q}\bar{u}$ [5], підпорядковується гаусівському розподілу:

$$\Omega(\bar{Q}\bar{u}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle (\bar{Q}\bar{u})^2 \rangle}} \exp \left(-\frac{(\bar{Q}\bar{u})^2}{2 \langle (\bar{Q}\bar{u})^2 \rangle} \right) \quad (2)$$

З іншої сторони, для кубічного кристалу

$$I = I_0 \exp \left(-\frac{kTQ^2}{m\omega^2} \right), \quad (3)$$

де ω – власна частота коливань атомів, m – маса атомів, T – температура зйомки.

Розраховані експериментальні дані подані в таблиці 1.

Таблиця 1.

Порядок рефлексу	Досліджув. об'єкт	e^{-2M}	$\sin \theta_B$	$\omega \times 10^{14}, c^{-1}$	$\langle u^2 \rangle \times 10^{-17}, cm^2$
(444)	Плівка	0,84	0,4321	0,3	0,30
	Підкладка	0,90	0,4309	0,3	0,31
(888)	Плівка	0,94	0,8643	0,8	0,04
	Підкладка	0,94	0,8619	0,8	0,04

Амплітуда \bar{u} теплових коливань атомів залежить від температури, сорту атомів, напряму в кристалі [7]. Розташування атомів кристалу ГТГ в залежності від напрямку подано на рис.2, виконаному за допомогою програми "Powercell", яка за введеними координатами атомів ґратки дає можливість наочно бачити структуру в заданому напрямі.

Знаючи максимальну частоту власних коливань атомів ω_{max} , можна обчислити температуру Дебая:

$$\theta_D = \frac{\hbar \omega_{max}}{k}, \quad (4)$$

Взявши за $\omega_{max} = \omega_{(888)} = 0.8 \times 10^{14} c^{-1}$, отримано $\theta_D \approx 600K$, що знаходиться в межах похибки і узгоджується з експериментальними

даними [8], в яких для заміщених ферит-гранатів температура Дебая становила $585 \pm 25 \text{ K}$.

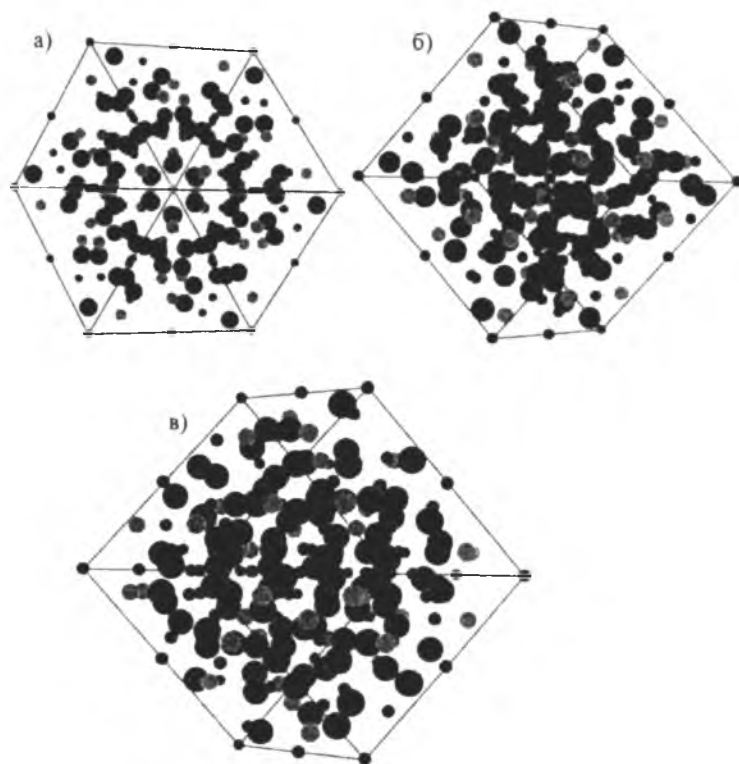


Рис.2. Видяг кристалічної структури ГГГ (маленькі кульки – галій, середні – гадоліній, великі – кистень): а) площина (111); б) під кутом $\theta_g(444) = 25,530^\circ$; в) під кутом $\theta_g(888) = 59,538^\circ$.

Висновки. Враховуючи, що початкова інтенсивність I_0 рентгенівського випромінювання перерозподіляється між самою лінією та бічними “напливами”, за I_0 було вибрано площу під

експериментальною кривою від рефлексів (444) і (888), а за I – площу під гаусіаною, якою була апроксимована експериментальна крива.

За співвідношенням $\frac{I}{I_0}$ було знайдено фактор Дебая-Валера e^{2M} , середньоквадратичне теплове зміщення $\langle u^2 \rangle$ та частоту власних коливань атомів ω .

Взявши $\omega_{(888)}$ за максимальне, розраховано температуру Дебая, що дає задовільні результати в порівнянні із месбауерівськими дослідженнями.

Знання власної частоти коливань атомів ω можна використати для розрахунків режимів термічного і лазерного відпалів, а також при розв'язанні інших прикладних задач фізики твердого тіла.

Debye-Valler's factor, the root thermal displacement square and own oscillation frequency of atoms have been calculated on the basis of X-ray diffractational investigations. The theoretical substantiation of experimental results has been made.

- [1]. Рандошкин В.В., Червоненкис А.Я. Прикладная магнитооптика. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 320 с.
- [2]. Балабашов А.М., Червоненкис А.Я. Магнитные материалы для микроэлектроники. – М.: Энергия, 1979.
- [3]. Дудоров В.Н., Рандошкин Б.В., Телеснин Р.В. Синтез и физические свойства монокристаллических пленок редкоземельных ферритов-гранатов // УФН. – 1977. – Т. 122. – № 3. – С. 253-295.
- [4]. Горелик С.С., Скаков Ю.А., Расторгуев Л.Н. Рентгенографический и электронно-оптический анализ. – М.: МИСИС, 1994. – 328 с.
- [5]. Сидоренко С.І., Барабаш Р.І. Сучасний рентгеноструктурний аналіз реальних кристалів. – К.: Наукова думка, 1997. – 368 с.
- [6]. Уманський Я.С. Рентгенография металлов. – М.: Металлургиздат, 1960. – 448 с.
- [7]. Руководство по рентгеновскому исследованию минералов. Под ред. В.А.Франк-Каменецкого. – Ленинград: Недра, 1975. – 400 с.
- [8]. Николаев В.И., Русаков В.С. Магнитная аномалия интенсивности для ядер Fe^{57} в ферритах-гранатах //ЖЭТФ. – 1976. – Т. 70. – № 5.