

6-7-2018

## INVESTIGATION OF SMALL ANGLE ION SCATTERING FROM THE INP(001)

U O. Kutliev  
*Urgench State University*

M K. Kurbanov  
*Urgench State University*

M K. Karimov  
*Urgench State University*

I U. Tangriberganov  
*Urgench State University*

K Otaboeva  
*Urgench State University*

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

---

### Recommended Citation

Kutliev, U O.; Kurbanov, M K.; Karimov, M K.; Tangriberganov, I U.; and Otaboeva, K (2018) "INVESTIGATION OF SMALL ANGLE ION SCATTERING FROM THE INP(001)," *Scientific-technical journal*. Vol. 1 : Iss. 2 , Article 21.

Available at: <https://uzjournals.edu.uz/ferpi/vol1/iss2/21>

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 [sh.erkinov@edu.uz](mailto:sh.erkinov@edu.uz).

УДК 537.534

**INVESTIGATION OF SMALL ANGLE ION SCATTERING FROM THE INP(001)****U.O. Kutliev, M.K. Kurbanov, M.K. Karimov,  
I.U. Tangriberganov, K.Otaboeva**

Urgench State University

**ИССЛЕДОВАНИЕ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЙЯНИЯ ИОНОВ  
С ПОВЕРХНОСТЬЮ InP (001)****У.О. Кутлиев, М.К. Курбанов, М.К. Каримов,  
И.У. Тангриберганов, К. Отабоева**

Ургенчский государственный университет

**INP(001) СИРТИДАН ИОНЛАРНИНГ КИЧИК БУРЧАКЛАРГА  
СОЧИЛИШИНИ ТАДҚИҚ ҚИЛИШ****У.О. Кутлиев, М.К. Курбанов, М.К. Каримов,  
И.У. Тангриберганов, К. Отабоева**

Урганч давлат университети Урганч

**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.

**Keywords:** 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 столкновении, 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 полу изолирующего фосфида индия с высоки удельным сопротивлением ( $\rho > 10^7$  Ом-см) создаются полевые транзисторы. На

основой применению монокристаллических фосфид индия нашел в оптоэлектронике для изготовления излучателя 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

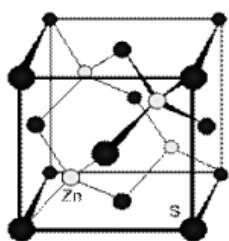


Рис.1. Структура цинковой обманки ZnS.

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 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;  $\theta$  — угол рассеяния;  $\mu = M/m_1$  — отношение масс атомов твердого тела и первичных ионов;  $\chi$  — угол выбивания атома.

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

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

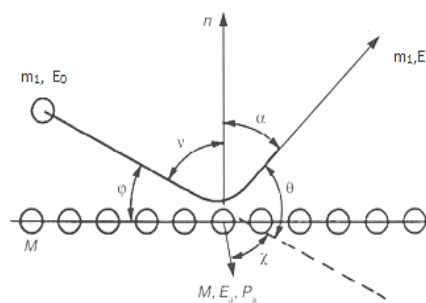


Рис. 2. Схема рассеяния иона атомами на поверхности твердого тела.

где,  $a_{if} = 0,468 \text{ \AA}$ ,  $v$  и  $E_t$  - относительное скорость и энергия атома,  $Z_1$ - и  $Z_2$  - заряд сталкивающихся ионов и атомов,  $v$  - см/с,  $E_t$  - 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  $\chi$  рассеяния в системе центра инерции (Ц-системе):

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

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

$r_{\min}$  - 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  $\chi$  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  $\theta_2$  однозначно зависит от прицельного параметра столкновения и изменяется от 0 до  $\pi/2$ . Угол рассеяния налетающей частицы  $\theta_1$  при  $M_1/M_2 < 1$  также однозначно зависит от прицельного параметра и изменяется от  $\pi$  при  $p = 0$  до 0 при  $p = \infty$ . При  $M_1/M_2 > 1$ , т.е. когда масса рассеивающего атома меньше массы налетающей частицы,  $\theta_1$  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

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

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

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

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

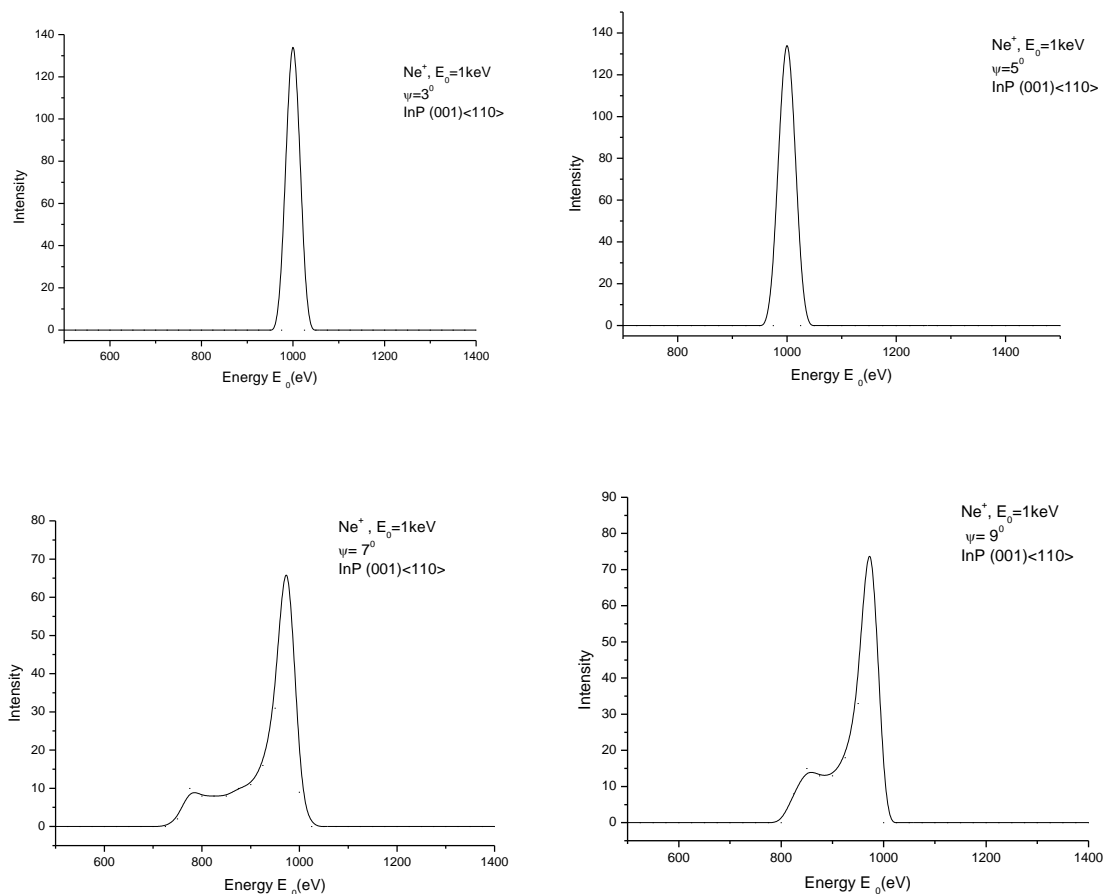


Рис.3. Энергетические распределения рассеянных ионов  $\text{Ne}^+$  с поверхностью InP(001)<110> при  $\psi=3-9^\circ$  и с энергией  $E_0=1$  кэВ.

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

При угле скольжения равной  $\psi=7^\circ$  наблюдается дальнейшее уменьшение интенсивности пика рассеянных частиц с поверхностной атомной цепочки. А также в энергетическом спектре 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  $\psi=9^\circ$ , 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  $\text{Ar}^+$  с поверхностью InP(001)<110> при  $\psi=3-9^\circ$  и с энергией  $E_0=1$  кэВ. В этом случае энергетические распределения рассеянных ионов отличается, чем в случае ионами  $\text{Ne}^+$ .

Видно что, при  $\psi=3^0$  в энергетическом распределений наблюдается пик, относящие к ионам рассеянных от полуканала. Это объясняется тем, что при ионов  $Ar^+$  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.

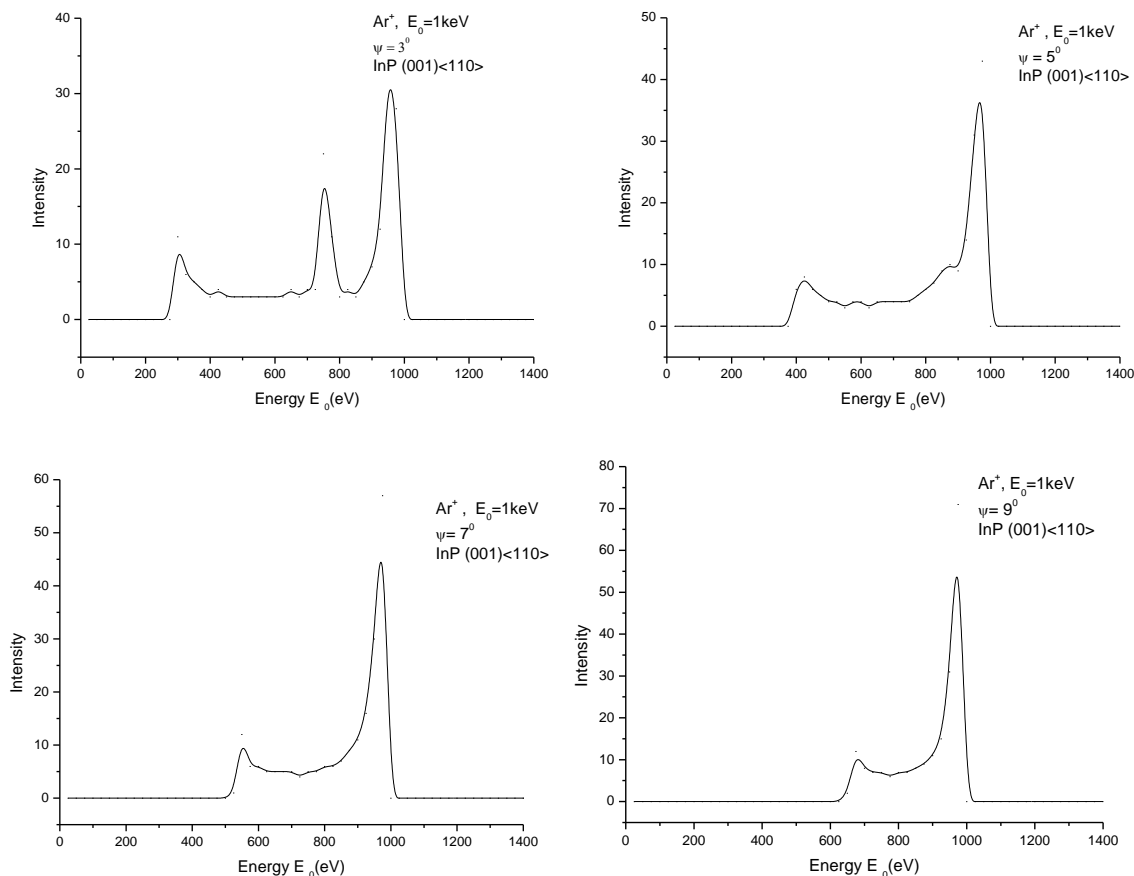


Рис. 4. Энергетические распределения рассеянных ионов  $Ar^+$  с поверхностью  $InP(001)<110>$  при  $\psi=3-9^0$  и с энергией  $E_0=1$  кэВ.

## Заключение

Нами смоделирована процесс рассеяния ионов  $Ar^+$  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 Garc'ia 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. H'ohn, 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'conner, "Low Energy Ion Scattering," Surface Review and Letters, Vol.14, No.1, 2007, pp. 31-41. doi:10.1142/S0218625X07009001
- [7] L. Carl' en, G. F'orre, P. Golubev, B. Jakobsson, A. Kolozhvari, P. Marciniwski, 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.-Т.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.

**Web сайтлар**

- [1] [uchkunk@mail.ru](mailto:uchkunk@mail.ru) ,