

6-30-2018

Investigation of small angle ion scattering from the InP(001)

U O. Kutliev

M K. Kurbanov

Follow this and additional works at: <https://uzjournals.edu.uz/ferpi>

Recommended Citation

Kutliev, U O. and Kurbanov, M K. (2018) "Investigation of small angle ion scattering from the InP(001)," *Scientific-technical journal*: Vol. 22 : Iss. 2 , Article 11.

Available at: <https://uzjournals.edu.uz/ferpi/vol22/iss2/11>

This Article is brought to you for free and open access by 2030 Uzbekistan Research Online. It has been accepted for inclusion in Scientific-technical journal by an authorized editor of 2030 Uzbekistan Research Online. For more information, please contact brownman91@mail.ru.

UDC 537.534

3. Investigation of small angle ion scattering from the InP(001)U.O. Kutliev¹, M.K. Kurbanov¹, M.K. Karimov¹, I.U. Tangriberganov¹, K. Otaboeva¹¹ Urgench State University. Urgench, Uzbekistan,**ИССЛЕДОВАНИЕ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЙЯНИЯ ИОНОВ
С ПОВЕРХНОСТЬЮ InP(001)**

Abstract. In this paper presents the results of computer simulation of ion scattering from the InP(001)<110> surface at the grazing incidence of ions. The energy distribution of scattering ions has been obtained. The influence of mass incidence ions was discussed.

Key words: binary collision approximation, computer simulation, ion scattering.

Аннотация. В этой работе представлены результаты компьютерного моделирования рассеяния ионов с поверхности InP(001)<110> при малых углах падения. Получены энергетические распределения рассеянных частиц. Обсуждено влияние атомных масс бомбардирующих частиц.

Ключевые слова: приближение парных столкновений, компьютерное моделирование, рассеяния ионов.

Аннотация. Ушбу ишда компьютерда моделлаштириш усулида ионларнинг InP(001)<110> сиртидан сочилиш жараёни ўрганилган. Сочилган ионларнинг энергетик тақсимоли олинган. Сиртни бомбардимон қилаётган ионларнинг массасини сочилиш жараёнига таъсири таҳлил қилинган.

Таянч сўзлар: Кетма-кет тўқнашувлар усули, компьютерда моделлаштириш, ион сочилиш.

Введение

В последние годы, в связи с развитием работы по оптоэлектронике (использование оптических и электронных эффектов в полупроводника для создания принципиальных новых типов приборов и информационных систем) и СВЧ (сверх высокочастотной)-техники, резко возрос интерес монокристаллическом фосфид индия. По важности применения в приборе специального назначения фосфид индия выше сейчас и треть мест в мир после кремния и арсенид галлия. Нелегированные монокристаллические фосфид индия используют в качестве подложек для получения приборов СВЧ-техники[1-3]. Основное требования к таким материалам — низкая концентраций примесей, ухудшающие параметры приборов и низкая плотность дислокаций. На подложках и монокристаллов полуизолирующего фосфида индия с высоки удельным сопротивлением ($\rho > 10^7$ Ом-см) создаются полевые транзисторы. На основе применения монокристаллических фосфид индия нашел в оптоэлектронике для изготовления излучателей и приемников излучение, работающие в диапазон дли вол 1,0—1,6 мкм[4-5].

Поэтому структура фосфид индия представляет большой интерес, и оно исследуются, на ряду с другими методами, также методом ионно-рассеивательной спектроскопии. Соединения InP имеет гранецентрированную решетку типа цинковой обманки (сфалерит ZnS). Изображение решетки цинковой обманки представлено на рис. 1. Эта структура может быть описана в виде вставленных друг в друга двух гранецентрированных кубических кристаллических решёток с атомами разных элементов. В наших расчётах, мы рассмотрели, что в первом слое расположены атомы индия, а на втором атомы фосфора.

Цель настоящей работы изучить ориентационные эффекты на поверхности InP(001) с помощью методом ионно-рассеивательной спектроскопии.

Методика исследования и расчёты

При взаимодействии ионов средних энергий (100 эВ—10 кэВ) с поверхностью твердого тела может протекать несколько физических явлений. Во-первых, первичный ион может рассеяться атомами на поверхности твердого тела и покинуть поверхность твердого тела в виде иона или в виде нейтральной частицы. Во-вторых, первичный ион может выбить с поверхности твердого тела атомы или фрагменты атомов, входящих в состав твердого тела. При этом указанные вторичные частицы также могут покинуть поверхность в виде ионов или в виде нейтральных атомов или фрагментов. В-третьих, первичные ионы могут выбить из твердого

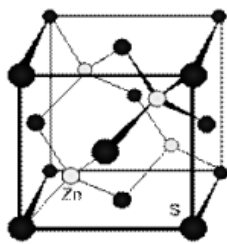


Рис.1. Структура цинковой обманки ZnS.

тела вторичные электроны или кванты электромагнитного излучения - в рентгеновском, ультрафиолетовом или видимом диапазонах спектра [6].

Рассеяние первичного иона с выходом его с поверхности твердого тела может протекать в результате нескольких типов процессов, к важнейшим из которых относятся:

- парное упругое взаимодействие между первичным ионом и атомом на поверхности твердого тела;
- каскадное упругое рассеяние первичного иона на нескольких атомах твердого тела [7].

На рис.2. схематично показано рассеяние первичного иона с массой m на атомах твердого тела, имеющих массу M .

Исходя из законов сохранения энергии и импульса при парном упругом взаимодействии, энергию рассеянного иона E_1 можно представить в виде:

$$E_1 = E_0 (1 + \mu)^2 \left\{ \cos\theta + (\mu^2 - \sin^2 \theta)^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (1)$$

где E_0 — энергия первичного иона; θ — угол рассеяния; $\mu = M/m_1$ — отношение масс атомов твердого тела и первичных ионов; χ — угол выбивания атома.

Для оценки неупругой потери энергии в элементарном акте столкновения мы использовали формулу Фирсова модифицированный Кишиневским[8]:

$$\varepsilon(E_0, P) = \frac{0,310^{-7} v Z_1 (Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})(Z_1^{1/6} + Z_2^{1/6})}{(1 + \frac{0,67 \sqrt{Z_1} r_0}{a_{rf} (Z_1^{1/6} + Z_2^{1/6})})} + (1 - 0,68 \frac{V(r_c)}{E_r}) \quad (2)$$

где, $a_{rf} = 0,468 \text{ \AA}$, v и E_r - относительная скорость и энергия атома, Z_1 - и Z_2 - заряд сталкивающихся ионов и атомов, v - см/с, E_r - эВ, r_{\min} - в ангстремах.

Результатом решения задачи упругого столкновения двух частиц являются два интеграла: интеграл рассеяния и интеграл времени. Интеграл рассеяния дает возможность определить угол χ рассеяния в системе центра инерции (Ц-системе):

$$\chi = \pi - 2 \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{p dr}{r^2 g(r)} \quad (3)$$

$$g(r) = \left[1 - \frac{p^2}{r^2} - \frac{V(r)}{E_i} \right]$$

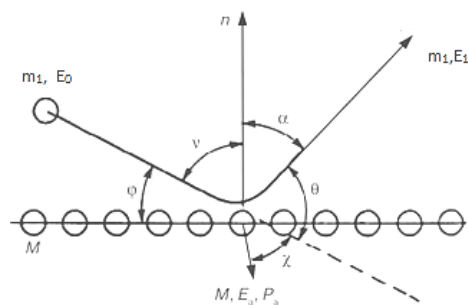


Рис. 2. Схема рассеяния иона атомами на поверхности твердого тела.

r_{\min} -расстояние между частицами при их наибольшем сближении, определяемое из условия $g(r) = 0$; p - прицельный параметр столкновения; E_t - энергия относительного движения; $V(r)$ - двухчастичный потенциал взаимодействия. Определив угол рассеяния χ в Ц-системе согласно (3), по формулам перехода

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \theta_1 &= \sin \chi / (M_1 / M_2 + \cos \chi) \\ \theta_2 &= (\pi - \chi) / 2 \end{aligned} \quad (4)$$

находят угол в лабораторной системе. Угол вылета атома отдачи θ_2 однозначно зависит от прицельного параметра столкновения и изменяется от 0 до $\pi/2$. Угол рассеяния налетающей частицы θ_1 при $M_1/M_2 < 1$ также однозначно зависит от прицельного параметра и изменяется от π при $p = 0$ до 0 при $p = \infty$. При $M_1/M_2 > 1$, т.е. когда масса рассеивающего атома меньше массы налетающей частицы, θ_1 является двузначной функцией прицельного параметра p и изменяется от 0 при $p = 0$ и $p = \infty$ до

$$\theta_{\max} = \arcsin(M_1 / M_2) \quad (5)$$

Таким образом, вычислив интеграл рассеяния (3) и используя формулу перехода (3) и (4), можно определить направление движения рассеянной частицы и атома отдачи в Л-системе. Тем самым решается задача рассеяния в случае, когда детектор частиц находится на бесконечно большом расстоянии от рассеивающего центра (атома). Однако существуют ситуации, играющие важную роль и в ионно-рассеивательной спектроскопии, когда "детектором" является соседний атом мишени, расстояние до которого может оказаться сравнимым со смещением рассеивающего атома относительно его исходного положения за эффективное время столкновения.

В целях построения потенциала, который описывал бы межатомное взаимодействие в среднем значительно точнее, чем все другие известные из литературы потенциалы Циглер-Бирзак и Литтмарк(ЦБЛ)[9] для 522 пар атомов, выбранных произвольным образом, рассчитали функции экранирования в потенциалах межатомного взаимодействия. Затем они подобрали такой радиус экранирования

$$a = 0,8853a_0 (Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}) \quad (6)$$

при котором все рассчитанные ими функции стянулись в узкую полосу. Эту полосу, в свою очередь, они аппроксимировали (со стандартным отклонением не выше 18 %) кривой, представляющей собой сумму четырех экспонент. Потенциал взаимодействия, полученный описанным выше способом, получил название универсального, или ЦБЛ-потенциала и имеет такой вид:

$$\begin{aligned} V_{SBL} &= \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} ((0,1818 \exp(-3,2 \frac{r}{a}) + 0,5099 \exp(-0,9423 \frac{r}{a}) + \\ &\dots + 0,2802 \exp(-0,4029 \frac{r}{a}) + 0,02817 \exp(-0,2616 \frac{r}{a})) \end{aligned} \quad (7)$$

Нами была получена энергетические спектры рассеянных ионов Ag^+ и Ne^+ с поверхностью InP(001)<110> при угле скольжения $\psi=3-9^0$ и с энергией $E_0=1$ кэВ.

Отметим что, в направлении <110> на поверхности InP(001) образуется полуканал, который состоит из послойно расположенных атомов In и P.

На рис.3. и рис.4. представлены энергетические распределения рассеянных ионов Ag^+ и Ne^+ с поверхностью InP(001)<110> при $\psi=3-9^0$ и с энергией $E_0=1$ кэВ.

Из рис.3. видно, что при бомбардировке поверхности InP(001)<110> под углом $\psi=3^0$, в энергетическом распределении наблюдается только один интенсивный пик, который относится к рассеянным ионам с поверхностных атомных рядов(атомы P). В случае уголь скольжения равна $\psi=5^0$ интенсивность этого пик будет низким по сравнению, с $\psi=3^0$. Это связано с тем, что увеличения значений угла падения приводит проникновению частиц в монокристалл.

При угле скольжения равной $\psi=7^0$ наблюдается дальнейшее уменьшение интенсивности пика рассеянных частиц с поверхностной атомной цепочки. А также в энергетическом спектре

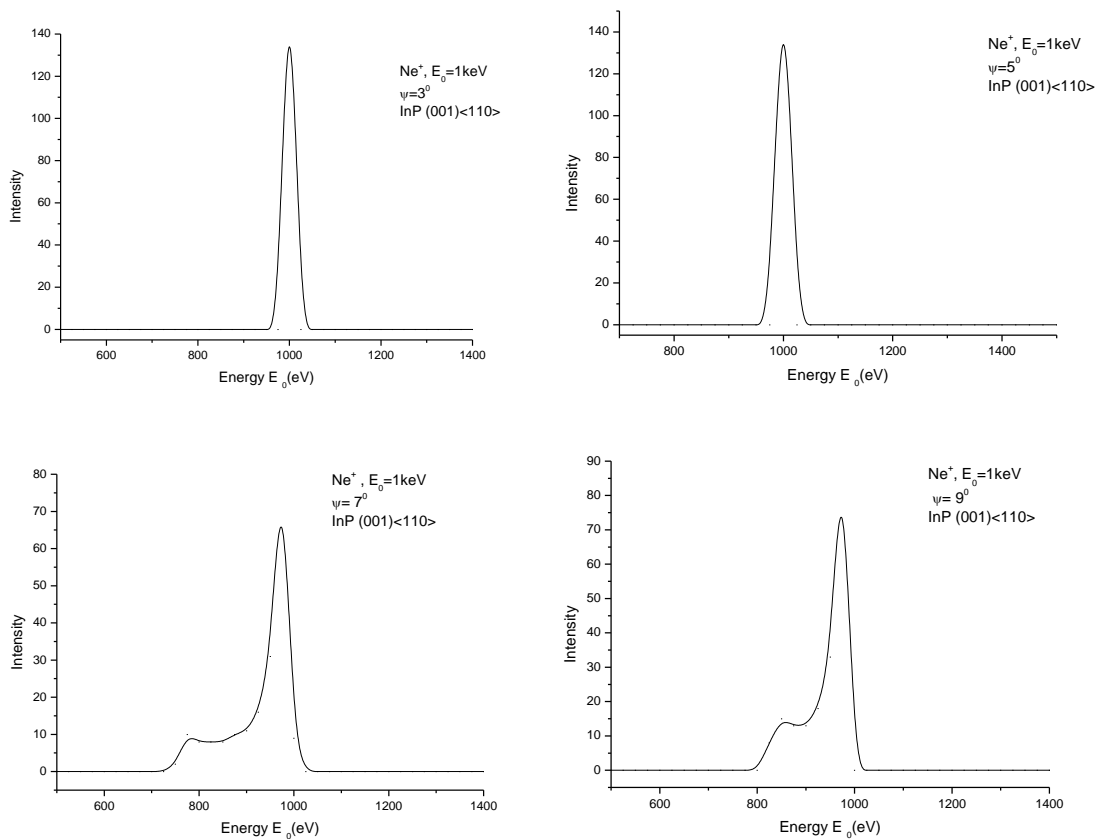


Рис.3. Энергетические распределения рассеянных ионов Ne^+ с поверхностью $InP(001)\langle 110 \rangle$ при $\psi = 3-9^\circ$ и с энергией $E_0 = 1\text{ кэВ}$.

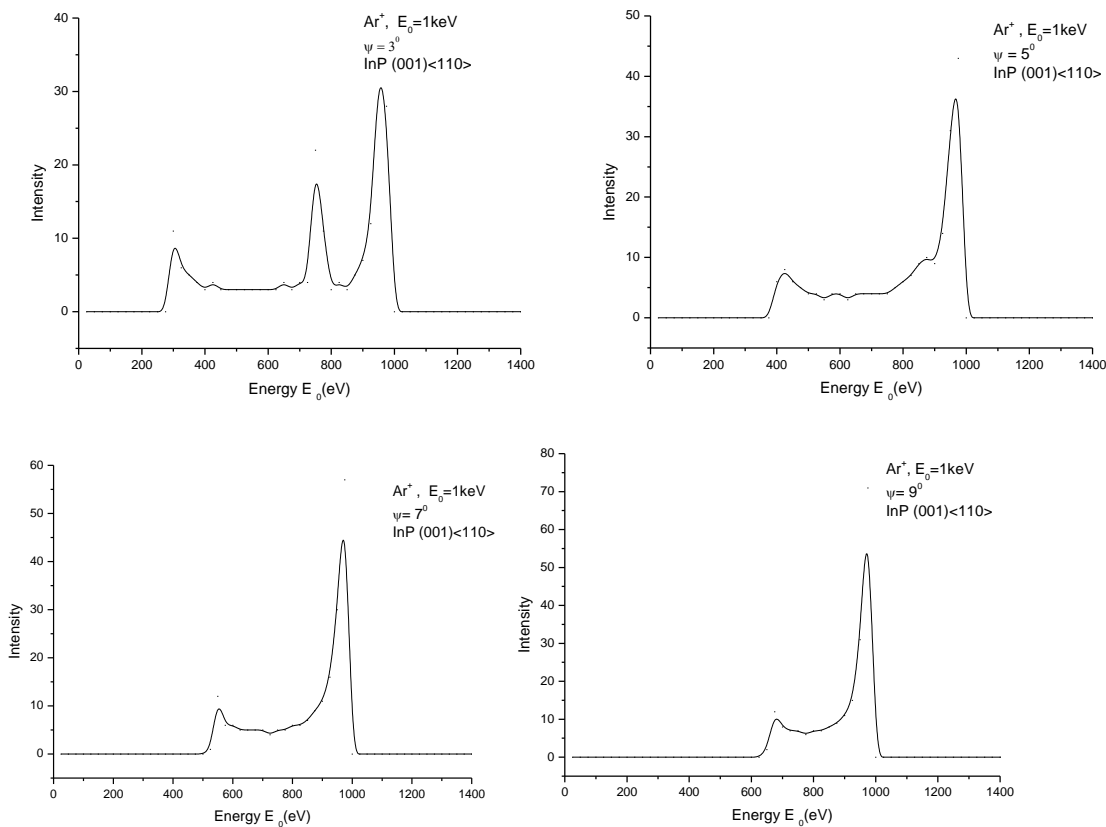


Рис. 4. Энергетические распределения рассеянных ионов Ar^+ с поверхностью $InP(001)\langle 110 \rangle$ при $\psi = 3-9^\circ$ и с энергией $E_0 = 1\text{ кэВ}$.

наблюдается второй пик при низких энергиях. Этот второй пик относится к ионам рассеянных, с полуканала, которая образовалась при поверхностных слоях. Наши расчёты показали что, часть этих ионов рассеивались атомов, которые расположены соседних полуканалах. При значении угла падения $\psi=9^0$, пик рассеянных ионов с полуканала, расположено более высоких энергиях, который объясняется тем, что частицы отражаются только с одного полуканала поверхности.

На рис.4. представлена энергетические распределения ионов Ag^+ с поверхностью InP(001)<110>при $\psi=3-9^0$ и с энергией $E_0=1$ кэВ. В этом случае энергетические распределения рассеянных ионов отличается, чем в случае ионами Ne^+ .

Видно что, при $\psi=3^0$ в энергетическом распределений наблюдается пик, относящиеся к ионам рассеянных от полуканала. Это объясняется тем, что при ионов Ag^+ при этом значении угла скольжения проникают во внутрь полуканала. А также следует отметить, что интенсивность оба пика, как и рассеянных ионов, с поверхностных атомных рядов, так и рассеянных частиц с полуканалов, меньше чем в случае Ne^+ . Это объясняется увеличением масс бомбардирующих частиц.

Закключение

Нами смоделирована процесс рассеяния ионов Ag^+ и Ne^+ с поверхностью InP(001)<110> при $\psi=3-9^0$ и с энергией $E_0=1$ кэВ. Показано, что при малых энергиях бомбардирующих частиц на поверхности также наблюдается «эффект полуканал», который можно объяснить с помощью методом приближении парных столкновений сталкивающихся частиц. Полученные результаты дают возможность изучить поверхностных структур материалов, которые используются современной микроэлектронике.

References

- [1] S. Jeon, H. Kim, W. A. Goddard III, and H. A. Atwater, J.Phys.Chem.C.116,17604, 2012.
- [2] B. Muñoz García and E. A. Carter, J. Am. Chem. Soc. 134, 13600, 2012.
- [3] V. M. Bermudez, J. Appl. Phys. 113, 184906, 2013.
- [4] B. Kaiser, D. Fertig, J. Ziegler, J. Klett, S. Hoch, and W. Jaegermann, Chem. Phys. Chem. 13, 3053, 2012.
- [5] M. M. May, O. Supplie, C. Hohn, W.-D. Zabka, H.-J. Lewerenz, R. van de Krol, and T. Hannappel, Proc. of SPIE 8822, 88220M, 2013.
- [6] F. Samavat, B. V. King and D. J. O'connor, "Low Energy Ion Scattering," Surface Review and Letters, Vol.14, No.1, 2007, pp. 31-41. doi:10.1142/S0218625X07009001
- [7] L. Carlén, G. Førre, P. Golubev, B. Jakobsson, A. Kolozhvari, P. Marciniowski, A. Siwek, E. J. van Veldhuizen, L. Westerberg, H. J. Whitlow, and J. M. Østby, Nucl. Instrum. Methods A 516, 2004. R. 327–347.
- [8] L.M. Kishinevskiy. // Izv. ANSSSR. Ser. fiz. 1962.-T.26.-S.1410.
- [9] D.J. O'Connor, J.P. Biersack. Comparison of theoretical and empirical potentials // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. – Amsterdam, 1986.-V.B15.P.14-17.

Список литературы

- [1] S. Jeon, H. Kim, W. A. Goddard III, and H. A. Atwater, J.Phys.Chem.C.116,17604, 2012.
- [2] B. Muñoz García and E. A. Carter, J. Am. Chem. Soc. 134, 13600, 2012.
- [3] V. M. Bermudez, J. Appl. Phys. 113, 184906, 2013.
- [4] B. Kaiser, D. Fertig, J. Ziegler, J. Klett, S. Hoch, and W. Jaegermann, Chem. Phys. Chem. 13, 3053, 2012.
- [5] M. M. May, O. Supplie, C. Hohn, W.-D. Zabka, H.-J. Lewerenz, R. van de Krol, and T. Hannappel, Proc. of SPIE 8822, 88220M, 2013.
- [6] F. Samavat, B. V. King and D. J. O'connor, "Low Energy Ion Scattering," Surface Review and Letters, Vol.14, No.1, 2007, pp. 31-41. doi:10.1142/S0218625X07009001
- [7] L. Carlén, G. Førre, P. Golubev, B. Jakobsson, A. Kolozhvari, P. Marciniowski, A. Siwek, E. J. van Veldhuizen, L. Westerberg, H. J. Whitlow, and J. M. Østby, Nucl. Instrum. Methods A 516, 2004. P. 327–347.
- [8] Л.М. Кишиневский. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1962.-Т.26.-С.1410.
- [9] D.J. O'Connor, J.P. Biersack. Comparison of theoretical and empirical potentials // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. – Amsterdam, 1986.-V.B15.P.14-17.