



КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЙАНИЯ ИОНОВ AR С ДЕФЕКТНОЙ ПОВЕРХНОСТИ INP(001)

М.К. Каримов¹, У.О. Кутлиев¹, М.У. Отабаев¹, Ф.Р. Садуллаева¹, Б. Аллаберганова¹,
Ш.К. Исмаилов²

¹Ургенчский Государственный Университет

²Ургенчский филиал Ташкентского университета информационных технологий имени Мухаммада ал-Хорезми

karimov_m_k@mail.ru, shavkat6819@mail.ru

Аннотация

В приближении парных столкновений проведено моделирование траекторий ионов Ar⁺, рассеянных с поверхностей InP(001)<110>. Показано, что характерные траектории ионов, рассеянных с поверхности двухкомпонентного монокристалла, определяются, в основном, кристаллографическими направлениями, которые существенно влияют на процессы рассеяния и нейтрализации ионов. Рассчитаны энергетические и угловые распределения малоуглового рассеяния ионов Ar⁺ на поверхности монокристалла InP(001) с E₀ = 5 кэВ. Установлено, что в энергетическом распределении можно четко выделить вклад приповерхностной области в рассеяние ионов, вызывающий появление нескольких дискретных пиков в низкоэнергетической части спектра.

Ключевые слова: рассеяние ионов, энергетическое и угловое распределение, компьютерное моделирование, полупроводники.

COMPUTER SIMULATION OF SMALL-ANGLE SCATTERING OF AR IONS FROM A DEFECTIVE INP (001) SURFACE

M.K. Karimov¹, U.O. Kutliev¹, M.U. Otabaev¹, F.R. Sadullaeva¹, B. Allaberganova¹,
Sh.K. Ismailov²

¹Urgench State University

²Urgench branch of Tashkent University of Information Technologies named after Muhammad al-Khwarizmi

karimov_m_k@mail.ru, shavkat6819@mail.ru

Abstract

The pair-collision approximation, the trajectories of Ar⁺ ions scattered from InP (001) <110> surfaces were simulated. It is shown that the characteristic trajectories of ions scattered from the surface of a two-component single crystal are determined mainly by crystallographic directions, which significantly affect the processes of ion scattering and neutralization. The energy and angular distributions of small-angle scattering of Ar⁺ ions on the surface of an InP (001) single crystal with E₀ = 5 keV are calculated. It was established that in the energy distribution, the contribution of the near-surface region to ion scattering can be clearly distinguished, which causes the appearance of several discrete peaks in the low-energy part of the spectrum.

Key words: ion scattering, energy and angular distribution, computer simulation, semiconductors.

Спектрометрия рассеяния ионов низких энергий (рассеяния медленных ионов, РМИ) занимает особое место среди методов анализа поверхности, поскольку рассеяние происходит исключительно на первом атомном слое поверхности образца. Так происходит потому, что ионы благородных газов низких энергий, проникая в твердое тело, нейтрализуются (вследствие их высокого потенциала ионизации) при неупругих электронных взаимодействиях. Таким образом, можно регистрировать только те ионы, которые претерпевают упругие столкновения непосредственно на поверхности твердого тела. РМИ является единственным методом, чувствительным к верхнему монослою, независимо

от того, какие атомы находятся в глубине образца. Монослойной чувствительности в других методах можно достичь только в том случае, если поверхностный слой отличается по составу от нижележащих слоев (например, пленка адсорбированных молекул на металлической поверхности). Ионное облучение широко используется в технологии микроэлектроники. Ряд различных технологических операций производится с применением ионов (травление, очистка поверхности, легирование). Этот ряд может быть существенно расширен и результат воздействия ионного облучения оптимизирован на основе использования новых эффектов и механизмов ионного воздействия на поверхность. Кроме того, знание состояния иона, отраженного поверхностью после взаимодействия позволяет при определенных предположениях определить массу атомов, на которых происходило рассеяние, т.е. провести анализ состава поверхности (в отличие от традиционных методов рентгеноструктурного анализа, позволяющих исследовать структуру кристалла). Успехи этой области науки тесно связаны с развитием теоретических представлений о таких фундаментальных процессах, как рассеяние ионов, распыление бомбардируемых поверхностей. Развитие этих представлений позволяет успешно решить широкую совокупность актуальных задач, связанных с определением реальной атомной структуры и химического состава поверхности и приповерхностных слоев твердого тела, наличия и взаиморасположения атомных ступенек, состава и структуры адсорбционных покрытий поверхности атомами и молекулами. На основе многочисленных экспериментальных и теоретических исследований закономерностей рассеяния ионов поверхностью твердых тел разработан эффективный метод диагностики – ионно – рассеивательная спектроскопия (ИРС), сочетание которой с машинным моделированием процесса дает уникальную информацию о составе и структуре поверхностных слоев твердого тела [1-3].

Настоящая работа посвящается к исследованию малоуглового рассеяния ионов Ag с поверхность InP(001), который имеет линейные дефекты. Линейным дефектам относятся цепочки вакансий, межузельных атомов и в основном дислокации. Размеры линейных дефектов малы в двух измерениях, а в третьем измерении их протяженность может быть соизмерима с длиной кристалла. Нами рассмотрены самый распространенный

линейный дефект – дислокации. Дислокации – это особый вид дефектов в расположении атомов кристаллической решетки. По своей природе они отличаются от других линейных дефектов – цепочек вакансий или межузельных атомов. Образуются дислокации в результате локальных смещений кристаллографических плоскостей, происходящих в кристаллической решетке зерен на различных технологических этапах их формирования.

В наших расчетах была использована метод приближении парных столкновений. В этом методе обычно анализ рассеяния проводят в рамках классической механики, а именно на основе соотношения элементарного акта взаимодействия двух частиц. На рис. 1 представлена картина рассеяния в лабораторной системе координат.

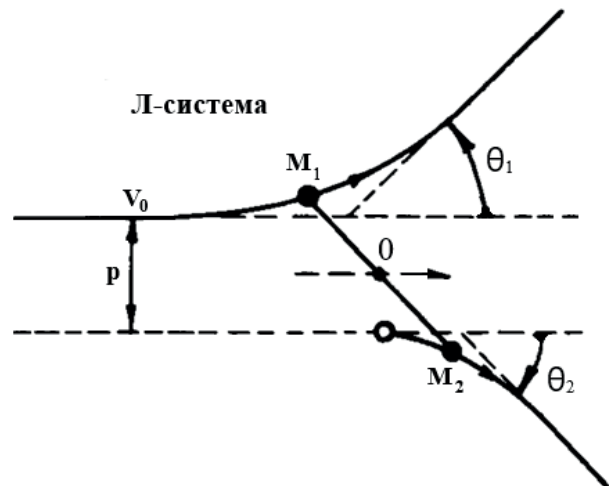


Рис.1. Схема рассеяния в лабораторной системе координат.

Ион массы M_1 со скоростью v_0 налетает на первоначально покоящийся атом «мишени», масса которого равна M_2 . Если бы взаимодействие между ионом и атомом мишени отсутствовало, то ион пролетел бы на расстоянии p от атома мишени. Это расстояние называют прицельным параметром. В результате взаимодействия ион рассеивается на угол θ_1 по отношению к направлению первоначального движения. Что же касается атома мишени, то он после столкновения движется в направлении, составляющем угол θ_2 с направлением первоначального движения иона. Этот атом называют атомом отдачи. На рисунке отмечена траектория движения центра инерции и его положение (точка O) в момент наибольшего сближения взаимодействующих частиц. Если столкновение

не сопровождается изменением внутреннего состояния частиц, т.е. является упругим, то из законов сохранения кинетической энергии и импульса

$$M_1(V_0)^2 = M_1(V_1)^2 + M_2(V_2)^2$$

$$M_1V_0 = M_1V_1 \cos \theta + M_2V_2 \cos \varphi$$

$$M_1V_1 \sin \theta - M_2V_2 \sin \varphi = 0$$

можно получить выражения для энергии иона, рассеянного на угол θ_1 , и атома отдачи, летящего в направлении θ_2 .

$$E_1 = E_0 M_1 / (M_1 + M_2)^2 \{ \cos \theta_2 + [(M_2 / M_1)^2 - \sin^2 \theta_1]^{1/2} \}^2$$

$$E_2 = E_0 4M_1 M_2 / (M_1 + M_2)^2 \cos \theta_2$$

где E_0 - энергия падающего атома, E_1 - энергия рассеянного атома, E_2 - энергия атома отдачи. Вышеприведённые основаны только на законах сохранения и поэтому не зависят от конкретного вида закона взаимодействия. Результатом решения задачи столкновения двух частиц является интеграл рассеяния, то есть зависимость угла рассеяния от прицельного параметра. Потенциалы взаимодействия атомных частиц широко используются для моделирования профилей концентрации по глубине при ионной имплантации, при расчете образования дефектов во время прохождения частиц через твердое тело, при разработке методов исследования поверхности с использованием рассеяния ионов и во многих других приложениях.

Неупругие потери энергии частиц считались локальными. Описаны и обсуждены области использования формул для локальных неупругих потерь энергии, предложенных Фирсовым, Кишиневским и Оеном-Робинсоном. В алгоритме предусмотрено использование этих формул в зависимости от условий столкновения. В нем учитывается влияние неупругих потерь энергии на кинематику столкновения [4-6].

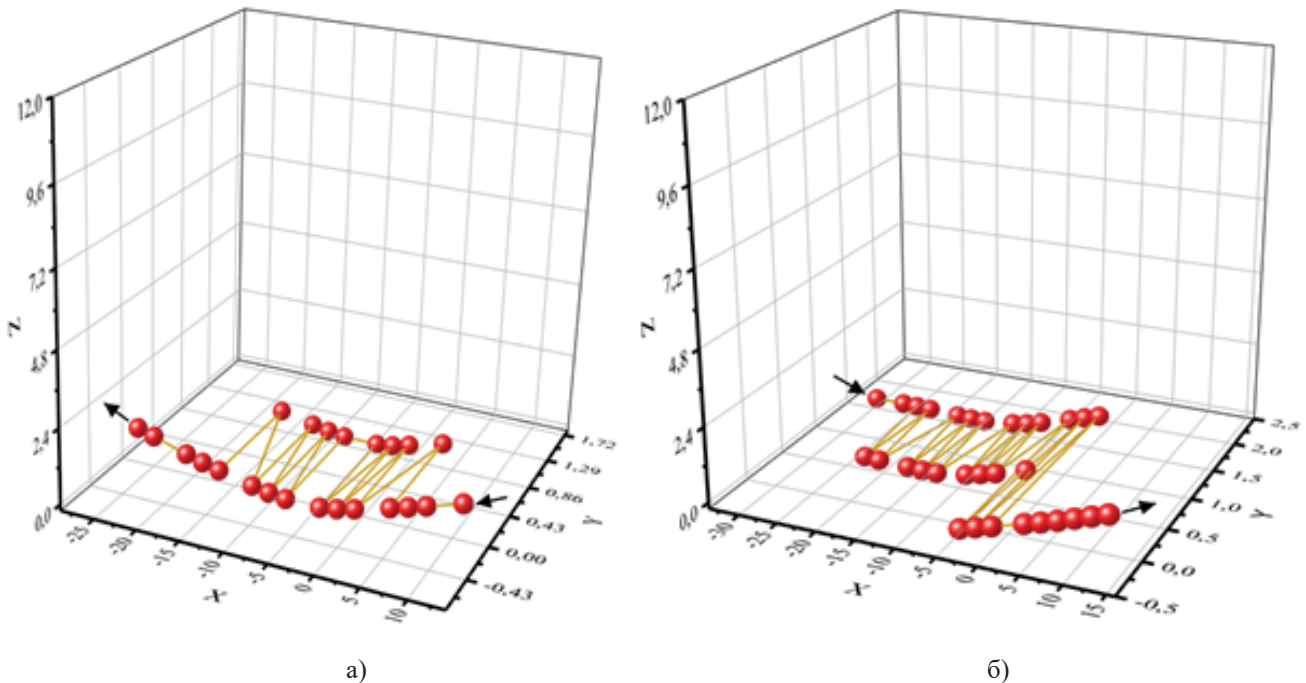


Рис.2. Характерная траектория иона Ag с дефектной поверхности InP(001)<110>(а) и <-110>(б). Угол падения ионов составит $\psi=5^\circ$ и начальная энергия $E_0=5\text{кэВ}$.

На рис.2 представлена характерная траектория иона Ag с дефектной поверхности InP(001)<110>(а) и <-110>(б). Угол падения ионов составит $\psi=5^\circ$ и начальная энергия $E_0=5\text{кэВ}$. Из рисунка видно, что из-за малого значения угла падения в направлении <110> взаимодействие иона, в основном, состоит с поверхностным атомным рядом, который имеет линейный дефект (на рисунке видно отсутствие атомов). В этом случае энергия рассеянного иона-

4860эВ, неупругие потери энергии-121 эВ, коэффициент столкновения-23.

В направлении $\langle -110 \rangle$ образуется более широкий полуканал. Из рисунка видно, что взаимодействия иона происходят не только с одним полуканалом, а также соседними атомными рядами. Так как столкновения иона происходят с поверхностными атомами последовательно можно определить характеристику траектории, которые дают информацию о дефектах, находящие на поверхностных слоях. В этом случае энергия рассеянного иона- 4884 эВ, неупругие потери энергии-108 эВ, коэффициент столкновения-31.

Нами также получены энергетические распределения рассеянных ионов с вышеупомянутых дефектных поверхностей при углах падения $\psi=5^\circ, 9^\circ, 13^\circ$ (рис.3).

При рассеянии ионов Ag с дефектной поверхности InP(001) $\langle 110 \rangle$ на энергетическом распределении(рис.3.а) наблюдается два интенсивные пики. Пик образованный высокоэнергетической части спектра соответствует ионам рассеянных поверхностных атомных рядов. Интенсивность этого пика, изменяется в зависимости угла падения бомбардирующих ионов. Самый интенсивный

пик наблюдается в случае $\psi=5^\circ$ когда падающие ионы рассеиваются только с атомов лежащих первом слое.т.е наблюдается зеркальное рассеяния ионов. С увеличением угла падения интенсивность уместается, так как ионы более жестко сталкиваются с поверхностными атомами и доля неэластичных столкновений растёт. Второй более интенсивный пик, наблюдаемый по близости пика рассеянных ионов с атомный цепочки, относится ионам рассеянных полуканала. В зависимости видно, что при угле скольжения $\psi=9^\circ$ этот пик разделен от высокоэнергетического пика. Это объясняется с тем, что в этом значении угла скольжения большое количество подающих ионов захватываются в полуканал. При рассеянии ионов Ag с дефектной поверхности InP $\langle -110 \rangle$ (рис.3.б) пик полуканала ясно разделен по значениям энергии. Этот разделения объясняется с большим геометрическим параметрам полуканала, образованным в этом направлении. Пики, образованные в малой энергетической части спектра в этих двух направлениях относятся ионам. Так как столкновения иона становится жестким из-за дефектов и при рассеянии ионы теряют больше энергии.

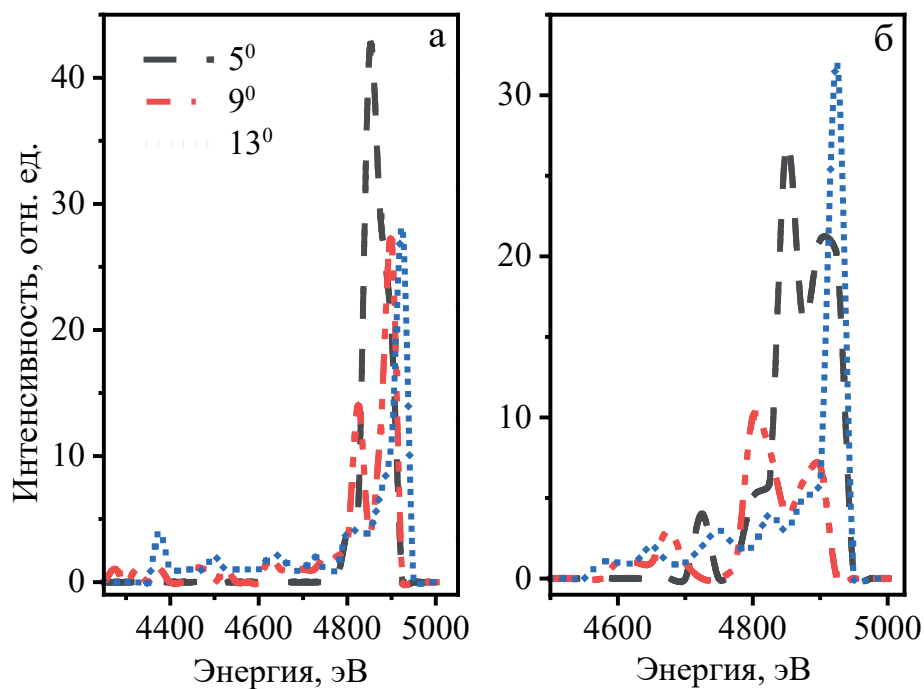


Рис.3. Энергетические распределения иона Ag с дефектной поверхности InP(001) $\langle 110 \rangle$ (а) и $\langle -110 \rangle$ (б). Угол падения ионов составит $\psi=5^\circ, 9^\circ, 13^\circ$ и начальная энергия $E_0=5$ кэВ.

Выводы

Нами была смоделировано рассеяния ионов аргон с дефектной поверхности $\text{InP}(001)\langle 110 \rangle$ и $\langle -110 \rangle$ при малых углах скольжениях. Получены энергетические распределения рассеянных ионов и построены траектории ионов, рассеянных от дефектной поверхности. Установлено, что траектории рассеянных частиц показывают наличия дефектов на поверхности. При малоугловом падении ионов на поверхность. Показано, что ионы рассеянных энергетическом распределении, наряду с интенсивными пиками полуканала и атомной цепочки, наблюдаются менее интенсивные пики, относящиеся к ионам рассеянных от дефектов.

Литература

1. E.S. Parilis, L.M. Kishinevsky, N.Yu. Turaev, B.E. Baklitzky, F.F. Umarov, V.Kh. Verleger, S. Niznaya, and I. S. Bitensky, Atomic Collisions on Solid Surfaces (North-Holland, Amsterdam, 1993).
2. U. Kutliev, M. Karimov, B. Sadullaeva, M. Otaboev, CompuSoft 7, 2749 (2018).
3. M.K. Karimov, Kh.J. Matchonov, K. U. Otaboeva, M.U. Otaboev. e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. 17, 179 (2019).
4. M.K. Karimov, U.O. Kutliev, Sh.K. Ismailov, M.U. Otaboev. e-J. Surf. Sci. Nanotechnol. 18, 164 (2020).
5. U.O. Kutliev, M.K. Kurbanov, M.K. Karimov, I.U. Tangriberganov, K. Otaboeva. Scientific-technical journal 22, 18 (2018).
6. U.O. Kutliev, M.K. Karimov, M.U. Otaboev. Inorganic Materials: Applied Research. 11(3), 503 (2020).