08,05

Структура и электронный транспорт в тонких пленках иридата стронция под влиянием эпитаксиальных напряжений, вызванных рассогласованием с подложкой

© Н.В. Дубицкий[1,2], В.А. Байдикова[1,3], А.М. Петржик[1], И.Е. Москаль[1], А.В. Шадрин[1,4], В.А. Шмаков[1], Г.А. Овсянников[1]

[1] Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,
Москва, Россия
[2] Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Физический факультет,
Москва, Россия
[3] МИРЭА — Российский технологический университет,
Москва, Россия
[4] Московский физико-технический институт,
Долгопрудный, Московская область, Россия

E-mail: nikita.dubitskiy@gmail.com

Поступила в Редакцию 6 марта 2025 г.
В окончательной редакции 6 марта 2025 г.
Принята к публикации 5 мая 2025 г.

Эпитаксиальные тонкие пленки иридата стронция ($SrIrO_3$) получены методом высокочастотного магнетронного распыления на следующих монокристаллических подложках: (110)$NdGaO_3$, (001)$SrTiO_3$, (001)$(LaAlO_3)_{0.3}(Sr_2TaAlO_6)_{0.7}$ (LSAT) и (110)$Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$-$PbTiO_3$ (PMN-PT). С помощью рентгеновской дифракции изучены структурные особенности и влияние релаксации напряжений в тонких пленках, вызванных различием параметров элементарных ячеек решетки пленки и подложки. На основе анализа дифракционных данных установлено, что в пленках наблюдается изменение объема элементарной ячейки пленки по сравнению с объемом $SrIrO_3$ кристалла.

Электронные транспортные параметры тонких $SrIrO_3$ пленок показывают существенную зависимость от типа используемой подложки и параметров напыления. Анализ температурной зависимости сопротивления выявил влияние рассеяния магнитных примесей, вызванных кислородными вакансиями, на электронный транспорт пленок. Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии определена величина спин-орбитального расщепления для Ir $4f$ состояний, которая варьируется от 2.99 eV для $SrIrO_3$ пленки, напыленной на (001)$SrTiO_3$, до 3.10 eV для пленки на (110)PMN-PT, что связано с концентрацией кислородных вакансий, совершенством структуры и стехиометрией.

Ключевые слова: тонкие $SrIrO_3$ пленки, эпитаксиальный рост, рассогласование решеток, кислородные вакансии, электронный транспорт.

DOI: 10.61011/FTT.2025.06.60964.4HH-25

1. Введение

Перовскитные оксиды переходных металлов с 5d электронами привлекают значительное внимание исследователей благодаря сильному спин-орбитальному взаимодействию, которое приводит к формированию уникальных электронных состояний [1,2]. Особый интерес представляет иридат стронция $SrIrO_3$, который при комнатной температуре и нормальном давлении кристаллизуется в моноклинную структуру с параметрами $a = 0.5604$ nm, $b = 0.9618$ nm, $c = 1.417$ nm (угол $\beta = 93.26°$) [3]. При повышенной температуре 1000 °C и давлении 60 kbar, с последующим быстрым охлаждением, получают объемную орторомбическую фазу с параметрами $a = 0.5597$ nm, $b = 0.5581$ nm, $c = 0.7752$ nm. При росте тонких пленок методом лазерной абляции на монокристаллических подложках в условиях повышенной температуры возникают эпитаксиальные напряжения, обусловленные несоответствием параметров кристаллических решеток пленки и подложки. При согласованной подложке удается получить тонкие пленки с моноклинной структурой, незначительно отклоняющейся от орторомбической, с параметрами $a = 0.56120$ nm, $b = 0.55865$ nm, $c = 0.7934$ nm (угол $\gamma = 90.367°$) [4], которая в дальнейшем анализируется с учетом слабого отклонения от кубической и может быть представлена в псевдокубическом приближении с параметром решетки $a_c \approx \sqrt{\frac{a^2+b^2}{4}} \approx c/2 = 0.396$ nm [5].

Сильное спин-орбитальное взаимодействие в сочетании с кристаллическим полем приводит к расщеплению t_{2g} подуровней 5d электронов иридия на состояния с $J_{eff} = 3/2$ и $J_{eff} = 1/2$ [6]. Изменение кристаллической структуры $SrIrO_3$ пленки может приводить к смещению уровня Ферми относительно полосы $J_{eff} = 1/2$ [7,8], что существенно влияет на электронные свойства материала.

При формировании тонких $SrIrO_3$ пленок ключевую роль играют эпитаксиальные напряжения, возникающие вследствие рассогласования параметров кристаллической решетки пленки и подложки [9,10]. Для орторомбической фазы объемного кристалла $SrIrO_3$ стехиометрического состава в псевдокубическом представлении с размером $a_c \approx 0.396$ nm получаем объем элементарной ячейки $V_{\text{crystal}} = 62.1 \cdot 10^{-3}$ nm^3. Рассогласование решеток приводит к деформации кристаллической структуры тонких пленок, что вызывает изменение межатомных расстояний и углов связей Ir-O-Ir [11]. Степень несоответствия параметров между пленкой и подложкой может приводить как к сжатию, так и к расширению эффективного объема элементарной ячейки относительно объема идеального монокристалла, что существенно влияет на электронные транспортные свойства материала [12].

Особую роль в формировании свойств пленок играют кислородные вакансии, концентрация которых зависит от степени рассогласования параметров решетки пленки и подложки [13]. Критическими параметрами при получении эпитаксиальных пленок являются состав кислородной смеси при напылениии и режимы охлаждения после распыления, что позволяет изменять величину кислородных вакансий.

Исследование влияния эпитаксиальных напряжений на свойства тонких пленок $SrIrO_3$ представляет особый интерес при использовании широкого спектра подложек с различными параметрами решетки. В частности, применение сегнетоэлектрической подложки $Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$-$PbTiO_3$ открывает дополнительные возможности для контроля напряженности пленок [14].

2. Методика напыления $SrIrO_3$ пленок

Тонкие $SrIrO_3$ пленки были получены методом магнетронного распыления на переменном токе [15,16]. Предварительная откачка проводилась до давления $2 \cdot 10^{-5}$ mbar. Для роста $SrIrO_3$ пленок использовались монокристаллические подложки, схожие по параметрам решетки с монокристаллической фазой $SrIrO_3$: (110)$NdGaO_3$ (NGO), (001)$SrTiO_3$ (STO), (001)$(LaAlO_3)_{0.3}(Sr_2TaAlO_6)_{0.7}$ (LSAT) и (110)$Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$-$PbTiO_3$ (PMN-PT). В качестве мишени использовался спрессованный порошок, смешанный в пропорции $SrIrO_3$ и отожженный при температуре 1000 °C. Проведенный рентгенофазовый анализ подтвердил однофазность полученных мишеней. Для роста $SrIrO_3$ пленок подложки NGO, STO и LSAT разогревались до температуры 770 °C, а PMN-PT до 750 °C, для более эффективного и равномерного нагрева подложки крепились к нагревателю при помощи серебряной пасты, что позволило обеспечить эпитаксиальный рост тонких $SrIrO_3$ пленок.

Напыление $SrIrO_3$ пленок происходило при давлении 0.25 mbar, при таком давлении полученные пленки имели параметры решетки наиболее близкие к литературным данным по монокристаллам и тонким пленкам. Кроме того, указанные пленки демонстрировали характерную металлическую зависимость сопротивления от температуры [17], причем изменение давления приводило к существенному увеличению сопротивления пленки. Рабочее давление в камере состояло из смеси Ar и O_2 в пропорции 10/35, при котором происходит рост $SrIrO_3$ пленки без образования кристаллов Sr_2IrO_4 или $Sr_3Ir_2O_7$ [18,19].

Отжиг полученных образцов проходил в два этапа. Во время первого этапа сразу после напыления полученные пленки охлаждались до 500 °C и полчаса отжигались в атмосфере кислорода. Второй этап заключался в медленном охлаждении пленок до комнатной температуры в атмосфере кислорода, скорость охлаждения составляла 10 градусов в минуту. При мощности в 50 W и давлении 0.25 mbar скорость роста составила около 10 nm/h, что позволяло получать пленки толщиной 30 nm за 3 часа напыления.

3. Структура $SrIrO_3$ пленок

Структурные свойства $SrIrO_3$ пленок исследовались методом рентгеновской дифракции с использованием дифрактометра Rigaku SmartLab с вращающимся медным анодом. Измерения проводились в геометрии параллельного пучка с монохроматором Ge(220) $\times$ 2 на длине волны рентгеновского излучения Cu$K_{\alpha 1}$ ($\lambda = 1.54056$ Å). Эпитаксиальный рост $SrIrO_3$ пленки подтверждался результатами просвечивающей микроскопии (TEM) [20]. Например, для $SrIrO_3$ пленки, напыленной на (001)$SrTiO_3$ подложку, мы имеем следующее эпитаксиальное соотношение (001)$SrIrO_3$//(001)$SrTiO_3$, [100]$SrIrO_3$//[100]$SrTiO_3$, т. е. рост осуществляется типа куб на куб. Более сложный тип роста происходит при напылении $SrIrO_3$ пленки на (110)$NdGaO_3$ или (110)PMN-PT подложки.

Анализ рентгеновских дифрактограмм (рис. 1) показывает зависимость межплоскостного расстояния пленок от кристаллических параметров подложки. Наблюдаются интенсивные и четкие рефлексы $(00k)$ $(k = 1, 2, 3, 4)$ для (001)$SrTiO_3$, (001)LSAT и (110)$NdGaO_3$ подложек (рис. 1), в тоже время для пленки, осажденной на подложке (110)PMN-PT, наблюдались рефлексы $(nm0)$$SrIrO_3$ (рис. 2).

Анализ параметров решетки эпитаксиальных $SrIrO_3$ пленок выявил их существенную зависимость от используемой подложки (табл. 1). Пленки на (001)$SrTiO_3$, (001)LSAT и (110)$NdGaO_3$ подложках демонстрируют сжатие (параметр $m = c/a - 1 = 3.2{-}4.5\%$), что сопровождается увеличением межплоскостного расстояния элементарной ячейки пленок c до 0.402–0.404 nm [21] при одновременном уменьшении параметра a, определяемого подложкой до 0.387–0.391 nm. Особый интерес представляет $SrIrO_3$ пленка на подложке $SrTiO_3$ [22], которая, несмотря на значительное рассогласование параметров решетки ($m = 3.2\%$), демонстрирует объем псевдокубической ячейки $V_{eff} = 61.5 \cdot 10^{-3}$ nm^3, что

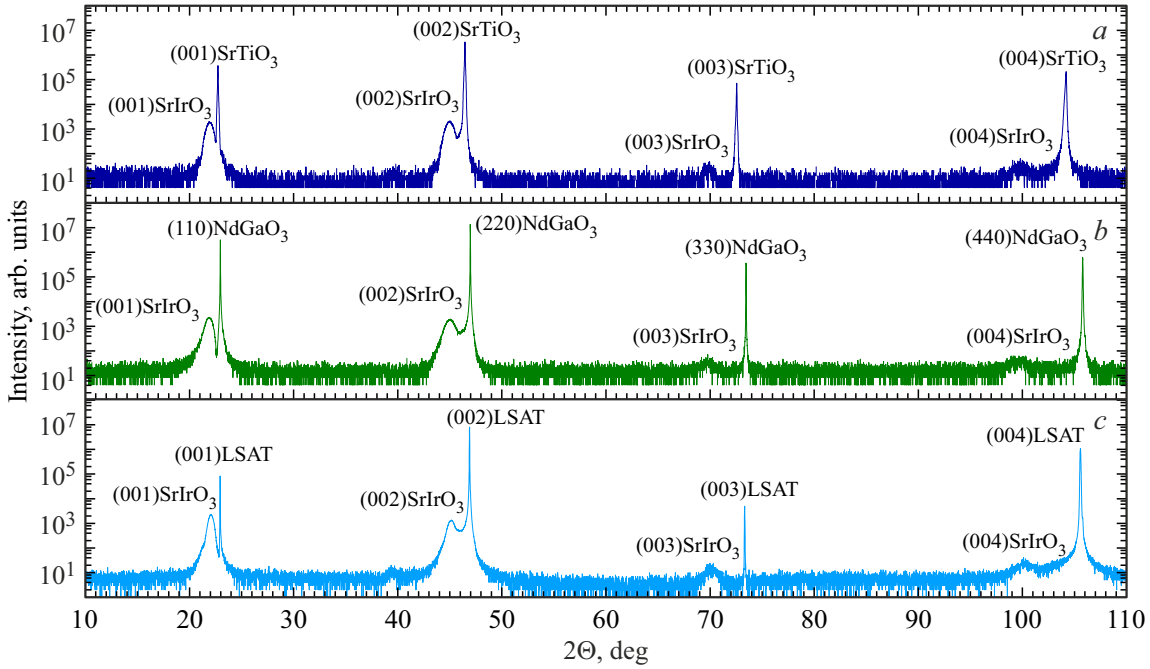

Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы брэгговского отражения эпитаксиальных тонких $SrIrO_3$ пленок, выращенных на подложках: (*a*) — (001)$SrTiO_3$, (*b*) — (110)$NdGaO_3$, (*c*) — (001)$(LaAlO_3)_{0.3}(Sr_2TaAlO_6)_{0.7}$.

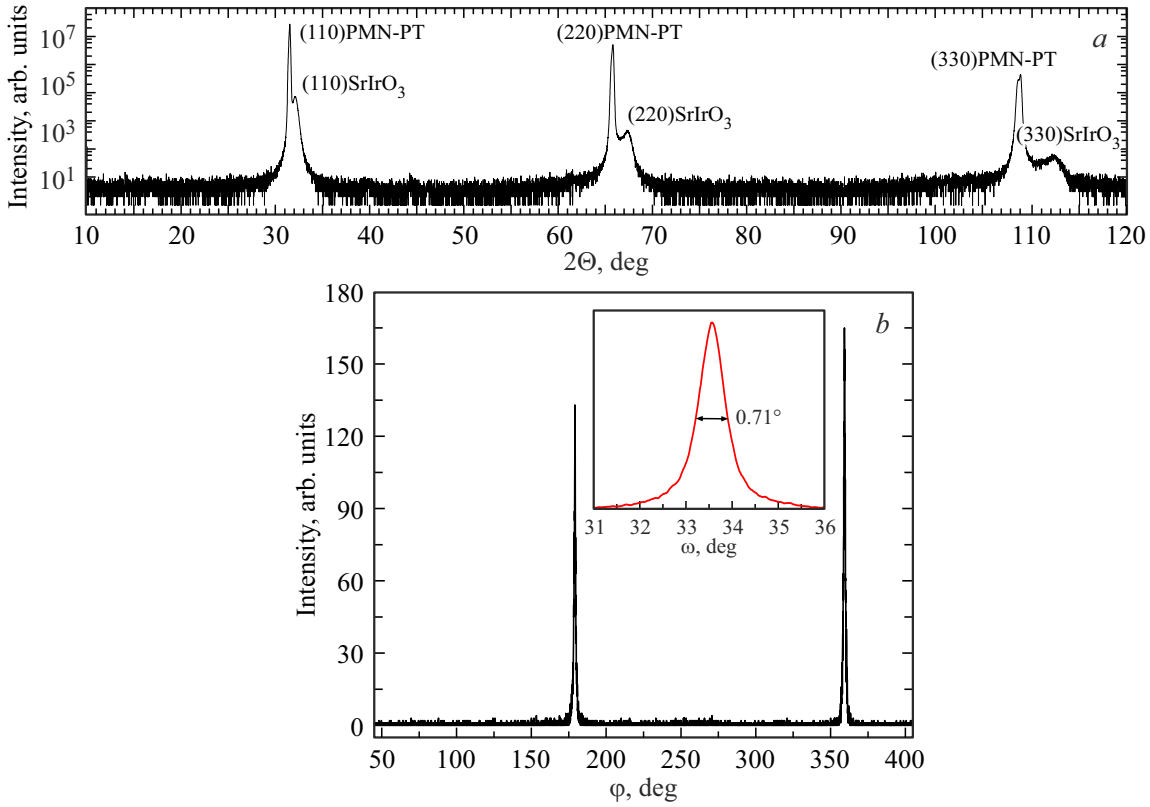

Рис. 2. (*a*) Рентгеновская дифрактограмма брэгговского отражения эпитаксиальной тонкой $SrIrO_3$ пленки, выращенной на PMN-PT подложке. (*b*) φ-скан $SrIrO_3$ пленки, на вставке представлена кривая качания (ω-скан) рефлекса (220)$SrIrO_3$. Ширина кривой качания на полувысоте (FWHM) равна 0.71°.

Таблица 1. Структурные параметры эпитаксиальных тонких $SrIrO_3$ пленок, выращенных на 4-х подложках, межплоскостные расстояния пленок (c_f) и подложек (a_S), степень рассогласования решеток пленка-подложка (m), эффективный объем псевдокубической ячейки пленки (V_{eff}), сравниваемый с объемом псевдокубической ячейки орторомбической фазы кристалла $SrIrO_3$ ($V_{crystal} = 62.1 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{nm}^3$).

Образец	c_f, nm	a_S, nm	V_{eff}, 10^{-3} nm^3	m, %
Объемный $SrIrO_3$	0.396	0.396	62.1	–
$SrIrO_3/SrTiO_3$	0.403 ± 0.002	0.390	61.5	3.2
$SrIrO_3/NdGaO_3$	0.404 ± 0.001	0.386	60.4	4.5
$SrIrO_3$/LSAT	0.402 ± 0.001	0.387	60.2	3.9
$SrIrO_3$/PMN-PT	0.394 ± 0.001	0.402	63.5	−1.9

наиболее близко к объему ячейки орторомбической фазы кристалла $SrIrO_3$ ($V_{crystal} = 62.1 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{nm}^3$).

Для пленки на PMN-PT (рис. 2, a) наблюдается растяжение в плоскости подложки ($m = -1.9\%$) с параметром подложки $a = 0.402$ nm, что приводит к увеличению эффективного объема псевдокубической элементарной ячейки V_{eff} до $63.5 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{nm}^3$ по сравнению с значением $V_{crystal}$ [23].

Перед каждой съемкой симметричных $2\Theta/\omega$ сканов, кривых качания и φ-сканов производилась обязательная юстировка положения образца, включающая Z-скан (положение по высоте), R_x-скан (качание столика с образцом вдоль направления источник-детектор) и R_y-скан (качание столика с образцом перпендикулярно пучку). Юстировка проводилась по наиболее интенсивному пику подложки (200) или (220).

Для определения упорядочения в плоскости подложки был проведен φ-скан для (110)$SrIrO_3$ пленки, выращенной на (110)PMN-PT подложке (рис. 2, b), при этом угол χ был предварительно выставлен на 45° (считая, что $\chi = 0°$ — положение столика в плоскости пола). Наблюдаемые четкие рефлексы при значениях $\varphi \approx 180°$ и $\varphi \approx 360°$ (с угловым разделением в 180°) и полушириной пиков $1.1 \pm 0.1°$ указывают на формирование эпитаксиальной пленки с единственным вариантом ориентации в плоскости подложки. Согласно проекции карты обратного пространства для направления (011) в кубическом кристалле, плоскости (100) и (010) должны наблюдаться под углом $\chi = 45°$, а плоскости (001) и $(00\bar{1})$ под углом $\chi = 90°$. Таким образом, наличие только двух рефлексов при φ-сканировании на угле $\chi = 45°$ подтверждает единственный вариант ориентации $SrIrO_3$ в плоскости подложки.

Анализ кривой качания (ω-скан) отражения (220)$SrIrO_3$ показал четко выраженный дифракционный пик с полушириной (FWHM) 0.71° (вставка к рис. 2, b), что свидетельствует о высокой степени текстурирования выращенной пленки в направлении нормали к поверхности, несмотря на значительное рассогласование параметров решетки между $SrIrO_3$ и подложкой PMN-PT.

Для определения влияния условий роста на структурные параметры пленок, выращенных на подложке $SrTiO_3$, исследовались зависимости кристаллических параметров от давления смеси Ar/O_2 при соотношении 10/35. Рентгеноструктурный анализ $SrIrO_3$ пленок (рис. 3) показывает формирование однофазных эпитаксиальных $SrIrO_3$ пленок с характерными рефлексами (00l) для всех трех образцов. При этом наблюдаются слабые пики металлического иридия, интенсивность которых варьируется в зависимости от условий роста. $SrIrO_3$ пленка, полученная при давлении 0.25 mbar (рис. 3, a), демонстрирует параметр $c = 0.403$ nm и эффективный объем элементарной ячейки $V_{eff} = 61.45 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{nm}^3$. Увеличение давления до 0.5 mbar (рис. 3, b) приводит к росту параметра c до 0.407 nm при одновременном уменьшении объема ячейки до $61.15 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{nm}^3$. Дальнейшее повышение давления до 0.75 mbar (рис. 3, c) сопровождается небольшим уменьшением параметра c до 0.405 nm и увеличением эффективного объема ячейки до $61.76 \cdot 10^{-3}\,\mathrm{nm}^3$.

Зависимость параметра c от общего давления газовой смеси имеет немонотонный характер с максимумом для $SrIrO_3$ пленок при $P_{Ar/O_2} = 0.5$ mbar. Параметр рассогласования m демонстрирует монотонное увеличение с ростом давления от 3.2% при $P_{Ar/O_2} = 0.25$ mbar до 3.7% при $P_{Ar/O_2} = 0.75$ mbar.

4. Атомно-силовая микроскопия $SrIrO_3$ пленок

Для исследования морфологии поверхности тонких $SrIrO_3$ пленок, выращенных на различных подложках, был использован метод атомно-силовой микроскопии (АСМ). Изображения поверхности образцов были получены в полуконтактном режиме на сканирующем зондовом микроскопе Solver PRO M (НТ МДТ). Данный микроскоп обеспечивает разрешение до 1 nm и позволяет исследовать образцы размером до $12 \times 12 \times 2$ mm, разрешение позиционирования 5 μm.

На рис. 5, a представлено АСМ-изображение $SrIrO_3$ пленки, выращенной на подложке $SrTiO_3$. Топографический скан размером $5 \times 5\,\mu\mathrm{m}^2$ демонстрирует зернистую структуру с квазирегулярным распределением особенностей рельефа. Профиль высоты вдоль отмеченной

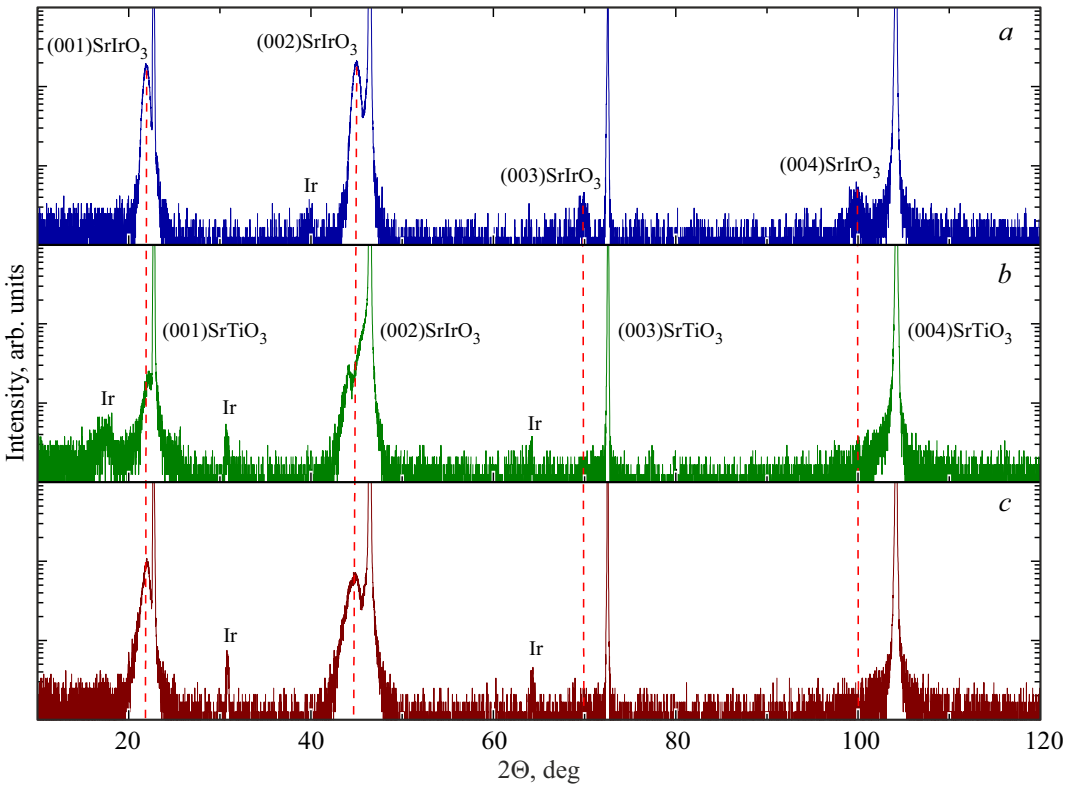

Рис. 3. Рентгеновские дифрактограммы тонких $SrIrO_3$ пленок, выращенных на $SrTiO_3$ подложках, при соотношении газов аргона/кислорода 10/35 и давлении смеси: (*a*) $P_{Ar/O_2} = 0.25$ mbar, (*b*) 0.5 mbar, (*c*) 0.75 mbar.

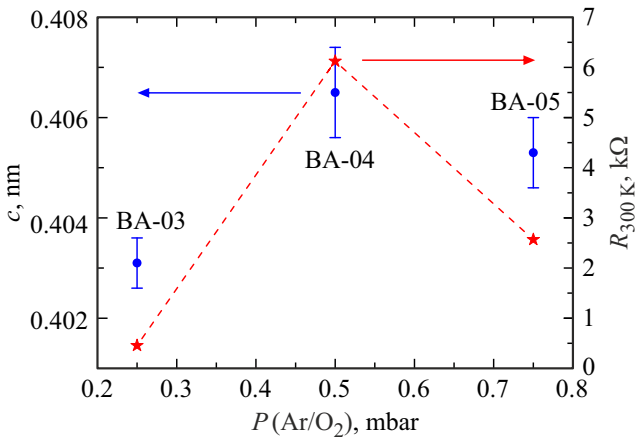

Рис. 4. Зависимость параметра элементарной кристаллической ячейки (заполненные круги) от давления газовой смеси P_{Ar/O_2} (соотношение газов $Ar/O_2 = 10/35$) для исследуемых эпитаксиальных тонких $SrIrO_3$ пленок, выращенных на $SrTiO_3$ подложках: 0.25 mbar (BA-03), 0.5 mbar (BA-04), 0.75 mbar (BA-05). Звездами обозначены точки, соответствующие сопротивлению данных образцов при 300 K.

на изображении линии (рис. 5, *b*) показывает типичные вариации в нанометровом диапазоне, достигающие максимального размаха (peak-to-peak) в 15.93 nm. Среднеквадратичная шероховатость данной $SrIrO_3$ пленки составляет $RMS = 1.44$ nm.

Дополнительные статистические параметры, полученные при анализе распределения высот, свидетельствуют о высоком качестве $SrIrO_3$ пленки на подложке $SrTiO_3$ [24]. Коэффициент асимметрии (Skewness), близкий к нулю (0.001), указывает на симметричное распределение высот относительно средней плоскости поверхности. Значение коэффициента эксцесса (Kurtosis) составляет 3.18, что соответствует близкому к нормальному гауссовому распределению высот и характерно для равномерно сформированных эпитаксиальных слоев.

Аналогичные исследования были проведены для образцов, выращенных на подложках NGO, LSAT и PMN-PT. Пленка на подложке NGO показала схожую с $SrTiO_3$ среднеквадратичную шероховатость ($RMS = 1.44$ nm), но при этом больший размах высот (25.58 nm) и более высокий коэффициент эксцесса (4.98), что указывает на наличие более выраженных локальных особенностей рельефа.

$SrIrO_3$ пленка, выращенная на LSAT подложке, продемонстрировала наименьшую среднеквадратичную шероховатость среди всех образцов (0.31 nm), однако анализ статистических параметров выявил аномально высокие значения коэффициентов асимметрии (11.00) и эксцесса (495.22). Такие показатели свидетельствуют о наличии отдельных высоких выступов на преимущественно гладкой поверхности, что может быть связано с дефектами подложки или особенностями процесса роста [25].

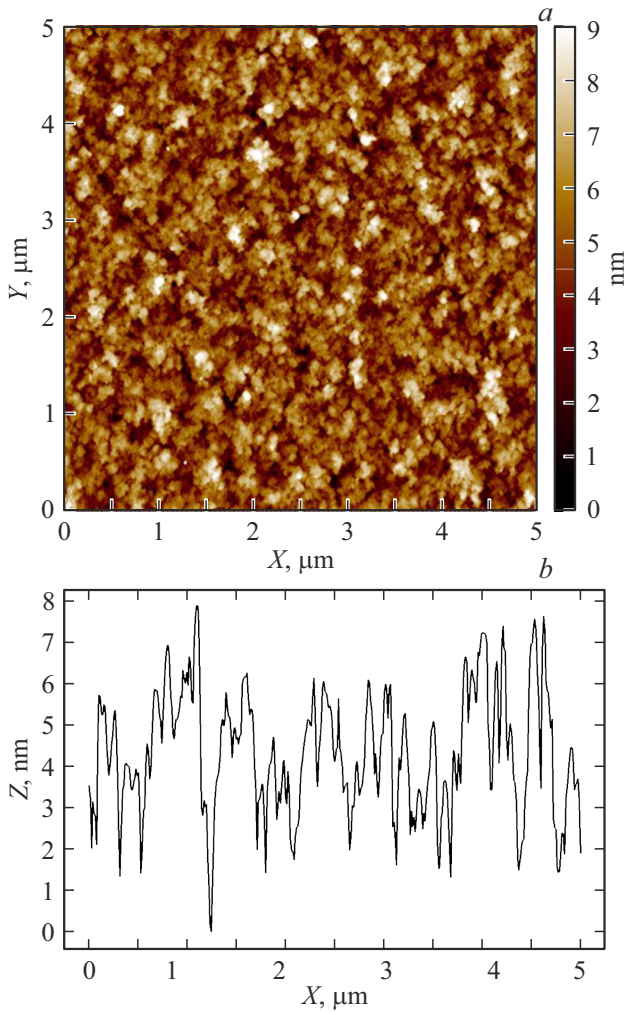

Рис. 5. (*a*) АСМ-изображение поверхности эпитаксиальной $SrIrO_3$ пленки, выращенной на $SrTiO_3$ подложке. Размер области сканирования $5 \times 5\,\mu m^2$. (*b*) График профиля высоты вдоль горизонтали $Y = 1\,\mu m$ на АСМ-изображении.

$SrIrO_3$ пленка на PMN-PT подложке характеризуется наиболее высокой шероховатостью ($RMS = 6.11$ nm) и максимальным размахом высот (47.01 nm) среди исследованных систем. Небольшое отрицательное значение коэффициента асимметрии (-0.22) указывает на незначительное преобладание впадин над выступами в структуре поверхности.

Проведенные исследования показывают, что морфологические характеристики пленок $SrIrO_3$ существенно зависят от выбранной подложки. Образцы на подложках $SrTiO_3$ и $NdGaO_3$ демонстрируют сопоставимые значения шероховатости, однако пленка на $SrTiO_3$ характеризуется более однородным распределением особенностей рельефа и, следовательно, более высоким структурным совершенством. Образец на LSAT, несмотря на наименьшую шероховатость, имеет статистически неоднородную поверхность с отдельными выступающими дефектами. Пленка на PMN-PT обладает наиболее развитым рельефом поверхности, что может быть обусловлено структурным несоответствием между подложкой и растущим слоем.

На основании анализа морфологии поверхности методом АСМ можно заключить, что подложка $SrTiO_3$ обеспечивает оптимальные условия для роста высококачественных эпитаксиальных $SrIrO_3$ пленок с равномерной морфологией поверхности.

5. Электротранспортные характеристики

Электротранспортные измерения $SrIrO_3$ пленок были проведены четырехзондовым методом по схеме Монтгомери в диапазоне температур 77–300 K [26]. Для всех образцов использовалась идентичная квадратная геометрия с одинаковыми размерами и расположением контактов, что обеспечивает корректное сравнение без дополнительных геометрических поправок. На рис. 6 представлены температурные зависимости квадрата сопротивления квадрата пленки для трех значений давления смеси при $P_{Ar/O_2} = 0.25$, 0.5 и 0.75 mbar.

$SrIrO_3$ пленка (BA-03, 0.25 mbar) демонстрирует монотонное уменьшение сопротивления от 0.45 kΩ при 300 K до 0.39 kΩ при 77 K. Для $SrIrO_3$ пленки (BA-04, 0.5 mbar) сопротивление увеличивается с уменьшением температуры от 6.0 kΩ при 300 K до 9.5 kΩ при 77 K [27]. $SrIrO_3$ пленка (BA-05, 0.75 mbar) показывает увеличение сопротивления от 2.5 kΩ при 300 K до 3.0 kΩ при 77 K. Наблюдаемое различие в характере проводимости и абсолютных значениях сопротивления связано с изменением кислородных вакансий в $SrIrO_3$ пленках [28].

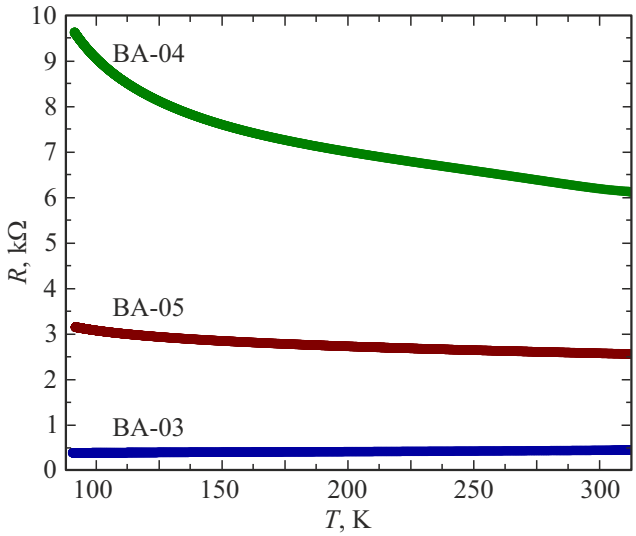

Рис. 6. Температурная зависимость квадрата сопротивления $SrIrO_3$ пленок, полученных на $SrTiO_3$ подложках при разном давлении газовой смеси P_{Ar/O_2} (соотношение газов $Ar/O_2 = 10/35$): 0.25 mbar (BA-03), 0.5 mbar (BA-04), 0.75 mbar (BA-05).

Таблица 2. Электрофизические параметры эпитаксиальных тонких $SrIrO_3$ пленок, выращенных на подложках: $SrTiO_3$, $NdGaO_3$, LSAT и PMN-PT.

Образец	T_K, K	R_K, Ω	R_0, Ω	R_1, Ω	T_M, K
$SrIrO_3/SrTiO_3$	9.6	1268	5965	0.3	1.04
$SrIrO_3/NdGaO_3$	253	2225	6258	0.6	1.62
$SrIrO_3$/LSAT	556	10.6	2.5	0.05	13.68
$SrIrO_3$/PMN-PT	459	3.7	1.9	0.005	5.79

Температурные зависимости квадрата сопротивления эпитаксиальных тонких $SrIrO_3$ пленок на 4-х подложках, нормированные на значение при комнатной температуре, представлены на рис. 7. Вид кривых $R(T)$ существенно зависит от типа используемой подложки [29,30]. Все пленки демонстрируют металлический тип проводимости ($dR/dT > 0$) при высоких температурах в диапазоне 300−200 K с переходом к росту сопротивления ($dR/dT < 0$) при понижении температуры.

Экспериментальные зависимости сопротивления $SrIrO_3$ пленок от температуры $R(T)$ были проанализированы в рамках следующей модели [31]:

$$R(T) = R_0 + R_1\left(\frac{T}{T_M}\right)^B + R_K\left(\frac{T_K^*}{T^2 + T_K^*}\right)^S, \qquad (1)$$

где R_0 — сопротивление, вызванное примесями (не зависит от температуры), второй член R_1 — параметр, описывающий вклад электрон-фононного взаимодействия. Коэффициент R_K характеризует вклад рассеяния электронов на локализованных магнитных моментах, $T_K^* = \sqrt{\frac{T_K}{2^{1/S}-1}}$. Параметр $S = 0.43$ [32] определяет характер взаимодействия между локализованными спинами и электронами проводимости, параметр $B = 1.44$ задает степенную зависимость электрон-фононного рассеяния от температуры, T_M — нормировочная температура.

В табл. 2 приведены электрофизические параметры для всех пленок. Видно, что температура T_K существенно различается для пленок на различных подложках: от 9.6 K для $SrIrO_3/SrTiO_3$ до 556 K для $SrIrO_3$/LSAT, высокое значение T_K объясняется отклонением от теории возмущения при расчете для модели (1) [33]. Наиболее сильный эффект влияния магнитных примесей (максимальное значение $R_K = 2225\,\Omega$) наблюдается в пленках на подложке $NdGaO_3$. В противоположность этому, пленка на PMN-PT демонстрирует минимальное значение $R_K = 3.2\,\Omega$, что согласуется с наименьшей степенью рассогласования решеток $m = -1.9\%$.

Вклад электрон-фононного взаимодействия, характеризуемый параметром R_1, также показывает значительную вариацию: от $0.6\,\Omega$ для $SrIrO_3$ на $NdGaO_3$ до $5 \cdot 10^{-3}\,\Omega$ для $SrIrO_3$ на PMN-PT. Такое различие может быть связано с изменением фононного рассеяния вследствие деформации кристаллической решетки.

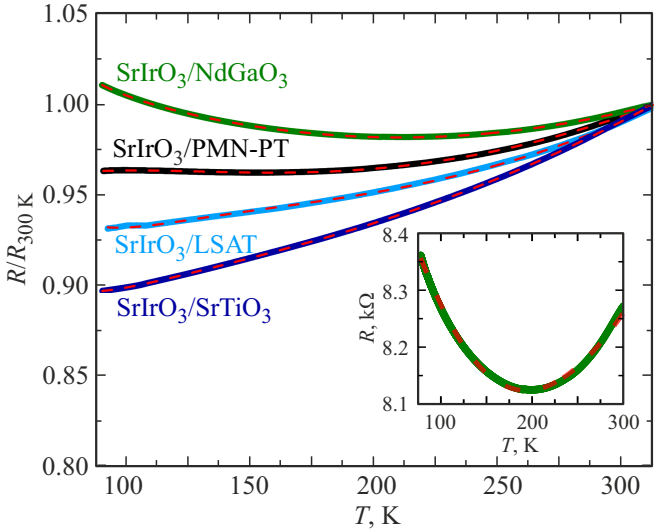

Рис. 7. Зависимости нормированного сопротивления от температуры, пунктиром показаны аппроксимации по формуле (1). На вставке показана зависимость квадрата сопротивления $SrIrO_3$ пленки, выращенной на $NdGaO_3$ подложке, с аппроксимацией по формуле (1).

Наблюдаемые закономерности указывают на определяющую роль структурных деформаций в формировании электронных свойств $SrIrO_3$ пленок. Эпитаксиальные напряжения, возникающие из-за рассогласования решеток, приводят к модификации электронной структуры и, как следствие, к изменению характера проводимости.

6. Анализ химического состава и электронной структуры методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии

Для исследования химического состава и электронной структуры $SrIrO_3$ пленок использовался метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС), основанный на явлении фотоэффекта, возникающего под действием монохроматического рентгеновского излучения на $SrIrO_3$ пленку. Сдвиги фотоэлектронных линий энергии связи позволяют с большой точностью анали-

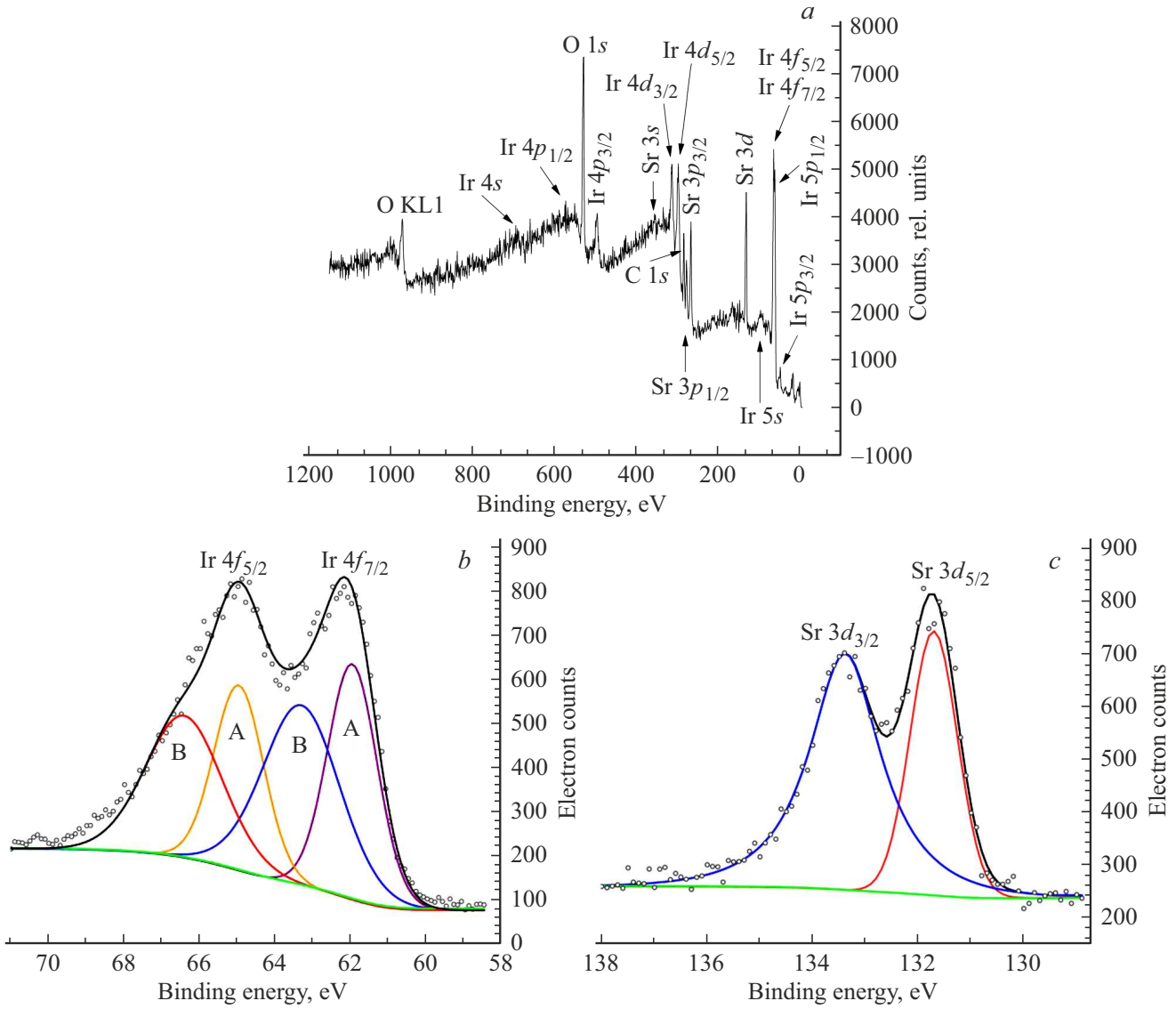

Рис. 8. (*a*) — Обзорный фотоэлектронный спектр $SrIrO_3$ пленки, выращенной на (001)$SrTiO_3$ подложке. Стрелками обозначены положения пиков, соответствующие энергиям связи электронов различных подуровней электронных оболочек химических элементов, содержащихся в пленке. Примерные значения уровней энергий для идентификации пиков (принадлежность элементу и подуровню) определены из XPS NIST Database. (*b*) — Подробный РФЭС спектр диапазона энергий связи для электронного подуровня $4f$ иридия. Оранжевая Ir(A) $4f_{5/2}$ и красная Ir(B) $4f_{5/2}$ и линии — две составляющие аппроксимации функциями Фойгта пика Ir $4f_{5/2}$. Фиолетовая Ir(A) $4f_{7/2}$ и синяя Ir(B) $4f_{7/2}$ линии — две составляющие аппроксимации пика Ir $4f_{7/2}$. (*c*) — Подробный РФЭС спектр диапазона энергий связи для электронного подуровня $3d$ стронция. Красная линия — аппроксимация пика Sr $3d_{5/2}$. Синяя линия — аппроксимация пика Sr $3d_{3/2}$. На рисунках (*b*) и (*c*) точками обозначена измеренная спектроскопом экспериментальная характеристика. Зеленая линия — фон, вызванный неупругим рассеянием фотоэлектронов в пленке, определенный по методу Ширли. Черная линия — аппроксимация измеренных данных.

зировать изменение в химическом окружении атомов. В данной работе исследование проводилось с помощью спектрометра Theta Probe (Thermo Fisher Scientific, Великобритания) при давлении остаточных газов не хуже $1.3 \cdot 10^{-8}$ mbar. Для генерации рентгеновского излучения использовался стандартный анод AlKα с энергией испускаемого фотона $E = h\nu = 1486.6$ eV. Абсолютное энергетическое разрешение спектрометра на линии серебра Ag $3d_{5/2}$ составило 0.46 eV. Размер луча рентгеновских фотонов был выбран равным 400 микрометрам. Энергоанализатор во время всех измерений находился в режиме FAT (Fixed Analyzer Transmission). Абсолютная погрешность измерений кинетической энергии фотоэлектронов составила не более 0.1 eV. Измерения выполнялись в два этапа. На первом этапе измерялся обзорный спектр пленки с шагом по кинетической энергии фотоэлектрона равным 1 eV, при этом пропускная энергия фотоэлектрона (PassEnergy) энергоанализатора

Таблица 3. Параметры РФЭС спектров эпитаксиальных тонких $SrIrO_3$ пленок, выращенных на подложках: $SrTiO_3$, $NdGaO_3$, LSAT и PMN-PT.

Образец	Sr, %	Ir, %	Sr/Ir	Ir(B)/Ir(A)	ϵ_{SO}, eV
$SrIrO_3/SrTiO_3$	53.81	46.19	1.16	1.20	3.03
$SrIrO_3/NdGaO_3$	56.28	43.72	1.29	1.14	2.99
$SrIrO_3$/LSAT	56.94	43.06	1.32	1.35	2.99
$SrIrO_3$/PMN-PT	57.77	42.23	1.37	1.20	3.10

спектрометра устанавливалась равной 200 eV. На втором этапе измерялись подробные спектры отдельных диапазонов энергий фотоэлектронов, соответствующие пикам Sr и Ir с шагом по энергии фотоэлектронов равным 0.100 eV, пропускная энергия спектроанализатора устанавливалась равной 50 eV.

Обзорный спектр $SrIrO_3$ пленки приведен на рис. 8, *a*. Спектр иридия Ir $4f$ состоит из двух компонент: Ir $4f_{7/2}$ и Ir $4f_{5/2}$, возникающих вследствие спин-орбитального взаимодействия (рисунок 8, *b*). Величина спин-орбитального расщепления ϵ_{SO} между этими компонентами для пленки $SrIrO_3$ на $NdGaO_3$ составляет 2.99 eV, на $SrTiO_3$ — 3.03 eV, на LSAT — 2.99 eV, 3.10 eV — PMN-PT (табл. 3). Полученные значения хорошо согласуются с литературными данными для $SrIrO_3$ ($\epsilon_{SO} \sim 3.0$ eV) [34]. Такие значения спин-орбитального расщепления характерны для иридия в степени окисления Ir^{4+} [35].

Важно отметить, что величина спин-орбитального расщепления существенно зависит от электронной структуры и дефектов в материале. Как показано в работе [28], ϵ_{SO} чувствителен к концентрации кислородных вакансий в $SrIrO_3$ пленках. $SrIrO_3$ пленки с большим значением ϵ_{SO} обычно характеризуются меньшей концентрацией кислородных вакансий и, следовательно, более совершенной стехиометрией и структурой. В этом контексте наблюдаемое максимальное расщепление ($\epsilon_{SO} = 3.10$ eV) для $SrIrO_3$ пленки на подложке PMN-PT может указывать на его оптимальную кислородную стехиометрию и меньшую концентрацию магнитных примесей по сравнению с другими исследованными образцами.

Для более детального анализа электронной структуры каждая из спин-орбитальных компонент Ir $4f_{7/2}$ и Ir $4f_{5/2}$ была аппроксимирована двумя составляющими, обозначенными как Ir(A) и Ir(B), соответствующие атомам иридия с различными локальными искажениями кислородных октаэдров. Отношение интенсивностей пиков Ir(B)/Ir(A) варьируется от 1.14 до 1.35 для разных подложек [36], что свидетельствует о различном распределении этих состояний. Отношение Sr к Ir варьируется от 1.16 ($SrIrO_3/SrTiO_3$) и до 1.37 ($SrIrO_3$/PMN-PT). Такие значения связаны с различными значениями параметров решетки и степенью рассогласования между пленкой и подложкой, определенных из рентгеноструктурного анализа.

Пики Sr $3d$ также демонстрируют дублетную структуру (Sr $3d_{5/2}$ и Sr $3d_{3/2}$) с характерным расщеплением около 1.8 eV, что соответствует Sr в оксидном окружении (рис. 8, *c*).

7. Заключение

В работе было проведено исследование структурных, электронных и транспортных свойств эпитаксиальных тонких $SrIrO_3$ пленок, выращенных методом высокочастотного магнетронного распыления на монокристаллических подложках: (110)$NdGaO_3$, (001)$SrTiO_3$, (001)$(LaAlO_3)_{0.3}(Sr_2TaAlO_6)_{0.7}$ (LSAT) и (110)$Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$-$PbTiO_3$ (PMN-PT). Структурный анализ показал, что все полученные пленки близки к псевдокубической фазе. Установлено, что степень рассогласования решеток между пленкой и подложкой варьируется от -1.9% для PMN-PT до 4.5% для $NdGaO_3$, что приводит к различной степени деформации кристаллической структуры. Эффективный объем элементарной ячейки $SrIrO_3$ пленок, за исключением образца на подложке PMN-PT, меньше, чем объем псевдокубической ячейки орторомбической фазы кристалла $SrIrO_3$ ($62.1 \cdot 10^{-3}\,nm^3$), что указывает на формирование сжатой кристаллической структуры.

Электрофизические измерения выявили металлический характер проводимости $SrIrO_3$ пленки с переходом к росту сопротивления при низких температурах. Анализ температурной зависимости сопротивления в рамках упрощенной модели, учитывающей влияние рассеяния электронов на магнитных примесях, показал существенное влияние типа подложки на электронный транспорт $SrIrO_3$ пленок. Значения температуры T_K, характеризующей взаимодействие с магнитными примесями, варьируются от 253 K для пленки на $NdGaO_3$ до 556 K для пленки на LSAT, что связано со степенью деформации кристаллической решетки. Исследование методом РФЭС позволило определить атомный состав $SrIrO_3$ пленок, а также исследовать электронную структуру и химическое состояние ионов иридия и стронция, кроме того была оценена величина спин-орбитального расщепления, которая составляет около 3 eV для Ir $4f$ состояний,

что характерно для Ir^{4+} в октаэдрическом окружении. Отношение Ir(B)/Ir(A) демонстрирует зависимость от типа подложки, что согласуется с различной степенью деформации кристаллической решетки. Полученные результаты демонстрируют определяющую роль подложки в формировании структурных и электронных свойств тонких $SrIrO_3$ пленок, что открывает возможности для целенаправленной модификации их функциональных характеристик путем выбора соответствующей подложки.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-00010, https://rscf.ru/project/23-79-00010/ с привлечением оборудования Центра коллективного пользования уникальным научным оборудованием в области нанотехнологий (ЦКП МФТИ).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] S. Sardar, M. Vagadia, T.M. Tank, J. Sahoo, D.S. Rana. J. Appl. Phys. **135**, 8 (2024).
[2] H. Chen, D. Yi. APL Mater. **9**, 6 (2021).
[3] J.M. Longo, J.A. Kafalas, R.J. Arnott. J. Solid State Chem. **3**, *2*, 174 (1971).
[4] J. Liu, D. Kriegner, L. Horak, D. Puggioni, C. Rayan Serrao, R. Chen, D. Yi, C. Frontera, V. Holy, A. Vishwanath, J.M. Rondinelli, X. Marti, R. Ramesh. Phys. Rev. B **93**, *8*, 085118 (2016).
[5] B.L. Chamberland, A.R. Philpotts. J. Alloys Compd. **182**, *2*, 355 (1992).
[6] G. Cao, P. Schlottmann. Rep. Prog. Phys. **81**, *4*, 042502 (2018).
[7] S.J. Moon, H. Jin, K.W. Kim, W.S. Choi, Y.S. Lee, J. Yu, T.W. Noh. Phys. Rev. Lett. **101**, *22*, 226402 (2008).
[8] Z.T. Liu, M.Y. Li, Q.F. Li, J.S. Liu, W. Li, H.F. Yang, D.W. Shen. Sci. Rep. **6**, *1*, 30309 (2016).
[9] J.H. Gruenewald, J. Nichols, J. Terzic, G. Cao, J.W. Brill, S.S.A. Seo. J. Mater. Res. **29**, *21*, 2491 (2014).
[10] L. Horák, D. Kriegner, J. Liu, C. Frontera, X. Marti, V. Holý. J. Appl. Crystallogr. **50**, *2*, 385 (2017).
[11] B. Kim, B.H. Kim, K. Kim, B.I. Min. Sci. Rep. **6**, *1*, 27095 (2016).
[12] И.Е. Москаль, А.М. Петржик, Ю.В. Кислинский, А.В. Шадрин, Г.А. Овсянников, Н.В. Дубицкий. Известия РАН. Серия физическая **88**, *4*, 673 (2024).
[13] V. Fuentes, L. Balcells, Z. Konstantinović, B. Martínez, A. Pomar. Nanomaterials **14**, *3*, 242 (2024).
[14] S.S. Li, Y. Zhang, J.S. Ying, Z.C. Wang, J.M. Yan, G.Y. Gao, R.K. Zheng. J. Appl. Phys. **133**, 1 (2023).
[15] И.Е. Москаль, Ю.В. Кислинский, А.М. Петржик, Г.А. Овсянников, Н.В. Дубицкий. ФТТ 6**6**, *7*, 1101 (2024).
[16] Y.V. Kislinskii, K.Y. Constantinian, I.E. Moskal, N.V. Dubitskiy, A.M. Petrzhik, A.V. Shadrin, G.A. Ovsyannikov. Russian Microelectronics **52**, Suppl 1, S53 (2023).
[17] A. Biswas, Y.H. Jeong. Curr. Appl. Phys. **17**, *5*, 605 (2017).
[18] K. Nishio, H.Y. Hwang, Y. Hikita. APL Mater. **4**, 036102 (2016).
[19] A. Gutierrez-Llorente, L. Iglesias, B. Rodrıguez-Gonzalez, F. Rivadulla. APL Mater. **6**, 091101 (2018).
[20] Г.А. Овсянников, К.И. Константинян, Г.Д. Ульев, А.В. Шадрин, П.В. Лега, А.П. Орлов. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **2**, 81 (2024).
[21] A. Biswas, K.S. Kim, Y.H. Jeong. J. Appl. Phys. **116**, 21 (2014).
[22] T.J. Anderson, S. Ryu, H. Zhou, L. Xie, J.P. Podkaminer, Y. Ma, C.B. Eom. Appl. Phys. Lett. **108**, 15 (2016).
[23] D. Cui, Y. Xu, L. Zhou, L. Zhang, Z. Luan, C. Li, D. Wu. Appl. Phys. Lett. **118**, 5 (2021).
[24] L. Fruchter, O. Schneegans, Z.Z. Li. J. Appl. Phys. **120**, 7 (2016).
[25] L. Zhang, Q. Liang, Y. Xiong, B. Zhang, L. Gao, H. Li, Y.F. Chen. Phys. Rev. B **91**, *3*, 035110 (2015).
[26] H.C. Montgomery. J. Appl. Phys. **42**, *7*, 2971 (1971).
[27] W. Zhao, M. Gu, D. Xiao, Q. Li, X. Liu, K. Jin, J. Guo. Phys. Rev. Mater. **8**, *10*, 105001 (2024).
[28] S. Suresh, S.P.P. Sadhu, V. Mishra, W. Paulus, M.R. Rao. J. Phys.: Condens. Matter **36**, *42*, 425601 (2024).
[29] Ю.В. Кислинский, Г.А. Овсянников, А.М. Петржик, К.И. Константинян, Н.В. Андреев, Т.А. Свиридова. ФТТ **57**, *12*, 2446 (2015).
[30] В.А. Байдикова, Н.В. Дубицкий, И.Е. Москаль, Г.А. Овсянников, А.М. Петржик, Г.Д. Ульев, К.И. Константинян, Ю.В. Кислинский, А.В. Шадрин. Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии **16**, *4*, 509 (2024).
[31] G. Rimal, T. Tasnim, G. Calderon Ortiz, G.E. Sterbinsky, J. Hwang, R.B. Comes. Phys. Rev. Mater. **8**, *7*, L071201 (2024).
[32] R. Choudhary, S. Nair, Z. Yang, D. Lee, B. Jalan. APL Mater. **10**, 9 (2022).
[33] Н.К. Чумаков, И.А. Черных, А.Б. Давыдов, И.С. Езубченко, Ю.В. Грищенко, Л.Л. Лев, М.Л. Занавескин. ФТП **54**, *9*, 962 (2020).
[34] D. Fuchs, A.K. Jaiswal, F. Wilhelm, D. Wang, A. Rogalev, M.L. Tacon. arXiv preprint arXiv:2502.02985 (2025).
[35] W. Surta, S. Almalki, Y.X. Lin, T. Veal, M. O'Sullivan. arXiv preprint:2406.01845 (2024).
[36] V. Fuentes, B. Vasić, Z. Konstantinovi; B. Martínez, L. Balcells, A. Pomar. J. Magn. Magn. Mater. **501**, 166419 (2020).

Редактор Ю.Э. Китаев