

# Эпитаксиальные тонкие пленки h-LuFeO<sub>3</sub> на кубической подложке: изучение и математическое моделирование структуры

Нигаард Р.Р.<sup>1</sup>, Маркелова М.Н.<sup>2</sup>, Шуркина А.С.<sup>2</sup>, Цымбаренко Д.М.<sup>2</sup>

Аспирант, 3 курс

<sup>1</sup>МГУ имени М.В.Ломоносова, факультет наук о материалах, Москва, Россия

<sup>2</sup>МГУ имени М.В.Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

E-mail: [rnygaard@mail.ru](mailto:rnygaard@mail.ru)

Одним из важнейших факторов, детерминирующих функциональные свойства тонких пленок, является их микроструктура. В данной работе на примере тонких пленок гексагонального феррита лютеция (h-LuFeO<sub>3</sub>) демонстрируется возможность направленного получения моно- или бивариантных структур путем выбора для осаждения подложки с различной симметрией поверхности. Также предлагается теоретический подход к моделированию интерфейсов, позволяющий предсказывать их конфигурацию.

Результаты 2θ/ω сканирования (рисунок 1а) показывают, что как на подложке YSZ(111) так и на YSZ(100), обладающей кубической симметрией, сформировалась эпитаксиальная пленка с гексагональной структурой. Результаты φ-сканирования показывают, что пленка на подложке YSZ(111) преимущественно монодоменна (рисунок 1с), в то время как пленка, полученная на подложке YSZ(100), состоит из двух вариантов развернутых друг относительно друга на 30° (рисунок 1б).

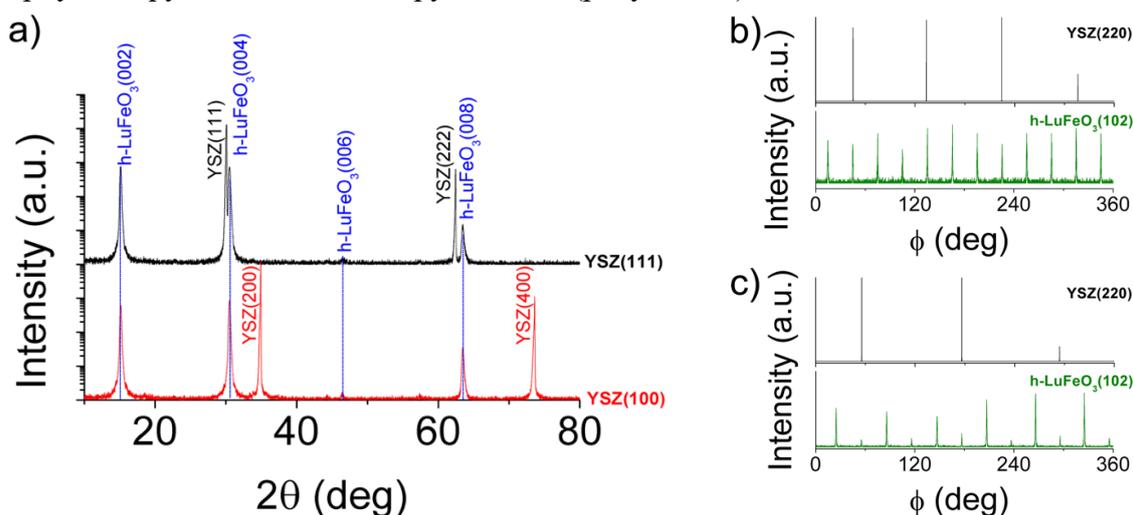


Рисунок 1. Результаты 2θ/ω-сканирования (а) и φ-сканирования (б) тонких пленок h-LuFeO<sub>3</sub>, полученных на монокристаллических подложках YSZ(111) и YSZ(100).

Результаты математического моделирования позволяют объяснить, почему на подложке YSZ(100) сформировалась гексагональная модификация LuFeO<sub>3</sub>, несмотря на то, что интуитивно можно предположить, что подложка с кубической гранью будет способствовать росту ромбической модификации (o-LuFeO<sub>3</sub>), также присущей данному соединению. Оказалось, что минимальная энергия интерфейса o-LuFeO<sub>3</sub>/YSZ(100) составляет порядка 11 кДж/м<sup>2</sup>, что на 26.7% выше энергии интерфейса h-LuFeO<sub>3</sub>/YSZ(111).

Расчеты также согласуются с результатами рентгеновского φ-сканирования, показывая, что для интерфейса h-LuFeO<sub>3</sub>/YSZ(111) возможен лишь один структурный вариант, в то время как для интерфейса h-LuFeO<sub>3</sub>/YSZ(100) возможны и равновероятны два структурных варианта, развернутые друг относительно друга на 30°.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты 20-33-70096 и 19-33-90289)