

PACS numbers: 61.05.cp, 61.05.Np, 61.72.Dd, 61.72.Hh, 61.72.J-, 61.72.ur, 61.80.Az

Моделювання та діагностика пошкоджень і деформацій у кристалі $Gd_3Ga_5O_{12}$ після імплантації йонів F^+

В. О. Коцюбинський, В. М. Пилипів, Б. К. Остафійчук,
І. П. Яремій, О. З. Гарпуль, С. Й. Оліховський*,
О. С. Скакунова*, В. Б. Молодкін*, Є. М. Кисловський*,
Т. П. Владімірова*, О. В. Решетник*, Є. В. Кочелаб*

*Прикарпатський національний університет ім. Василя Стефаника,
вул. Шевченка, 57,*

76025 Івано-Франківськ, Україна

**Інститут металлофизики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Акад. Вернадського, 36,
03680, МСП, Київ-142, Україна*

Для одержання кількісних характеристик радіаційного дефектоутворення в гадоліній-галійовому гранаті (ГГГ) проведено математичне моделювання процесу імплантації йонів фтору за допомогою програми SRIM-2008. Встановлено розподіли за глибиною кристалу пружних і непружних енергетичних втрат імплантованого йона F^+ з енергією 90 кеВ та зміщених йонів мішені при гальмуванні в кристалі ГГГ, а також профілі розподілу за глибиною кількостей імплантованих і зміщених йонів. Визначено характер пошкоджень та їх кількісні характеристики. Структурні зміни, спричинені імплантацією йонів фтору в поверхневому шарі монокристалу ГГГ, досліджено методом Рентгенової дифракції. Встановлено форму профілю деформації в імплантованому шарі і зв'язок його характеристик з результатами моделювання.

Mathematical modelling of fluorine ion implantation process is carried out by using the SRIM-2008 program for the determination of quantitative characteristics of the radiation defect formation in the gadolinium–gallium garnet (GGG). The crystal depth distributions are measured for elastic and inelastic energy losses of both the implanted F^+ ion with 90 keV energy and the displaced matrix ions due to their slowing-down in the GGG crystal. Depth distribution profiles are obtained for quantities of implanted and displaced ions. The damage pattern and its quantitative characteristics are determined. Structural changes caused by fluorine ion implantation in a surface layer of the GGG single crystal are investigated by an X-ray diffraction technique. The shape of the strain profile in the

implanted layer and relationships of its characteristics with the simulation results are determined.

Для получения количественных характеристик радиационного дефектообразования в гадолиний-галлиевом гранате (ГГГ) проведено математическое моделирование процесса имплантации ионов фтора при помощи программы SRIM-2008. Определены распределения по глубине кристалла упругих и неупругих энергетических потерь имплантированного иона F^+ с энергией 90 кэВ и смещённых ионов мишени при торможении в кристалле ГГГ, а также профили распределения по глубине количеств имплантированных и смещённых ионов. Определён характер повреждений и их количественные характеристики. Структурные изменения, вызванные имплантацией ионов фтора в поверхностном слое монокристалла ГГГ, исследованы методом рентгеновской дифракции. Установлена форма профиля деформации в имплантированном слое и связь его характеристик с результатами моделирования.

Ключові слова: гадоліній-галійовий гранат, йонна імплантація, первинні та вторинні радіаційні дефекти, математичне моделювання, деформація, двокристальний Рентгенів дифрактометр, крива дифракційного відбивання.

(Отримано 1 липня 2014 р.)

1. ВСТУП

Монокристали гадоліній-галійового гранату (ГГГ) $Gd_3Ga_5O_{12}$ — складної оксидної сполуки — є цікавими об'єктами для фундаментальних наукових досліджень [1–6] і водночас мають широке практичне застосування у різних областях сучасної техніки [7]. Вивчення особливостей процесів радіаційного дефектоутворення і, зокрема, пояснення механізмів перебігу процесів утворення первинних і вторинних радіаційних дефектів після йонної імплантації цих кристалів мають важливе значення для розвитку радіаційної фізики кристалів зі структурою гранату і, взагалі, складних оксидних сполук [8, 9]. При цьому не менш важливим з точки зору розвитку сучасних метод дефектної інженерії є одержання кількісної інформації про характеристики структурних пошкоджень і деформацій у поверхневих шарах таких кристалів з розмірами порядку десятків нанометрів.

Однією з ефективних метод дослідження процесів утворення дефектів у кристалах при імплантації йонів є математичне моделювання, яке дозволяє безпосередньо визначати просторові розподіли імплантованих йонів і атомів віддачі, їхніх енергетичних втрат та створених ними дефектів [10–12]. З іншого боку, для кількісного визначення характеристик структурних дефектів і деформацій в модифікованих поверхневих шарах кристалів ви-

користують неруйнівні Рентгенові дифракційні методи діагностики, більшість яких ґрунтується на мірянні кривих дифракційного відбиття (КДВ) кристалів у Бреґгівій геометрії дифракції [13, 14].

Мета даної роботи полягає у встановленні шляхом математичного моделювання характеру, механізмів і кількісних характеристик структурних змін в імплантованому шарі монокристалу ГГГ при різних дозах імплантації легких йонів з фіксованою енергією (розд. 3). Буде також проведено порівняльну аналізу розрахованих профілів імплантації з експериментально знайденими профілями деформації з використанням КДВ, виміряних на двокристальному Рентгеновому дифрактометрі (розд. 4).

2. ЕКСПЕРИМЕНТ

Досліджувані зразки монокристалів ГГГ $Gd_3Ga_5O_{12}$ з товщиною приблизно 500 мкм були вирізані по площині (111) зі зливка, вирощеного за методом Чохральського з віссю росту [111]. Обробка після росту складалася з механічної шліфовки, а також механічної, хеміко-механічної та хемічної поліровки. Зразки було імплантовано йонами F^+ з енергією 90 кеВ при такій їх орієнтації, яка забезпечувала відсутність каналювання йонів, а саме, під кутом 7° відносно нормалі до площини (111). Дози опромінення зразків складали $D = 1 \cdot 10^{13}$, $2 \cdot 10^{13}$, $4 \cdot 10^{13}$, $6 \cdot 10^{13}$, $1 \cdot 10^{14}$ см⁻².

У дифракційних міряннях на двокристальному дифрактометрі використовувалося характеристичне Рентгенове випромінення CuK_{α_1} . Для досліджуваних зразків вимірювалися криві дифракційного відбивання (КДВ) у симетричній геометрії дифракції за Бреґгом для рефлексів (444) і (888).

3. МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ УТВОРЕННЯ ДЕФЕКТІВ ПРИ ІМПЛАНТАЦІЇ ЙОНІВ ФТОРУ В МОНОКРИСТАЛ ГГГ

Для одержання кількісних характеристик процесу радіаційного дефектоутворення в монокристалах ГГГ при імплантації йонів F^+ було проведено його математичне моделювання за допомогою програми SRIM-2008 [10]. В результаті за методом Монте-Карло, яка використовується в цій програмі, було визначено розподіли пробігів йонів та створених ними дефектів. Перевагою застосованої методи в порівнянні з розрахунками на основі кінетичного Больцманного рівняння [11, 12] є більш точне врахування пружних та непружних втрат енергії в каскадах атомних зіткнень. Вплив на результат моделювання основного недоліку програми, — здійснення розрахунків в наближенні аморфної мішені,

— було зведено до мінімуму завдяки вибору таких умов йонного опромінення, які б виключали виникнення ефектів каналювання, а саме, імплантація досліджуваних зразків проводилася під кутом 7° відносно нормалі до площини (111).

Моделювання проводилося в припущенні, що генерація дефектів має незалежний характер для окремих підґратниць ГГГ. Елементарним актом дефектоутворення вважалося утворення Френкелевої пари «вкорінений атом–вакансія». В рамках застосованого моделю, утворення дефекту вважалося можливим лише у випадку, коли енергія, передана від імплантованого йону до йону мішені, перевищувала порогове значення енергії зміщення цього йону E_d (для Gd^{3+} , Ga^{3+} і O^{2-} в ГГГ відповідно $E_d \approx 66, 56$ і 40 eV [15]). Застосовувалася метода моделювання йонної імплантації, яку описано в роботі [16].

У загальному випадку імплантований йон під час гальмування в твердому тілі втрачає енергію як внаслідок пружного розсіяння на ядрах атомів мішені, так і через процеси непружної взаємодії з електронною підсистемою, що супроводжуються збудженням та емісією електронів атомних оболонок. Величина енергетичних втрат імплантованого йона на одиницю пробігу визначається з рівняння [11]:

$$\frac{dE}{dx} = -N_0 [S_n(E) + S_e(E)], \quad (1)$$

де N_0 — середнє число атомів в одиниці об'єму мішені, E — енергія йона, $S_n(E)$ та $S_e(E)$ — перерізи ядерного та електронного гальмування відповідно.

При імплантації йонів фтору в кристал ГГГ швидкість їх енер-

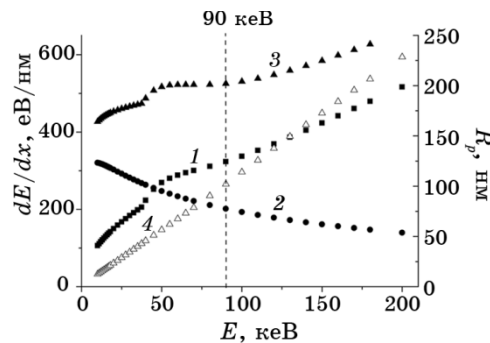


Рис. 1. Залежності втрат енергії йоном F^+ на одиницю пробігу в кристалі ГГГ (1 — електронні, 2 — ядерні, 3 — сумарні) та його середнього проекційного пробігу (4) відносно початкової енергії згідно розрахунку за методом Монте-Карло.

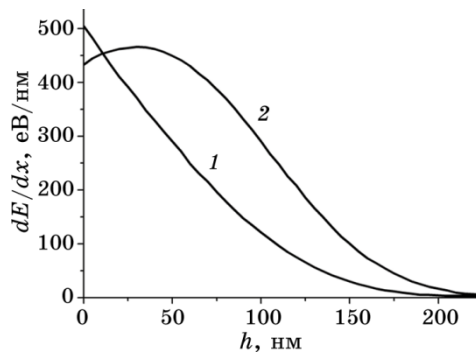


Рис. 2. Розподіл за глибиною непружних (1) та пружних (2) енергетичних втрат йона F^+ з $E = 90$ кеВ при гальмуванні в кристалі ГГГ (розрахунок за наближеною аналітичною методою [18]).

гетичних втрат на одиницю пробігу через пружні зіткнення з ядрами мішені монотонно росте зі збільшенням початкової енергії, в той час як швидкість втрат через непружне гальмування монотонно спадає (рис. 1). Зокрема, коли початкова енергія імплантованого йона фтору дорівнює 90 кеВ, то домінуючими на початку пробігу є електронні втрати, що складають 320 еВ/нм або близько 62% від сумарних. Оскільки в процесі гальмування енергія імплантованого йона поступово зменшується і, відповідно, швидкість непружних енергетичних втрат спадає, а пружних — зростає, то в кінцевому підсумку формуються енергетичні просторові розподіли з характерною формою — монотонно спадний для непружних енергетичних втрат і Гаусів для пружних енергетичних втрат (рис. 1–3).

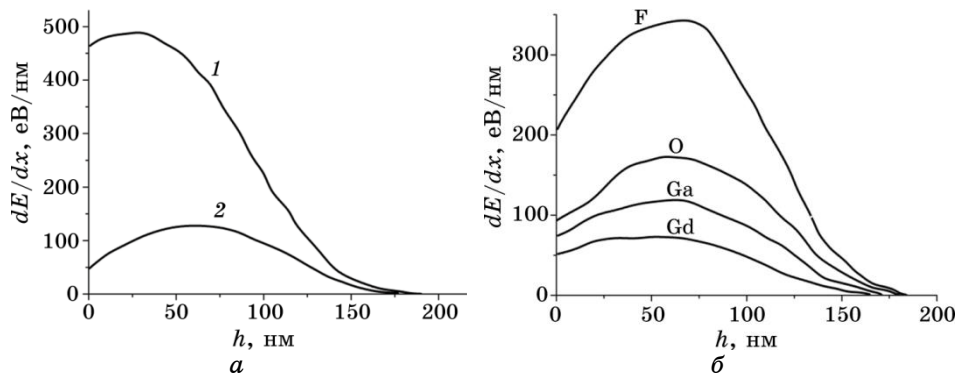


Рис. 3. Розподіли за глибиною непружних (а) і пружних (б) енергетичних втрат при гальмуванні йона F^+ з $E = 90$ кеВ (крива 1) та зміщених йонів (крива 2) в кристалі ГГГ (моделювання методом Монте-Карло [16]).

Відповідні нормовані просторові розподіли для пружних енергетичних втрат характеризуються такими величинами як середній проективний пробіг R_p і стандартний відхил (ширина розподілу) ΔR_p [17]:

$$f_{\text{nucl}}(x) = \frac{f_{\text{nucl}}^{\text{max}}}{\Delta R_p \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x - R_p)^2}{2\Delta R_p^2}\right], \quad (2)$$

де x відраховується від поверхні в глибину кристалу вздовж початкового напрямку падіння йона. Середній проективний пробіг імплантованого йона фтору з енергією 90 кеВ в кристалі ГТТ становить близько 100 нм (рис. 1, 3).

Розподіли пружних і непружних енергетичних втрат імплантованого йона фтору з початковою енергією 90 кеВ, які було розраховано на основі наближеної аналітичної методи, запропонованої в роботі [18], показано на рис. 2. Знайдений розподіл непружних енергетичних втрат імплантованого йона є монотонно спадним із максимумом на поверхні, де величина dE/dx складає 500 еВ/нм (рис. 2, крива 1). В приповерхневому шарі товщиною близько 20 нм значення пружних та непружних втрат згідно цієї методи близькі між собою та лежить в межах 440–500 еВ/нм.

Деякі інші результати для проективного розподілу непружного енерговиділення одержано з використанням моделювання методом Монте-Карло [16]. В цьому випадку основний внесок енергії в електронну підсистему мішені від імплантованого йона фтору здійснюється в приповерхневому шарі товщиною близько 50 нм (рис. 3, а). В той же час пружні втрати як імплантованого йона, так і зміщених йонів кристалу, що сумарно є зіставними з пружними втратами імплантованого йона, досягають максимуму в діапазоні глибин 60–80 нм (рис. 3, б).

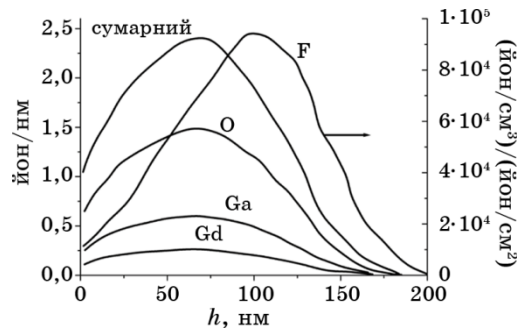


Рис. 4. Профілі розподілу за глибиною кількості зміщених йонів кристалу ГТТ на одиницю пробігу імплантованого йона F^+ з $E = 90$ кеВ та профіль розподілу йонів F^+ , який нормовано на дозу опромінення.

На рисунку 4 показано профілі розподілу за глибиною кількості зміщених йонів кожного сорту на одиницю пробігу імплантованого йона F^+ з $E = 90$ кеВ в кристалі ГГГ, а також профіль розподілу самих йонів F^+ , який нормовано на дозу опромінення. Як видно, радіаційне розупорядкування найефективніше відбувається в аніонній підґратниці ГГГ, де кількість зміщених йонів досягає 1,5 на 1 нм пробігу імплантованого йона фтору. Це перевищує відповідний показник для підґратниць гадолінію та галію приблизно у 5 та 2,5 разів (рис. 4), що зумовлено, найімовірніше, окрім різниці в заселеності вузлів ґратниці, також відмінностями в порогових значеннях енергії зміщення цих йонів та їх масах. Відмітимо, що про аналогічне селективне руйнування аніонної підґратниці при імплантації монокристалів зі структурою ґранату повідомлялось також в роботі [19].

Розрахований проективний пробіг йонів фтору з початковою енергією 90 кеВ в структурі ГГГ становить $R_p = 97$ нм, поперечний розкид $\Delta R_p = 38$ нм, максимальна глибина проникнення імплантованого йона сягає 200 нм (рис. 4). Середня кількість йонів, зміщених внаслідок пружних взаємодій кожного імплантованого йона фтору з атомами мішені ГГГ, становить близько 340. Максимальне дефектоутворення відбувається на глибині 70 ± 5 нм, де ймовірність перекривання йонних треків та формування протяжних комплексів дефектів є максимальною (рис. 4). Цей висновок ґрунтується на розрахунках розвитку каскаду атом-атомних зіткнень за методом Монте-Карло (рис. 5). Хрестиками на рис. 5 відмічено атоми матриці, які одержали енергію, більшу від E_d — енергії зміщення атома з вузла кристалічної ґратниці. Як видно з діаграми, при застосованих експериментальних умовах каскад складається як з окремих точкових дефектів, так і з їх кластерів. Максимальна концентрація протяжних дефектів фіксується саме на глибинах 60–90 нм.

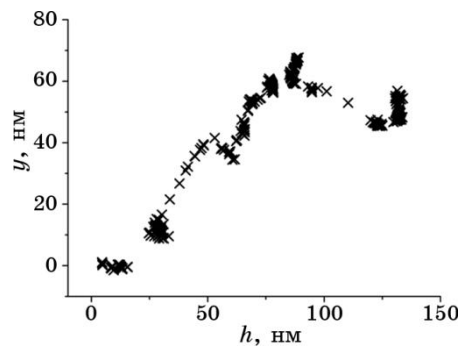


Рис. 5. Характерний вигляд треку імплантованого йона F^+ з $E = 90$ кеВ в кристалі ГГГ.

Тут слід нагадати про існування різних механізмів і, відповідно, різних моделей розупорядкування та аморфізації при йонній імплантації твердих тіл. При імплантації легкими йонами з середньою енергією (до кількох сотень кеВ) величина енергії, переданої як в електронну, так і в ядерну підсистему мішені, зокрема, ґранатів [20], по всій довжині йонного треку не перевищує критичних значень ≥ 1 еВ/йон, при яких можливе утворення термічних піків. Крім того, довжина вільного пробігу імплантованих йонів, яка обернено пропорційна квадрату їх маси [17], є достатньо великою для утворення при зіткненнях з атомами мішені відокремлених одна від одної Френкелевих пар. Відповідно, ріст рівня дефектності кристалічної структури відбувається пропорційно накопиченню Френкелевих пар з набором дози. Це підтверджується, зокрема, близькою до лінійної залежності відносної деформації ґратниці від дози опромінення, яка для легких йонів середніх енергій спостерігалася дифракційними методами у кристалах ґранатів [19, 21]. При такому (гомогенному) механізмі утворення і ріст аморфної фази відбувається пропорційно набору дози в результаті накопичення радіаційних дефектів — спочатку на тій глибині кристалу, яка відповідає положенню максимуму переданої енергії, а потім у прилеглих областях з обох сторін в ході набору дози.

На відміну від гомогенного механізму аморфізації для легких імплантованих йонів розвиток розупорядкування кристалічної ґратниці при опроміненні важкими йонами відбувається за гетерогенним механізмом. Він передбачає, що завдяки малій довжині вільного пробігу імплантованих йонів, яка обернено пропорційна квадрату їх маси, гальмування імплантованого йона супроводжується формуванням непереривної еліпсоподібної аморфної області вздовж треку, тобто, «теплого піку». Зі збільшенням набраної дози концентрація аморфних зон зростає і зрештою їх перекриття призводить до утворення суцільного аморфного шару.

Отже, механізми аморфізації кристалічної структури при імплантації легкими і важкими йонами відрізняються: у першому випадку це накопичення ізольованих точкових дефектів, а у другому — пряма ударна аморфізація. Критичні дози імплантації, при яких порушений шар повністю аморфізується, відрізняються за величиною для цих двох випадків при однакових початкових енергіях імплантованих йонів.

Проте, існує можливість і проміжного випадку — змішаного механізму, який, зокрема, реалізується при експериментальних умовах, застосованих в даному дослідженні. Він зумовлений наявністю в мішені атомів різного сорту з істотно відмінними масами (атоми Gd, Ga і O мають відповідно 64, 31 і 16 а.о.м.), які в якості атомів віддачі мають істотно відмінні довжини вільного

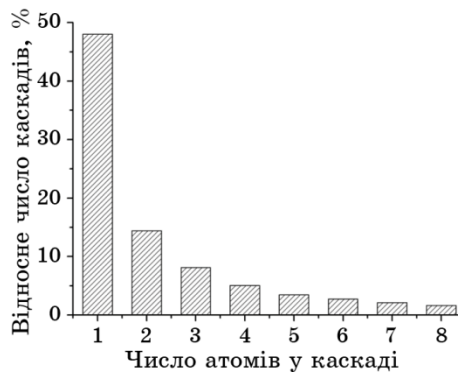


Рис. 6. Ймовірність утворення каскадів вторинних зміщень з різною кількістю йонів при імплантації кристалу ГГГ йонами F^+ з $E = 90$ кеВ.

пробігу. Статистичне оброблення даних, одержаних при моделюванні процесу імплантації йона фтору (19 а.о.м.) з енергією 90 кеВ у кристал ГГГ, показало, що хоча найбільш ймовірним є процес генерації одиночних Френкелевих пар (близько 48%), разом з тим високу ймовірність мають процеси утворення субкаскадів з двох (15%), трьох (8%), чотирьох (5%) і т.д. атомів віддачі (рис. 6). Таким чином, в процесі гальмування формуватиметься трек, що складається як з віддалених на відстань одна від одної до 1 нм ізольованих Френкелевих пар, так і ділянок, енерговиділення в яких достатнє для формування кластеру точкових дефектів. Руйнування кристалічної структури зі збільшенням дози опромінення відбувається в цьому випадку як результат накопичення дефектів обох типів з наступним їх зв'язуванням у комплекси.

При цьому необхідно звернути увагу на те, що під час імплантації процес руйнування кристалічної структури одночасно супроводжується її частковим відновленням за рахунок рекомбінації Френкелевих пар. Характер генерації радіаційних дефектів дозволяє припустити, що термічно активована рекомбінація пари вакансія–вкорінений йон (динамічний відпал) є найімовірнішою саме між первинними компонентами пари (анігіляція корельованих пар), а не між випадковими сусідніми парами.

Крім того, при зіткненнях атомів у кристалі утворюються так звані нестійкі пари, в яких зміщений атом зберігає зв'язок зі своєю вакансією [22, 23]. Навколо вакансії існує зона нестійкості, в межах якої вибитий атом може атермічно або з мінімальними затратами енергії рекомбінувати з власною вакансією. Розміри цієї зони визначаються залежністю періодичної частини потенціальної енергії вкоріненого атома від відстані до його вакансії. У випадку Кулонової взаємодії між вакансією та міжвузло-

вим атомом, яка є характерною для йонних кристалів, радіус зони нестійкості навколо рівноважного положення у вузлі ґратниці можна оцінити з використанням співвідношення [23]:

$$r_0 = \alpha \sqrt{\frac{|q_1 q_2| a}{\varepsilon_0 U_m}}, \quad (3)$$

де α — коефіцієнт, який має порядок одиниці і величина якого залежить від форми рельєфу потенціалу міжвузлового атома в кристалі, q_1 і q_2 — заряди вакансії та міжвузлового йона, ε_0 — діелектрична константа, a — середня відстань між атомами кристалічної ґратниці, U_m — енергія міграції міжвузлового йона. Для структури ГТТ середньозважене значення $a \approx 0,275 \text{ \AA}$, $\varepsilon_0 = 12$ [24], енергії активації процесу міграції можна покласти $U_m \approx 3 \text{ eV}$ для катіонів і $U_m \approx 2 \text{ eV}$ для аніонів, аналогічно як для залізо-ітрієвого гранату (ЗІГ) [25–27]. Отже, з виразу (3) випливає, що для вкорінених катіонів з $q_1 = 3e$ (e — абсолютне значення заряду електрона) радіус зони нестійкості $r_0 \approx 1 \text{ \AA}$, а для вкорінених аніонів з $q_2 = -2e$ — $r_0 \approx 0,8 \text{ \AA}$. Такі відносно малі розміри зон нестійкості дозволяють стверджувати, що переважна більшість Френкелевих пар у структурі ГТТ є стійкими.

З іншого боку, згідно з аналізою даних про формування каскадів атом-атомних зіткнень, що було одержано при моделюванні методом Монте-Карло, середній об'єм розупорядкованої області (кластера) складає $V_{\text{am}} = 23 \text{ \AA}^3$. Згідно з аналізою статистичного масиву, що був одержаний для 5000 імплантованих йонів, максимальне значення $V_{\text{am}}(z)$ спостерігається на глибині близько $z = 70 \text{ нм}$. Середній за глибиною диференційний переріз розсіяння, що розраховувався зі статистичного розподілу енергій, переданих мішені ГТТ імплантованим йоном в процесі гальмування, становить $\sigma_n^{\text{av}} = 1,68 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$. Тоді ступінь структурного розупорядкування імплантованих шарів можна визначати згідно зі співвідношенням, запропонованим для ґранатових структур [28]:

$$c_{\text{am}}^{\text{av}}(D) = 1 - \exp(-\beta D), \quad (4)$$

де $\beta = \sigma_{\text{am}}^{\text{av}} N V_{\text{am}}(z)$ — коефіцієнт, пропорційний концентрації радіаційних дефектів, N — концентрація йонів мішені ($N = 8,4 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ для структури ГТТ), D — доза опромінення.

Вираз (4) фактично уможливорює оцінити рівень аморфізації за рахунок накопичення ізольованих Френкелевих пар (за гомогенним механізмом) тільки за абсолютного нуля температури. Очевидно, що при кімнатних і підвищених температурах (особливо в умовах теплового піку) точкові дефекти, концентрація яких перевищує рівноважну, будуть мігрувати і рекомбінувати або

об'єднуватися в кластери з більшими розмірами. Задля врахування цих обставин співвідношення (4) було модифіковано до більш гнучкого вигляду, який дає можливість врахувати вплив анігіляції Френкелевих пар і формування вторинних радіаційних дефектів на процес аморфізації [29]:

$$c_{\text{am}}^{\text{av}}(D) = 1 - \exp(-N_d/N_{\text{cr}}), \quad (5)$$

$$N_d(z) = \sigma_n(z)ND, \quad (6)$$

де N_d — концентрація точкових дефектів, N_{cr} — критичне значення концентрації дефектів, при якому розпочинається аморфізація структури.

Очевидно, що при концентраціях точкових дефектів, нижчих за критичну, при яких об'єднання дефектів у кластери є малоймовірним, можна очікувати пропорційності між відносною деформацією кристалічної ґратниці та величиною концентрації точкових дефектів. Подібне припущення було підтверджено, зокрема, при дослідженні перебігу релаксаційних процесів в епітаксіальних плівках ЗІГ, імплантованих йонами V^+ [30]. На основі результатів, одержаних методом двокристалічної Рентгенової дифрактометрії, було встановлено, що між відносним ступенем структурного розупорядкування та максимальним значенням відносної деформації приповерхневих шарів плівки спостерігається чітка кореляція. Аналогічні висновки зроблено також для випадку імплантації йонів N^+ у монокристалічну плівку ЗІГ [31].

Профілі розподілу ступеня відносного розупорядкування структури монокристалу ГІГ при опроміненні його йонами F^+ з енергією $E = 90$ кеВ для випадків використаних доз, які було розраховано з використанням методики з роботи [32], наведено на рис. 7. На основі одержаних даних побудовано залежність максимальних значень ступеня розупорядкування кристалічної структури від дози опромінення (рис. 8). Цю залежність на трьох різних ділянках можна інтерпретувати наступним чином.

В ділянці низьких доз йонні треки не перекриваються і дефектність структури є мінімальною. При проміжних дозах починається поступове накопичення точкових дефектів з наступним їх зв'язуванням у комплекси. Подальше збільшення дози веде до перекриття йонних треків та появи комплексів, здатних приєднувати до себе точкові дефекти, що мігрують. Дифузія дефектів спричинює утворення розупорядкованих (аморфних) областей, що зумовлює поступовий вихід залежності $c_{\text{am}}^{\text{av}}(D)$ на плато. Ця інтерпретація підтверджується результатами роботи [33], в якій експериментально одержано аналогічну залежність при врахуванні пропорційності між ступенем розупорядкування кристалічної ґратниці плівки ЗІГ та інтегральною інтенсивністю парамаг-

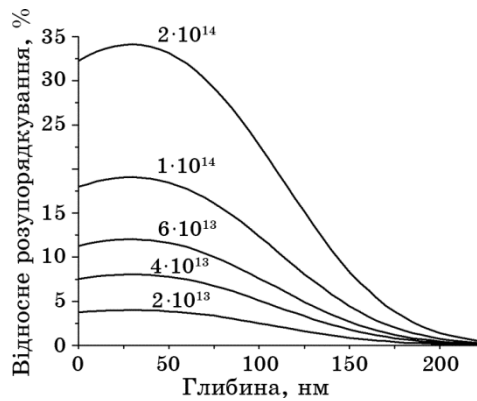


Рис. 7. Розраховані профілі розподілу структурного розупорядкування для монокристалу ГГГ, імплантованого йонами F^+ з енергією 90 кеВ.

нетної компоненти її Мессбауєрового спектру.

Авторами роботи [34] було запропоновано критерій опису стану йонно-імплантованого шару ферит-гранатових плівок, відповідно до якого пружний характер порушень зберігається для ступенів розупорядкування 0,28–0,61 незалежно від енергії імплантованих йонів та дози опромінення, тоді як пластичні перетворення в кристалі починаються при перевищенні значення 0,61. Відповідно до цього критерію руйнування кристалічної структури в нашому випадку повинно розпочатися в інтервалі доз $1 \cdot 10^{14}$ – $5 \cdot 10^{14}$ см⁻². Згідно з результатами моделювання (рис. 8), швидкість розупорядкування починає збільшуватись при дозах, що відповідають початку цього інтервалу, а саме, $1 \cdot 10^{14}$ – $2 \cdot 10^{14}$ см⁻².

Для підвищення достовірності результатів моделювання необхідно враховувати активізацію рекомбінаційних процесів при перетині зон нестійкості дефектів в результаті збільшення їх кон-

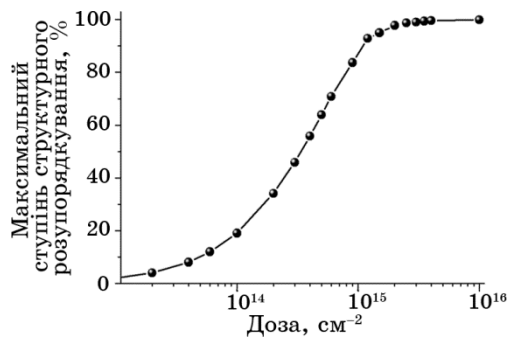


Рис. 8. Залежність максимального значення ступеня структурного розупорядкування монокристалу ГГГ від дози імплантації йонами F^+ з $E = 90$ кеВ.

центрації при наборі дози. Зокрема, домінуючу роль близькодіючо-анігіляційного механізму відбудови структури для імплантованих йонами кисню плівки ЗП підтверджують дані роботи [27] про величину характерних інтервалів часу для елементарних актів процесу міграції дефектів $(1,6-8,4) \cdot 10^{-13}$ с, які сумірні з характерним часом дефектоутворення при атомних зіткненнях [17, 35]. Там же було експериментально визначено величини енергії активації процесів рекомбінаційного відновлення точкових дефектів для структури ЗП $(2,0-3,2)$ еВ, що, як слід очікувати, будуть знижені в результаті переходу системи в метастабільний стан при накопиченні дефектів. Отже, паралельно з процесами утворення дефектів відбуватиметься відновлення кристалічної ґратниці і важливою характеристикою цих процесів є співвідношення швидкостей генерації та рекомбінації дефектів.

Таким чином, найімовірнішим механізмом розупорядкування структури ГТТ при імплантації йонів F^+ з $E = 90$ кеВ є змішаний механізм зародження аморфної зони, який полягає в гомогенному накопиченні точкових дефектів і паралельному утворенні нерухомих кластерів. Ці кластери можуть мати вигляд, наприклад, дислокаційних петель втіленого типу або зародків нової фази, що ростимуть у результаті дифузії і приєднання до них точкових дефектів.

4. ДІАГНОСТИКА СТРУКТУРНИХ ЗМІН В МОНОКРИСТАЛАХ ГТТ, ІМПЛАНТОВАНИХ ЙОНАМИ ФТОРУ

Структурні зміни в приповерхневому шарі монокристалу ГТТ, які спричинені імплантацією йонів фтору, досліджувалися Рентгеновою дифрактометричною методою. На КДВ, одержаних для монокристалів ГТТ, імплантованих йонами фтору з енергією 90 кеВ та різними дозами, спостерігаються осциляції інтенсивності розсіяних Рентгенових променів у вигляді додаткових піків та напливів (рис. 9), що пояснюється дифракцією Рентгенового пучка на деформованому приповерхневому шарі [13, 14]. Аналіза додаткової осциляційної структури уможлиблює одержати інформацію про пружньо деформований стан йонно-імплантованої частини півки і, відповідно, про концентрацію, фізичні характеристики та розподіл радіаційних дефектів за глибиною, що зумовлюють зміни в міжплощинній відстані приповерхневого шару кристалу [19–21, 27–30].

Товщина порушеного шару монокристалів ГТТ для всіх використаних в роботі доз імплантації не перевищує 0,03 мкм, тому відносна інтенсивність додаткових піків на КДВ складає не більше 1% від інтенсивності максимуму Бреґґового піку (рис. 9). Дві КДВ на рис. 9 (для вихідного зразка та зразка, імплантованого з

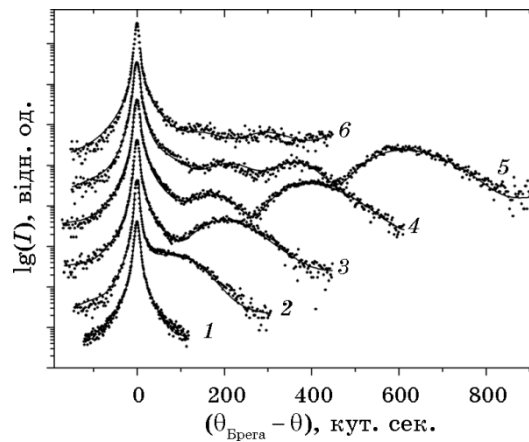


Рис. 9. Криві дифракційного відбивання (рефлекс (444)), одержані для монокристалів ГПГ, імплантованих йонами F^+ ($E = 90$ кеВ) з дозами $D = 0$ (1), $1 \cdot 10^{13}$ (2), $2 \cdot 10^{13}$ (3), $4 \cdot 10^{13}$ (4), $6 \cdot 10^{13}$ (5) та $1 \cdot 10^{14}$ (6) $см^{-2}$ (точки — експеримент, суцільні лінії — розрахунок).

дозою $1 \cdot 10^{13}$ $см^{-2}$) зображено в одному масштабі інтенсивності, а інтенсивність кожної наступної КДВ з більшою дозою для кращої візуалізації в логарифмічній шкалі збільшувалася на порядок. Як видно, радіаційні дефекти призводять до підйому хвостів КДВ, які сформовані випроміненням, когерентно розсіяним на приповерхневому шарі з градієнтом міжплощинної відстані. Прикметним є те, що збільшення дози імплантації слабо впливає на величину дифузної складової інтенсивності розсіяння Рентгенових променів від імплантованого шару.

При аналізі одержаних експериментальних КДВ було використано програмне забезпечення, у якому для пошуку оптимальних параметрів підгонки теоретичних КДВ застосовується генетичний алгоритм [36]. Початкові значення параметрів підгонки були знайдені з використанням наближеної аналітичної методи, що дозволяє зв'язати розподіл осцилюючої інтенсивності розсіяння на хвостах вимірних КДВ з параметрами профілю деформації в імплантованому шарі [37]. В результаті апроксимації експериментальних КДВ теоретично розрахованими на основі статистичної динамічної теорії розсіяння Рентгенових променів у деформованому кристалі з дефектами [38] одержано профілі розподілу пружної деформації з глибиною порушеного шару імплантованих монокристалів ГПГ (рис. 10). Слід зауважити, що при цьому внеском дифузної складової інтенсивності розсіяння Рентгенових променів в імплантованому шарі знехтували, так само як і внеском дефектів у цьому шарі в показник статичного фактора Дебая–Валлера.

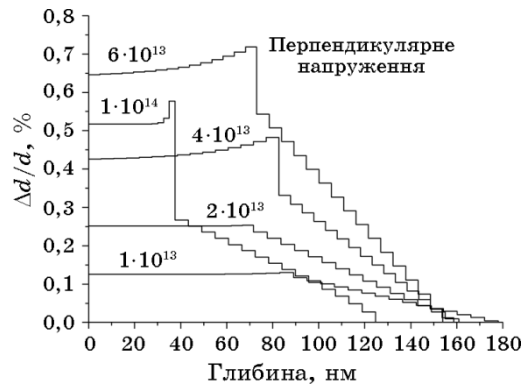


Рис. 10. Профілі розподілу пружних деформацій з глибиною порушеного шару монокристалу ГГГ, імплантованого йонами F^+ ($E = 90$ кеВ) в напрямку, перпендикулярному до поверхні.

Встановлено, що збільшення дози імплантації в діапазоні $1 \cdot 10^{13}$ – $6 \cdot 10^{13}$ см^{-2} призводить до лінійного росту відносної деформації при незначних змінах товщини порушеного шару, яка складає приблизно 160 нм (рис. 10). Ці експериментальні результати повністю узгоджуються з наведеними вище результатами числового моделювання процесу дефектоутворення для протяжності профілів розподілу енерговиділення при пружньому гальмуванні (рис. 3 та 4). В той же час, узгодження знайдених профілів відносної деформації з результатами чисельного моделювання стосовно кількості йонів мішені, які зміщені імплантованими йонами, вимагає істотної корекції цієї кількості в сторону її зменшення.

Для порівняння знайденої дифракційною методом відносної деформації в напрямі, перпендикулярному до поверхні кристалу, з модельною деформацією було проведено відповідний розрахунок. Остання пов'язана з модельованим розподілом дефектів згідно зі співвідношенням:

$$\varepsilon_{\perp}(z) = \frac{\Delta d}{d} \cong \frac{1}{3} N_d(z) V_{\text{rel}}, \quad (7)$$

де V_{rel} — середній релаксаційний об'єм, який спричинено утворенням Френкелевої пари. Величина цього об'єму складається з суми релаксаційного об'єму, який пов'язаний з міжвузловим атомом і може складати приблизно від одного до двох атомних об'ємів залежно від типу кристалічної структури, і релаксаційного об'єму, який пов'язаний з відповідною вакансією і величина якого коливається в межах від $-0,05$ до $-0,25$ атомного об'єму [39]. У відповідності до співвідношення (7), якщо для ГГГ покла-

сти типове для об'ємноцентрованих структур з кубічною ґратницею значення $V_{\text{rel}} \approx 1,0v_c/v_0$, де v_c і v_0 — відповідно об'єм елементарної комірки і кількість атомів у ній [39], то при дозі імплантації $1 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ (найменшій із застосованих) максимальне розрахункове значення відносної деформації буде складати 0,56%, тоді як дифракційною методом воно визначено рівним тільки 0,125% (рис. 10). Це протиріччя можна усунути, якщо врахувати часткову анігіляцію Френкелевих пар, відповідно зменшивши $N_d(z)$ у виразі (6).

Якщо означити долю анігільованих Френкелевих пар як p_a , то кількість тих пар, які залишилися, $1 - p_a$ можна знайти шляхом прирівнювання відповідно скоригованого максимального розрахункового значення відносної деформації та знайденого дифракційною методом при найменшій дозі імплантації (при якій вплив статичного фактора Дебая–Валлера мінімальний). А саме, слід покласти $1 - p_a = 0,125/0,56 \approx 0,22$, тобто, $p_a \approx 0,78$. Тоді, після перенормування цієї величини:

$$N_d^0(z) = (1 - p_a)N_d(z), \quad (8)$$

одержимо значення максимальної відносної деформації, які близькі до значень, знайдених дифракційною методом (див. табл.). Наявність невеликих розбіжностей між ними, які зростають зі збільшенням дози, можна пояснити неврахуванням статичного фактора Дебая–Валлера при аналізі дифракційних мірянень.

Ще одна відмінність між розрахунковими профілями відносної деформації та знайденими з допомогою дифракційної методи полягає в завищених значеннях деформації на останніх зі сторони поверхні у порівнянні з розрахунковою. Таку переоцінку найімо-

ТАБЛИЦЯ. Максимальні деформації в імплантованому шарі кристалу ГГГ за різних доз імплантації йонів F^+ з енергією 90 кеВ.

Доза $D \cdot 10^{-13}$, см^{-2}	1	2	4	6	10
$\varepsilon_{\perp}^{\text{max}}$ (%), розрахована згідно з результатами моделювання SRIM-2008	0,56	1,12	2,24	3,36	5,60
$\varepsilon_{\perp}^{\text{max}}$ (%), розрахована згідно з коригованими результатами моделювання SRIM-2008	0,125	0,25	0,48	0,72	1,20
$\varepsilon_{\perp}^{\text{max}}$ (%) згідно з дифракційними міряннями	0,125	0,25	0,48	0,72	0,56
$\varepsilon_{\perp}^{\text{max}}$ (%) згідно з дифракційними міряннями [40]	0,13	0,27	0,52	0,74	—

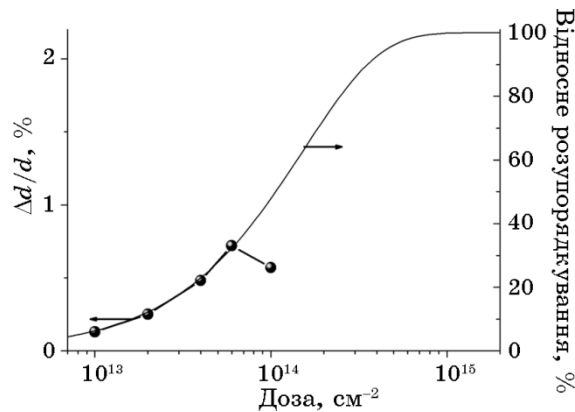


Рис. 11. Дозові залежності максимальної відносної деформації (маркери) та ступеня відносного розупорядкування $\omega(D)$ (суцільна лінія) для монокристалу ГГГ, імплантованого йонами F^+ ($E = 90$ кеВ).

вірніше спричинено неврахуванням впливу дифузного розсіяння від ростових дефектів, яке призводить до підйому хвостів КДВ.

Згідно дифракційних мірянь максимального значення відносна деформація в напрямі, перпендикулярному до поверхні плівки, набуває в інтервалі глибин 60–80 нм, тобто саме в тій ділянці, де згідно з результатами моделювання кількість зміщених йонів матриці є максимальною (рис. 4).

Релаксація напружень розпочинається при дозі опромінення $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, що відображається зменшенням максимальної величини відносної деформації (рис. 10). Помітно, що експериментально встановлена критична доза імплантації близька до тієї, що одержана чисельними методами (рис. 11) з корекцією, аналогічною співвідношенню (8).

Цікавим є співставлення дозових залежностей максимального значення відносної деформації та її інтегрального значення (площі під профілем деформації). Як видно (рис. 12), для інтервалу доз $1 \cdot 10^{13}$ – $6 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$ ріст обох параметрів відбувається за аналогічним лінійним законом. Очевидно, це є відображенням генерації при імплантації виключно пружних напружень. Збільшення з ростом дози напружень, генерованих в площині плівки, відбувається порівняно повільніше; початок релаксації ґратниці також фіксується при дозі $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Можна відзначити ріст з набором дози розбіжності в характері зміни максимального та інтегрального значення відносної деформації (рис. 12, б).

Для додаткової перевірки достовірності інформації про розподіл пружних напруг в приповерхневому шарі імплантованого монокристалу ГГГ, одержаної Рентгеновою дифрактометричною ме-

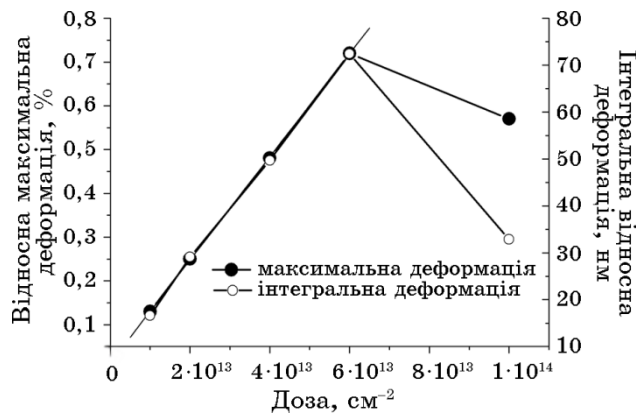


Рис. 12. Дозові залежності максимального та інтегрального значень відносної деформації в напрямку, перпендикулярному до поверхні монокристалу ГПГ, імплантованого йонами F⁺ (E = 90 кеВ).

тодою, було здійснено порівняння профілів відносної деформації, розрахованих за результатами аналізу КДВ, які були зафіксовані для двох симетричних відбивань (444) та (888) одного і того ж зразка (доза імплантації 1·10¹³ см⁻²).

Як видно з рис. 13, незначна відмінність (розкид $\cong 10\%$) спостерігаються тільки для товщини порушеного шару, в той час як форма профілю та максимальне значення деформації повністю збігаються. Знову ж таки найімовірнішою причиною цієї відмінності є неврахування впливу дифузного розсіяння від ростових

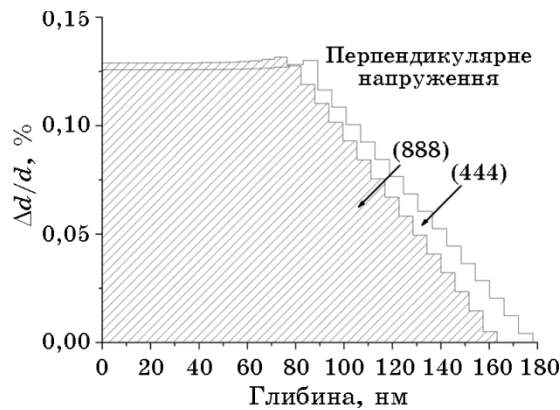


Рис. 13. Профілі розподілу пружних деформацій з глибиною в кристалі ГПГ, імплантованому йонами F⁺ (E = 90 кеВ, доза 1·10¹³ см⁻²) в напрямку, перпендикулярному до поверхні (розраховано із КДВ для рефлексів (444) та (888)).

дефектів, яке для рефлексу (888) призводить до сильнішого підйому хвостів КДВ у порівнянні з рефлексом (444).

5. РЕЗЮМЕ І ВИСНОВКИ

Шляхом математичного моделювання процесу імплантації за допомогою програми SRIM-2008 встановлено розподіли за глибиною кристалу пружних та непружних енергетичних втрат імпантованих йонів F^+ з енергією 90 кеВ та зміщених ними при гальмуванні йонів мішені в кристалі ГГГ. Визначено профілі розподілу за глибиною кількості імпантованих та зміщених йонів, а також характер пошкоджень та їх кількісні характеристики, зокрема, залежність максимального значення ступеня структурного розупорядкування монокристалу ГГГ від дози імплантації.

В діпазоні доз імплантації йонів F^+ з енергією 90 кеВ від $1 \cdot 10^{13}$ до $6 \cdot 10^{13}$ $см^{-2}$ відбувається лінійне зростання максимальної відносної деформації ґратниці та інтегрального значення відносної деформації в монокристалі ГГГ. Товщина пошкодженого шару не залежить від дози і складає приблизно 160 нм. Максимального значення відносна деформація в напрямку, перпендикулярному до поверхні півки, набуває в інтервалі глибин 60–80 нм, тобто в ділянці, де максимальним є число зміщених йонів матриці.

Структурні зміни, спричинені імплантацією йонів фтору в поверхневому шарі монокристалу ГГГ, було досліджено також методом Рентгенової дифракції. Встановлено форму профілю деформації в імпантованому шарі і зв'язок його характеристик з результатами моделювання. Шляхом порівняння значень відносної деформації, знайдених розрахунковим та дифракційним методами, визначено величину часткової анігіляції Френкелевих пар, яка складає приблизно 78%.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. O. A. Petrenko, C. Ritter, M. Yethiraj, and D. McK Paul, *Phys. Rev. Lett.*, **80**, No. 20: 4570 (1998).
2. Y.-N. Xu, W. Y. Ching, and B. K. Briceen, *Phys. Rev. B*, **61**, No. 3: 1817 (2000).
3. L. Lipińska, W. Ryba-Romanowski, A. Rzepka, S. Ganschow, R. Lisiecki, R. Diduszko, and A. Pajęczkowska, *Cryst. Res. Technol.*, **44**, No. 5: 477 (2009).
4. A. O. Matkovskii, D. Yu. Sugak, S. B. Ubizskii, U. A. Ulmanis, and A. P. Shakhov, *phys. status solidi (a)*, **128**, No. 1: 21 (1991).
5. Z. Jia, A. Arcangeli, X. Tao, J. Zhang, Ch. Dong, M. Jiang, L. Bonelli, and M. Tonelli, *J. Appl. Phys.*, **105**, No. 8: 083113 (2009).

6. A. Kamińska, S. Biernacki, S. Kobayakov, A. Suchocki, G. Boulon, M. O. Ramirez, and L. Bausa, *Phys. Rev. B*, **75**, No. 17: 174111 (2007).
7. F. J. Bruni, *Crystals: Growth, Properties and Applications* (Eds. C. J. M. Rooijman) (Berlin–Heidelberg–New York: Springer: 1978), vol. 1, p. 139.
8. S. B. Ubizskii, A. O. Matkovskii, N. Mironova-Ulmane, V. Skvortsova, A. Suchocki, Y. A. Zhydachevskii, and P. Potera, *phys. status solidi (a)*, **177**: 349 (2000).
9. P. Potera, *Comput. Methods Sci. Technol.*, **13**, No. 1: 47 (2007).
10. <http://www.srim.org/SRIM/SRIMLEGL.htm>.
11. X. Риссел, И. Руге, *Ионная имплантация* (Москва: Наука: 1983).
12. *Ионная имплантация и лучевая технология* (Ред. Дж. С. Вильямс, Дж. М. Поут) (Киев: Наукова думка: 1988).
13. А. М. Афанасьев, П. А. Александров, Р. М. Имамов, *Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев* (Москва: Наука: 1989).
14. V. Holy, U. Pietch, and T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers* (Berlin–Heidelberg: Springer Verlag: 1998).
15. A. O. Matkowski, D. Yu. Sugak, S. B. Ubizskii, and I. V. Kityk, *Opto-Electron. Rev.*, **3**, No. 2: 41 (1995).
16. J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids* (New York: Pergamon Press: 1995).
17. M. Nastasi, J. W. Mayer, and J. K. Hirvonen. *Ion–Solid Interactions: Fundamentals and Applications* (Cambridge: Cambridge University Press: 1996).
18. C. R. Fritzsche, *Appl. Phys.*, **12**, No. 4: 347 (1977).
19. Б. К. Остафійчук, В. А. Олейник, В. М. Пылыпив, Б. Т. Семен, Л. М. Смеркло, Б. И. Яворский, В. И. Кравец, И. В. Коваль, *Кристаллическая и магнитная структура имплантированных слоев монокристаллических пленок железо-иттриевого граната* (Киев: 1991) (Препр. / АН УССР. Ин-т металлофизики, № 1-91: 1991).
20. Б. К. Остафійчук, В. М. Ткачук, О. Н. Ворончак, Б. И. Яворский, *Металлофиз. новейшие технол.*, **16**, № 8: 51 (1994).
21. K. Komenc, J. Hirai, K. Asama, and M. Sakai, *J. Appl. Phys.*, **49**, No. 12: 5806 (1978).
22. В. М. Кошкин, Ю. Р. Забродский, *Физ. твёрдого тела*, **16**, № 11: 3480 (1974).
23. В. М. Кошкин, *Физ. низких температур*, **28**, № 8–9: 963 (2002).
24. K. Lal and H. K. Jhans, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **10**: 1315 (1977).
25. H. Donnerberg and C. R. A. Catlow, *Phys. Rev. Lett.*, **100**, No. 25: 257202 (2008).
26. H. Donnerberg and C. R. A. Catlow, *Phys. Rev. B*, **50**, No. 2: 744 (1994).
27. В. О. Коцюбинський, В. В. Немошкаленко, Б. К. Остафійчук, Я. П. Салій, В. Д. Федорів, П. І. Юрчишин, *Металлофиз. новейшие технол.*, **23**, № 11: 1455 (2001).
28. W. H. de Roode and H. A. Algra, *J. Appl. Phys.*, **53**: 2507 (1982).
29. В. М. Пилипів, В. О. Коцюбинський, О. О. Григоруk, *Матеріали XI Міжнародної конференції з фізики і технології тонких плівок та наносистем «МКФТТПН-XI» (7–12 травня 2007 р., Івано-Франківськ)* (Івано-Франківськ: ВДВ ЦІТ Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника: 2007), т. 1, с. 95.

30. Б. К. Остафійчук, В. Д. Федорів, В. В. Каспрук, В. М. Пилипів, *Фіз. і хімія тверд. тіла*, **5**, № 4: 722 (2004).
31. В. О. Коцюбинський, Б. К. Остафійчук, Б. І. Яворський, І. П. Яремій, *Вісник Прикарпатського університету. Математика. Фізика. Хімія*, **2**: 67 (1999).
32. J. P. Eumery, *Rev. Phys. Appl.*, No. **23**: 925 (1988).
33. Ш. Ш. Башкиров, Н. Г. Ивойлов, Е. С. Романов, *Физ. твёрдого тела*, **27**, № 9: 2853 (1985).
34. А. Маркялис, Л. Пранявичус, *Лит. физ. сб.*, **18**, № 5: 647 (1978).
35. S. I. Golubov, A. V. Barashev, and R. E. Stoller, *Comprehensive Nuclear Materials* (Eds. R. J. M. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. **1**.
36. M. Wormington, C. Panaccione, K. M. Matney, and D. K. Bowen, *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A*, **357**: 2827 (1999).
37. В. Г. Кон, М. В. Прилепский, И. М. Суходрева, *Поверхность*, № 11: 122 (1984).
38. В. М. Пилипів, С. Й. Оліховський, Т. П. Владімірова, О. С. Скакунова, В. Б. Молодкін, Б. К. Остафійчук, Є. М. Кисловський, О. В. Решетник, С. В. Лізунова, О. З. Гарпуль, *Металлофиз. новейшие технол.*, **33**, № 9: 1145 (2011).
39. P. Ehrhart, K. H. Robrock, and H. R. Shober, *Physics of Radiation Effects in Crystals* (Eds. R. A. Johnson and A. N. Orlov) (Oxford: Elsevier Science: 1986), p. 3.
40. О. С. Скакунова, В. М. Пилипів, С. Й. Оліховський, Т. П. Владімірова, Б. К. Остафійчук, В. Б. Молодкін, Є. М. Кисловський, О. В. Решетник, О. З. Гарпуль, А. В. Кравець, В. Л. Маківська, *Металлофиз. новейшие технол.*, **34**, № 10: 1325 (2012).

REFERENCES

1. O. A. Petrenko, C. Ritter, M. Yethiraj, and D. McK Paul, *Phys. Rev. Lett.*, **80**, No. 20: 4570 (1998).
2. Y.-N. Xu, W. Y. Ching, and B. K. Briceen, *Phys. Rev. B*, **61**, No. 3: 1817 (2000).
3. L. Lipińska, W. Ryba-Romanowski, A. Rzepka, S. Ganschow, R. Lisiecki, R. Diduszko, and A. Pajączkowska, *Cryst. Res. Technol.*, **44**, No. 5: 477 (2009).
4. A. O. Matkovskii, D. Yu. Sugak, S. B. Ubizskii, U. A. Ulmanis, and A. P. Shakhov, *phys. status solidi (a)*, **128**, No. 1: 21 (1991).
5. Z. Jia, A. Arcangeli, X. Tao, J. Zhang, Ch. Dong, M. Jiang, L. Bonelli, and M. Tonelli, *J. Appl. Phys.*, **105**, No. 8: 083113 (2009).
6. A. Kamińska, S. Biernacki, S. Kobayakov, A. Suchocki, G. Boulon, M. O. Ramirez, and L. Bausa, *Phys. Rev. B*, **75**, No. 17: 174111 (2007).
7. F. J. Bruni, *Crystals: Growth, Properties and Applications* (Eds. C. J. M. Rooijman) (Berlin–Heidelberg–New York: Springer: 1978), vol. **1**, p. 139.
8. S. B. Ubizskii, A. O. Matkovskii, N. Mironova-Ulmane, V. Skvortsova, A. Suchocki, Y. A. Zhydachevskii, and P. Potera, *phys. status solidi (a)*, **177**: 349 (2000).
9. P. Potera, *Comput. Methods Sci. Technol.*, **13**, No. 1: 47 (2007).

10. <http://www.srim.org/SRIM/SRIMLEGL.htm>.
11. H. Rissel and I. Ruge, *Ionnaya Implantatsiya* [Ion Implantation] (Moscow: Nauka: 1983) (Russian translation).
12. *Ionnaya Implantatsiya i Luchevaya Tekhnologiya* [Ion Implantation and Radiation Technology] (Eds. J. S. Williams and J. M. Poate) (Kiev: Naukova dumka: 1988) (Russian translation).
13. A. M. Afanasiev, P. A. Aleksandrov, and R. M. Imamov, *Rentgenodiffraktsionnaya Diagnostika Submikronnykh Sloyov* [X-Ray Diffraction Diagnostics of Submicron Layers] (Moscow: Nauka: 1989) (in Russian).
14. V. Holy, U. Pietch, and T. Baumbach, *High-Resolution X-Ray Scattering from Thin Films and Multilayers* (Berlin–Heidelberg: Springer Verlag: 1998).
15. A. O. Matkowski, D. Yu. Sugak, S. B. Ubizskii, and I. V. Kityk, *Opto-Electron. Rev.*, **3**, No. 2: 41 (1995).
16. J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids* (New York: Pergamon Press: 1995).
17. M. Nastasi, J. W. Mayer, and J. K. Hirvonen, *Ion–Solid Interactions: Fundamentals and Applications* (Cambridge: Cambridge University Press: 1996).
18. C. R. Fritzsche, *Appl. Phys.*, **12**, No. 4: 347 (1977).
19. B. K. Ostafiychuk, V. A. Oleynik, V. M. Pylypiv, B. T. Semen, L. M. Smerklo, B. I. Yavorskiy, V. I. Kravets, and I. V. Koval', *Krystallicheskaya i Magnitnaya Struktura Implantirovannykh Sloyov Monokrystallicheskikh Plyonok Zhelezo-Ittrivogo Granata* [The Crystal and Magnetic Structure of the Implanted Layers of Single-Crystalline Films of Ferrum–Yttrium Garnet] (Kiev: 1991) (Prepr. / AN UkrSSR. In-t Metallofiziki, Nos. 1-91: 1991) (in Russian).
20. B. K. Ostafiychuk, V. M. Tkachuk, O. N. Voronchak, and B. I. Yavorskiy, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **16**, No. 8: 51 (1994) (in Russian).
21. K. Komenou, J. Hirai, K. Asama, and M. Sakai, *J. Appl. Phys.*, **49**, No. 12: 5806 (1978).
22. V. M. Koshkin and Yu. R. Zabrodskiy, *Fiz. Tverdogo Tela*, **16**, No. 11: 3480 (1974) (in Russian).
23. V. M. Koshkin, *Fiz. Nizkikh Temperatur*, **28**, Nos. 8–9: 963 (2002) (in Russian).
24. K. Lal and H. K. Jhans, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **10**: 1315 (1977).
25. H. Donnerberg and C. R. A. Catlow, *Phys. Rev. Lett.*, **100**, No. 25: 257202 (2008).
26. H. Donnerberg and C. R. A. Catlow, *Phys. Rev. B*, **50**, No. 2: 744 (1994).
27. V. O. Kotsyubyns'kyi, V. V. Nemoshkalenko, B. K. Ostafiychuk, Ya. P. Saliy, V. D. Fedoriv, and P. I. Yurchishin, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **23**, No. 11: 1455 (2001) (in Ukrainian).
28. W. H. de Roode and H. A. Algra, *J. Appl. Phys.*, **53**: 2507 (1982).
29. V. M. Pylypiv, V. O. Kotsyubyns'kyi, and O. O. Hryhoruk, *Materials of XI International Conference 'Physics and Technology of Thin Films and Nano-systems'* (May 7–12, 2007, Ivano-Frankivsk) (Ivano-Frankivsk: Published-Design Centre of Vasyl Stefanyk Pre-Carpathian National University: 2007), vol. **1**, p. 95 (in Ukrainian).

30. B. K. Ostafiychuk, V. D. Fedoriv, V. V. Kaspruk, and V. M. Pylypiv, *Fizika i Khimiya Tverdogo Tila*, **5**, No. 4: 722 (2004) (in Ukrainian).
31. V. O. Kotsyubyns'kyy, B. K. Ostafiychuk, B. I. Yavors'kyy, and I. P. Yaremiy, *Bulletin of Pre-Carpathian University. Mathematics. Physics. Chemistry*, **2**: 67 (1999) (in Ukrainian).
32. J. P. Eymery, *Rev. Phys. Appl.*, No. 23: 925 (1988).
33. Sh. Sh. Bashkirov, N. G. Ivojllov, and E. S. Romanov, *Fiz. Tverdogo Tela*, **27**, No. 9: 2853 (1985) (in Russian).
34. A. Markyalis and L. Pranyavichus, *Lit. Fiz. Sb.*, **18**, No. 5: 647 (1978) (in Russian).
35. S. I. Golubov, A. V. Barashev, and R. E. Stoller, *Comprehensive Nuclear Materials* (Eds. R. J. M. Konings) (Amsterdam: Elsevier: 2012), vol. **1**.
36. M. Wormington, C. Panaccione, K. M. Matney, and D. K. Bowen, *Philos. Trans. R. Soc. Lond. A*, **357**: 2827 (1999).
37. V. G. Kon, M. V. Prilepskiy, and I. M. Sukhodreva, *Poverkhnost'*, No. 11: 122 (1984) (in Russian).
38. V. M. Pylypiv, S. Y. Olikhovs'kyy, T. P. Vladimirova, O. S. Skakunova, V. B. Molodkin, B. K. Ostafiychuk, E. M. Kyslovs'kyy, O. V. Reshetnyk, S. V. Lizunova, and O. Z. Harpul', *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **33**, No. 9: 1145 (2011) (in Ukrainian).
39. P. Ehrhart, K. H. Robrock, and H. R. Shober, *Physics of Radiation Effects in Crystals* (Eds. R. A. Johnson and A. N. Orlov) (Oxford: Elsevier Science: 1986), p. 3.
40. O. S. Skakunova, V. M. Pylypiv, S. Y. Olikhovs'kyy, T. P. Vladimirova, B. K. Ostafiychuk, V. B. Molodkin, E. M. Kyslovs'kiy, O. V. Reshetnyk, O. Z. Harpul', A. V. Kravets', and V. L. Makivs'ka, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **34**, No. 10: 1325 (2012) (in Ukrainian).