

УДК 537.534.3

Математическое моделирование процесса упругого рассеяния медленных ионов поверхностью аморфного твердого тела. Плисс Н.С., Сидоренко Н.Г., Стожаров В.М. // Научное приборостроение. Автоматизация научных исследований. Л.: Наука, 1988, с. 87

Разработан метод, позволяющий рассчитывать на ЭВМ формы пиков одно- и многократно рассеянных ионов. Проведено исследование информативности формы энергетических пиков упруго рассеянных ионов. Показана зависимость асимметрии энергетического пика от плотности поверхностного слоя. Предложена методика использования данной зависимости для эмпирического определения плотности поверхностных атомов твердого тела. Рассчитаны функции распределения глубины проникновения ионов в твердое тело. Лит. - 10 назв., ил. - 7.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА УПРУТОГО РАССЕЯНИЯ МЕДЛЕННЫХ ИОНОВ ПОВЕРХНОСТЬЮ АМОРФНОГО ТВЕРДОГО ТЕЛА

В связи с развитием новых направлений электронной техники, связанных с получением и использованием гетероструктур и интегральных пленочных микросхем, в последнее десятилетие существенно возрос интерес к исследованиям состояния поверхности твердого тела. Это привело к появлению большого числа различных методик анализа поверхности [1-3], каждая из которых несет информацию о том или другом ее свойстве. Спектроскопия обратно рассеянных ионов низких энергий (СОРИНЭ) занимает в ряду этих методик особое место, благодаря своей универсальности, позволяющей в принципе определить состояние поверхности твердого тела, т.е. получить информацию одновременно о четырех ее основных свойствах (элементном составе, кристаллической структуре, структуре и типе поверхностных дефектов и энергетической структуре поверхностных состояний). Кроме того, метод СОРИНЭ является единственным из

всех известных методов анализа поверхности, обладающим уникальным свойством определять состояние поверхности в пределах одного монослоя [4]. Между тем, сложность и многообразие процессов взаимодействия медленных ионов с твердым телом, играющих определяющую роль при анализе поверхности методом СОРИНЭ, ввиду трудности интерпретации экспериментальных результатов не позволяют пока осуществлять этим методом количественные измерения основных характеристик поверхности. В связи с этим теоретический расчет основных процессов взаимодействия при анализе поверхности методом СОРИНЭ представляет несомненный интерес.

Постановка задачи

Метод СОРИНЭ основан на энергетическом анализе медленных однозарядных ионов инертных газов с энергиями в несколько сотен электрон-вольт, упруго отраженных от поверхности в узкий телесный угол. Основная информация, которую получают обычно этим методом, извлекается из интенсивности пиков упруго рассеянных ионов и их энергетического положения [5, 6]. Однако информация, содержащаяся в форме этих пиков, до сих пор не использовалась. Между тем, учет формы пика упруго рассеянных ионов, как будет показано в дальнейшем, позволит получить уникальную информацию о плотности поверхностных атомов в пределах монослоя, которую другими известными методами анализа поверхности получить трудно [1-3]. Такая информация является чрезвычайно важной в исследованиях сверхструктур поверхности полупроводников и металлов, а также при изучении поверхностных фазовых переходов при измерении температуры Дебая поверхности и т.д. [7].

В связи с этим в настоящей работе предпринята попытка методом вычислительного эксперимента выяснить зависимости между исследуемыми свойствами твердого тела и параметрами энергетических пиков упруго рассеянных медленных ионов, в том числе параметрами формы этих пиков. Целью такого исследования является интерпретация экспериментальных данных, получаемых при анализе поверхности методом СОРИНЭ.

Методика расчетов

Математическое моделирование упругого рассеяния медленных ионов аморфной поверхностью твердого тела основано на представлении такой поверхности моделью "плотного газа", на статистическом моделировании точки попадания первичного иона в эллипс отбора (рис.1) и на расчете соответствующих статистических весов, характеризующих вероятность рассеяния на угол θ , который лежит в пределах телесного угла, обеспечивающего свободное прохождение рассеянных ионов через коллиматор и попадание их в энергоанализатор. Вычисление необходимой для таких расчетов классической функции отклонения $\Theta(\beta)$, где β - прицельный параметр, производится при двух следующих основных предположениях, которые согласно современным представлениям являются достаточным приближением в задачах по рассеянию медленных ионов поверхностью твердого тела. Первое предположение касается характера взаимодействия иона с атомом поверхности и заключается в том, что медленные ионы в потенциальном поле атома $V(r)$ упруго рассеиваются по законам классической механики, поскольку их дебройлевская длина волны оказывается намного меньше размеров эффективной области рассеяния. При этом в задачах по рассеянию ионов низких энергий обычно используется потенциал взаимодействия Фирсова [6, 8]:

$$V_{\phi}(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} \Phi'\left(\frac{r}{a}\right), \quad (1)$$

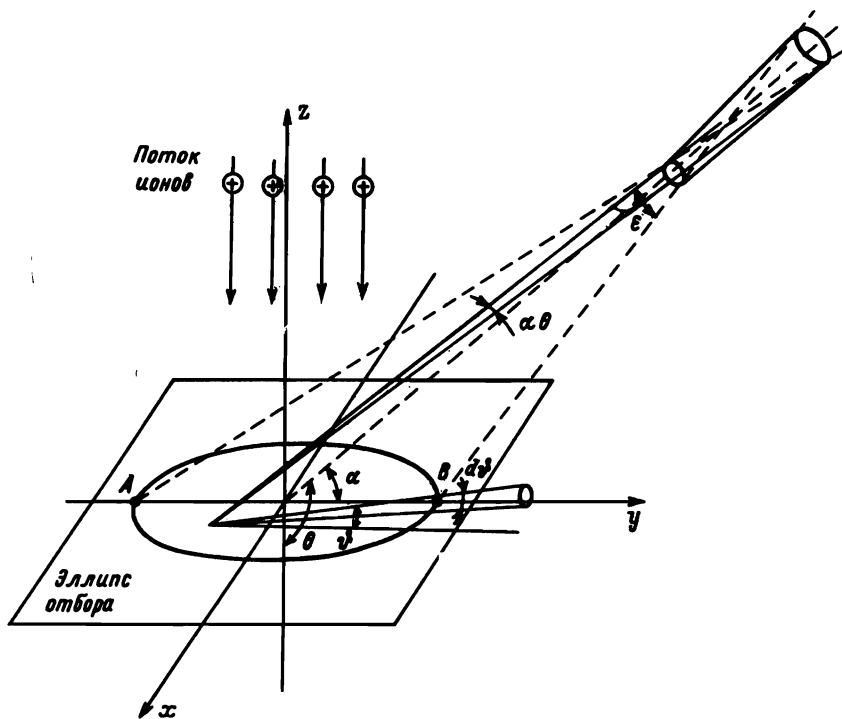


Рис.1. Геометрия рассеяния ионов для аморфной модели поверхности

где $\Phi'(\frac{r}{a})$ - функция экранировки Томаса-Ферми в аппроксимации Фирсова;
 Z_1 - заряд ядра первичного иона; Z_2 - заряд ядра рассеивающего атома;
 a - параметр экранировки.

Второе предположение относится к возможности описания рассеяния ионов малых энергий вплоть до $E_0 = 50$ эВ моделью парных столкновений [9].

Расчет энергетических спектров упруго рассеянных ионов производится в настоящей работе на основе двух различных моделей аморфной поверхности: модели плоского случайного поля и модели квазиобъемного случайного поля. Физически это означает, что при использовании первой модели поверхности учитываются только чисто однократные акты упругого рассеяния ионов атомами поверхности, в то время, как вторая модель предполагает также учет и многократно рассеянных ионов.

Во всех расчетах, произведенных в настоящей работе, использовалась одна и та же геометрия рассеяния, характеризующаяся нормальным падением широкого и однородного (по плотности и направлению) пучка первичных ионов и телесным углом ϵ в направлении рассеяния, образованным входным коллиматором энергоанализатора (рис.1). Проекция конуса собственной апертуры коллиматора на плоскость ТТ, совпадающая с исследуемой поверхностью твердого тела, образует в этой плоскости эллипс отбора. Апертура коллиматора $\Delta\theta$ считается малой. Поэтому интервал "разрешенных" углов $d\theta$ (т.е. тех углов, при которых рассеянный ион попадет через коллиматор в энергоанализатор) для любой точки эллипса также мал. Очевидно малым также будет и угол $d\theta'$, являющийся проекцией угла $d\theta$ на плоскость ТТ. Углы $d\theta$ и $d\theta'$ будут использоваться в расчетах для вычисления вероятности Р.

Модель плоского случайного поля

Эта модель, как уже указывалось, используется для расчета чисто однократного рассеяния ионов атомами монослоя поверхности. Она характеризуется плотностью $\rho(b)$ распределения вероятностей для значений прицельного параметра b (расстояние от случайно выбранной точки в эллипсе отбора до ближайшего рассеивающего центра), определяемой законом Пуассона:

$$\rho(b) = 2\pi\lambda b e^{-\lambda\pi b^2}, \quad (2)$$

где λ — величина, обратная среднему расстоянию между атомами поверхности.

По углам θ , $d\theta$ и $d\nu$ определяется вероятность P попадания иона в энергоанализатор из выбранной точки эллипса отбора (при упомянутой плотности $\rho(b)$):

$$P = \rho[b(\theta)] b'(\theta) d\theta \frac{d\nu}{2\pi}, \quad (3)$$

где $b(\theta)$ — функция, обратная к классической функции отклонения $\theta(b)$.

Подставляя (2) в (3), получим:

$$P(\theta) d\theta d\nu = \lambda b(\theta) e^{-\lambda\pi [b(\theta)]^2} b'(\theta) d\theta d\nu. \quad (4)$$

Функция $P(\theta) d\theta d\nu$ имеет смысл статистического веса, характеризующего вероятность рассеяния иона с прицельным параметром $b(\theta)$ из какой-то выбранной точки эллипса отбора в направлении энергоанализатора (θ, ν) в пределах $d\theta d\nu$. Она используется при построении энергетической гистограммы рассеяния ионов, имитирующей пик энергетического спектра упруго рассеянных ионов. Необходимые при этом функции $b(\theta)$ и $E(\theta)$ рассчитываются по известным формулам классической механики:

$$E(\theta) = \frac{[\cos\theta + \sqrt{\mu^2 - \sin^2\theta}]^2}{(1 + \mu)^2}, \quad (5)$$

где E_0 — начальная энергия иона; $\mu = M_2/M_1 > 1$ — отношение массы атома мишени M_2 к массе иона M_1 .

$$\theta(b) = \pi - \frac{2b}{r_0} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin\psi d\psi}{\sqrt{1 - \left(\frac{b}{r_0} \cos\psi\right)^2 - \frac{V(r/\cos\psi)}{E_n}}}, \quad (6)$$

где r_0 — корень уравнения

$$1 - \left(\frac{b}{r}\right)^2 - \frac{V(r)}{E_n} = 0.$$

$$E_n = E_0 \frac{\mu}{\mu + 1},$$

$V(\mu)$ — потенциал взаимодействия (1); угол ψ — проекция угла рассеяния на плоскость ТТ (рис.1).

Вычисление интеграла (6) производилось по обобщенной формуле Симпсона с 15 узлами.

Перед началом расчета гистограммы заготавливалась таблица зависимостей θ от β , рассчитанных по формуле (6), которая затем использовалась как таблица зависимостей β от θ . Эта таблица строилась в промежутке изменения значений θ от θ_{\min} до θ_{\max} , где θ_{\min} и θ_{\max} — соответственно минимальный и максимальный углы рассеяния, получающиеся при отражении ионов от точек А и В эллипса отбора (рис.1). Для построения гистограммы надо отрезок (E_{\min}, E_{\max}) , где E_{\min} и E_{\max} — энергии, вычисленные по формуле (5) для углов θ_{\min} и θ_{\max} соответственно, разбить на заданное число K ячеек.

Процесс построения энергетической гистограммы отраженных ионов начинается с разыгрывания i -й точки падения иона, равномерно распределенной в эллипсе отбора. Эта точка определяет угол θ_i , а, следовательно, и энергию E_i рассеянного иона; i — номер иона; рассеяние которого моделируется, пробегает натуральный ряд значений от 1 до N . Значение N выбирается из соображений разумного расхода машинного времени (в практических расчетах N составляет от нескольких сот до нескольких тысяч, причем, как показывается в математической статистике [10], наиболее оптимально $K \approx \sqrt[3]{N}$).

По вычисленному значению E_i определяется ячейка, в которую далее следует поместить соответствующий статистический вес. Этот статистический вес вычисляется по формуле (4), где $\Delta \beta = \beta'(\theta) d\theta$ вычисляется по таблице соответствия ($\beta \leftrightarrow \theta$), описанной выше и построенной на основе формулы (6). Использование изложенного метода статистических весов позволяет на несколько порядков сократить расход машинного времени и делает метод статистического моделирования пригодным к использованию в данной задаче.

По описанному алгоритму разработана программа *ION DB1*, позволяющая рассчитывать энергетические спектры ионов, однократно отразившихся от поверхности в направлении энергоанализатора, с последующим построением спектра упруго рассеянных ионов на графопостроителе.

Результаты расчета

На рис.2 в качестве примера представлены энергетические гистограммы для Al и Si при $E_0 = 400$ эВ и $\theta = 135^\circ$. Они представляют собой отдельные пики, ширина ΔE которых должна определяться крайними точками А и В эллипса отбора (рис.1), т.е. апертурой коллиматора $\Delta \theta$.

Как следует из соотношения (4), форма энергетического пика упруго рассеянных ионов должна зависеть от параметра λ , имеющего смысл плотности рассеивающих центров.

С целью исследования такой зависимости был предпринят вычислительный эксперимент, заключавшийся в том, что при сохранении всех прочих условий (E_0, θ, μ) в широких пределах изменялось значение ρ_0 плотности поверхностных атомов (центров рассеяния в эллипсе отбора). По энергетическим гистограммам, рассчитанным по программе *ION DB1*, вычислялись первые четыре момента пиков, определяющие их форму: средняя энергия \bar{E} , дисперсия ΔE , асимметрия μ_3 и эксцесс μ_4 [10] по формулам:

$$\bar{E} = \frac{\sum_i E_i x_i}{\sum_i x_i}, \quad (7)$$

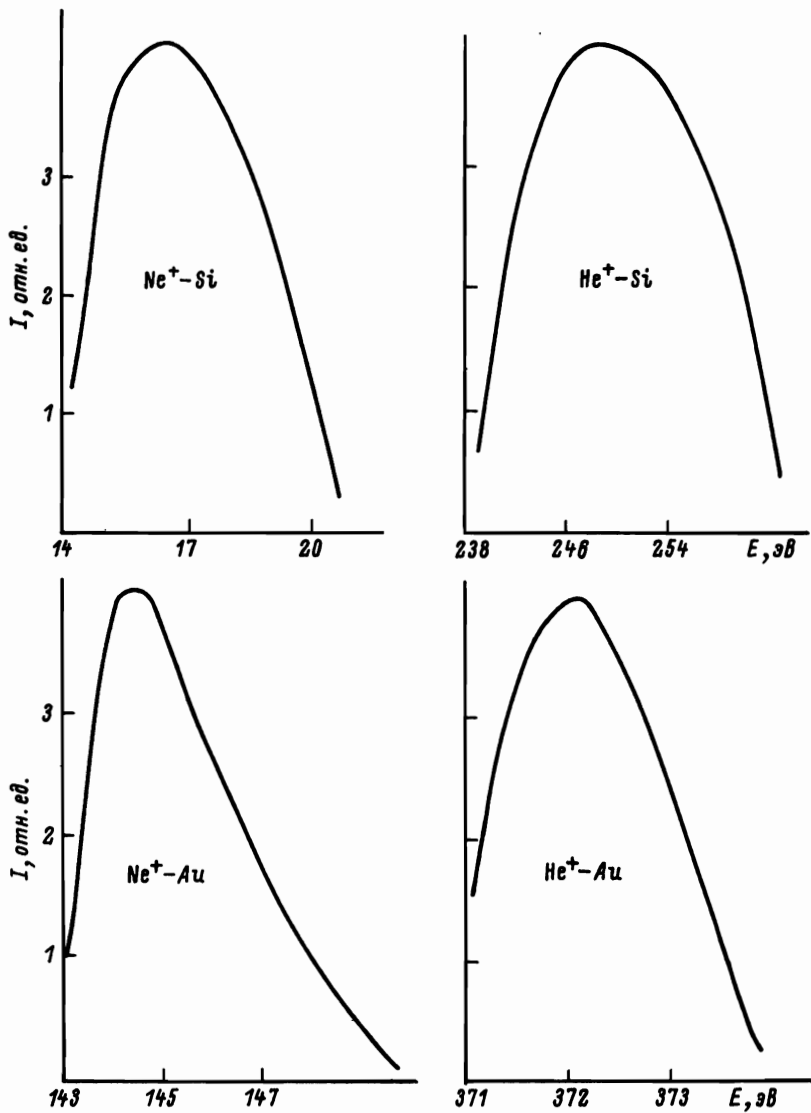


Рис.2. Гистограммы интенсивности однократно рассеянных ионов. $E_0=400$ эВ, $\theta=135^\circ$

$$DE = \frac{\sum_i (E_i - \bar{E})^2 x_i}{\sum_i x_i}, \quad (8)$$

$$\mu_3 = \frac{\sum_i (E_i - \bar{E})^3 x_i}{\sum_i x_i}, \quad (9)$$

$$\mu_4 = \frac{\sum_i (E_i - \bar{E})^4 x_i}{\sum_i x_i}, \quad (10)$$

где E_i и x_i - текущие значения энергии и интенсивности энергетического пика соответственно (x_i - сумма статистических весов в i -й ячейке гистограммы). Сум-

мирование производится по всем n ячейкам гистограммы. Вычисленные значения этих моментов сведены в таблицу.

Значения моментов энергетических пиков упруго рассеянных ионов Ne^+ от поверхности Al при разных энергиях ($\theta = 135^\circ$)

$E_0, \text{эВ}$	$\bar{E}, \text{эВ}$	\bar{E}/E_0	$DE, \text{эВ}^2$	$DE/E_0^2 \cdot 10^{-4}$	$\mu_3, \text{эВ}^3$	$\mu_3/E_0^3 \cdot 10^9$	$\mu_4, \text{эВ}^4$
$\rho_0 = 0,205949$							
200	140,476	0,7024	1,9707	0,4927	0,04316	5,39326	7,63337
400	280,950	0,7024	7,4118	0,4651	0,82137	12,83441	110,8557
800	561,999	0,7025	31,327	0,4895	3,20891	6,24300	1906,195
1000	702,350	0,7024	47,610	0,4761	2,00495	2,00495	4479,761
1500	1053,90	0,7026	109,07	0,4847	3,38285	1,00232	23347,79
2000	1404,85	0,7024	194,79	0,4870	3,64342	0,45543	74032,70
$\rho_0 = 4,855577$							
200	139,662	0,6983	1,6071	0,40177	1,30821	163,5262	6,6398
400	279,844	0,6996	6,6774	0,41734	7,81510	122,1109	103,9638
800	560,418	0,7005	29,744	0,46474	51,9679	101,1049	1858,451
1000	700,681	0,7007	46,068	0,46068	76,7964	76,7964	4379,886
1500	1051,97	0,7007	106,78	0,47460	216,433	64,1283	23058,20
2000	1402,76	0,7014	192,03	0,48008	424,980	53,1225	73398,08

Относительные средняя энергия \bar{E}/E_0 и дисперсия DE/E_0^2 практически не зависят от энергии E_0 первичных ионов и плотности рассеивающих центров ρ_0 , в то время как относительная асимметрия зависит от плотности ρ_0 , а при больших ρ_0 и от энергии E_0 первичных ионов. На рис.3 представлены зависимости μ_3/E_0^3 от плотности

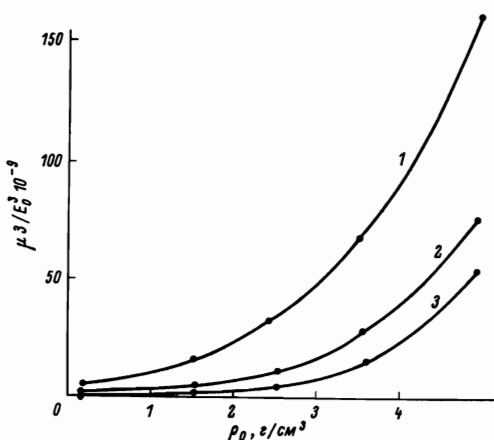


Рис.3. Зависимости относительной асимметрии рассчитанных энергетических пиков от плотности поверхностных атомов ρ_0 для случая рассеяния ионов Ne^+ на поверхности Al при $\theta = 135^\circ$, $E_0, \text{эВ}$:
1 - 200; 2 - 1000; 3 - 2000

ти ρ_0 рассеивающих центров для различных энергий E_0 . Независимо от E_0 характер этих зависимостей одинаковый и выражается в нелинейном возрастании значений μ_3/E_0^3 с увеличением ρ_0 . Причем, первая производная зависимостей $\mu_3/E_0^3(\rho_0)$, характеризующая чувствительность S_0 метода определения поверхностной плотности по асимметрии энергетического пика упруго рассеянных ионов, также нелинейно растет с увеличением ρ_0 и уменьшением E_0 (рис.4). Отсюда следует, что наиболее благоприятные с точки зрения чувствительности метода определения поверхностной плотности экспериментальные условия - это область больших $\rho_0 > 3 \text{ г/см}^3$ и малых $E_0 < 1000 \text{ эВ}$. Например, при $E_0 = 200 \text{ эВ}$ и $\rho_0 = 4,5 \text{ г/см}^3$ чувствительность $S_0 = (d\mu_3/d\rho_0)\rho_0^3 = 0,1 \text{ г/см}^3$, если принять $\delta_3 = 10^{-8}$, где $\delta_3 = \mu_3/E_0^3$.

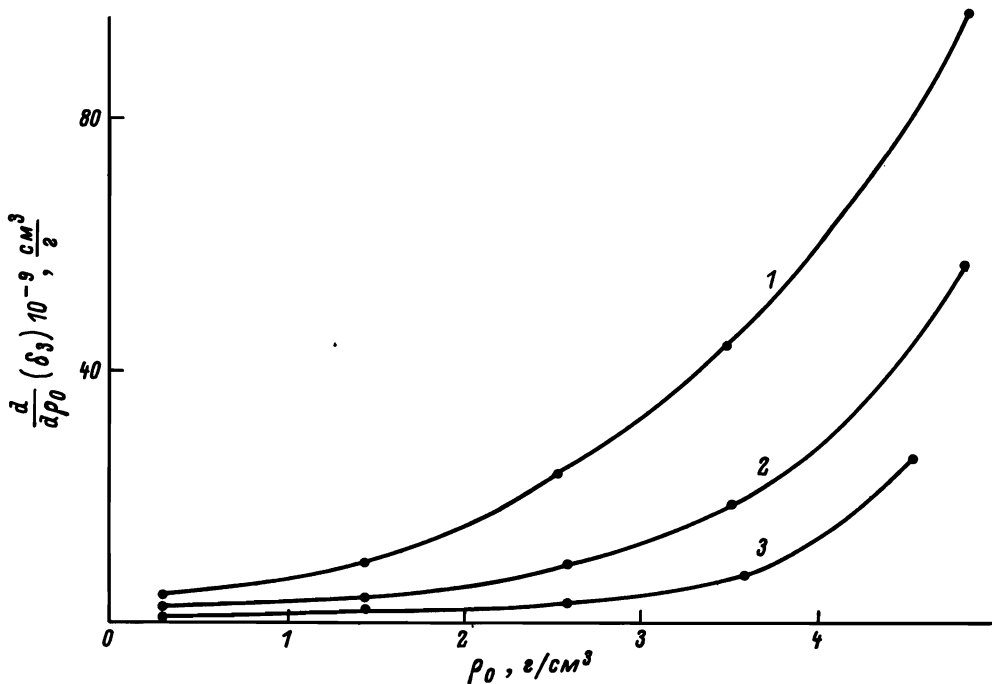


Рис.4. Зависимости первой производной $\frac{d}{d\rho_0} \left(\frac{\mu^3}{E^3} \right)$ от ρ_0 для случая рассеяния ионов Ne^+ на поверхности Au при $\theta = 135^\circ$. E_0 , эВ: 1 - 200; 2 - 1000; 3 - 2000

При использовании данного метода для практического определения плотности поверхностных атомов необходимо проведение предварительных расчетов на ЭВМ с целью построения градуировочных кривых $\delta_3(\rho_0)$, которые можно рассматривать как справочный материал для экспериментатора.

Модель квазиобъемного случайного поля

Эта модель представляет собой аморфный поверхностный слой твердого тела толщиной несколько атомных слоев и, как указывалось выше, предполагает учет многократного рассеяния ионов. Благодаря применению в расчетах такой модели оказывается также возможным учесть проникновение их в глубь твердого тела и рассчитать такую важную характеристику для физики твердого тела, какой является максимальная глубина проникновения в твердое тело ионов, дающих вклад в интенсивность пика упруго рассеянных ионов.

Процесс построения гистограмм энергетического распределения упруго рассеянных ионов и зависимости интенсивности упругого рассеяния ионов от глубины рассеяния, как и в предыдущем случае однократного рассеяния, основан на статистическом моделировании точки падения первичного иона. Однако в отличие от предыдущего случая ионы, которые проникают в глубь твердого тела, также с некоторой вероятностью могут рассеяться в направлении энергоанализатора и быть "зарегистрированы" в спектре, если они попадают в конус рассеяния, образуемый входным коллиматором энергоанализатора. Для учета упругого рассеяния ионов из глубины твердого тела вводится длина свободного пробега как случайная величина, которая для модели квазиобъемного случайного поля разыгрывается по формуле

$$l = -l_{cp} \ln(1 - \gamma), \quad (11)$$

где γ - случайное число, равномерно распределенное на отрезке; l_{cp} - средняя длина свободного пробега иона.

Средняя длина свободного пробега зависит от энергии иона и вычисляется по формуле, полученной из простых геометрических соображений (рис.5).

$$l_{cp} = L_{cp} - b_{cp} \operatorname{ctg} \frac{\pi - \theta_{cp}}{2}, \quad (12)$$

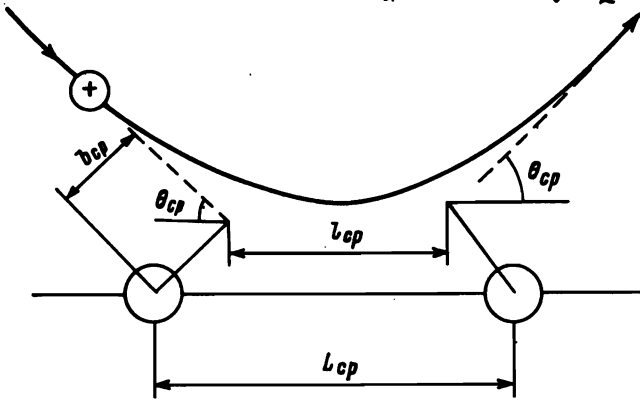


Рис.5. К расчету средней длины свободного пробега иона l_{cp}

где b_{cp} - среднее прицельное расстояние; θ_{cp} - средний угол рассеяния, соответствующий среднему прицельному расстоянию b_{cp} ; L_{cp} - толщина одного атомного слоя, которая полагается равной среднему расстоянию между атомами, т.е. $L_{cp} = \lambda^{-1}$. Среднее прицельное расстояние b_{cp} вычисляется как среднее значение расстояния от центра круга радиуса $L_{cp}/2$ до случайной точки, равномерно рас-

пределенной в этом круге: $b_{cp} = \frac{L_{cp}/2}{\sqrt{2}}$.

Для расчета энергетической гистограммы каждой разгруппируемой точке квазиобъемного поля необходимо приписать статистический вес Q равный:

$$Q = RPS, \quad (13)$$

где P - вероятность попадания иона из выбранной точки эллипса в энергоанализатор, определяемая соотношением (4); R - вероятность того, что ион, рассеявшись в точке z в глубине поверхностного слоя в направлении энергоанализатора, пройдет свободно до поверхности: $R = \exp(-L / l_{cp})$, где L - расстояние от точки рассеяния z до поверхности твердого тела в направлении энергоанализатора; S - доля ионного потока, дошедшая до точки z , лежащей в глубине поверхностного слоя.

Для расчета энергетических спектров ионов, испытавших многократное рассеяние, и зависимости интенсивности рассеянных ионов от глубины рассеяния была разработана программа ION002.

Результаты расчета

На рис.6 представлены энергетические гистограммы упруго рассеянных ионов He^+ и Ne^+ при $E_0 = 400$ эВ от поверхности Si , рассчитанные по программе ION002. Сравнение с соответствующими гистограммами, рассчитанными по программе ION001, показывает, что учет многократного рассеяния мало изменяет ширину и форму основного энергетического пика и приводит лишь к появлению в гистограмме "хвостов" и к изменению интенсивности основного пика. Поэтому в первом приближении можно считать, что учет многократного рассеяния оставляет форму энергетического спектра упруго рассеянных ионов без изменения. Это является естественным следствием малости глубины проникновения медленных ионов в твердое тело.

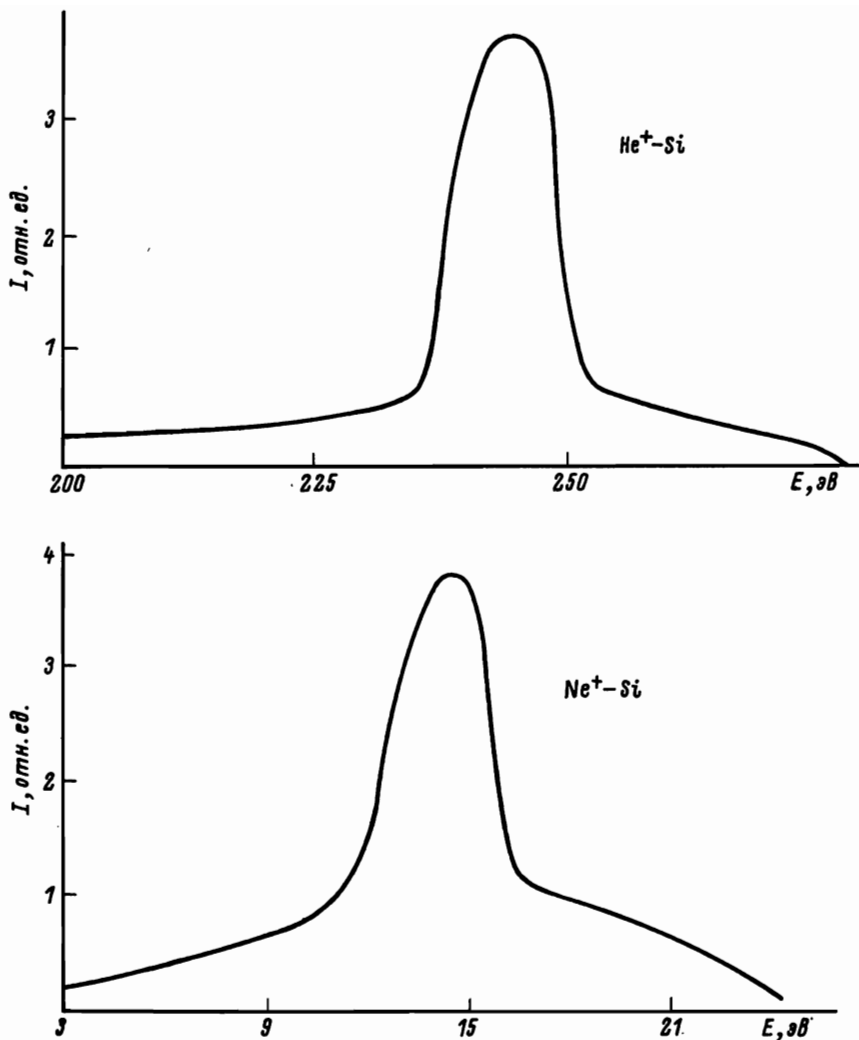


Рис.6. Гистограммы интенсивности многократно рассеянных ионов, $E_0=400$ эВ, $\theta=135^\circ$

Расчет толщиной зависимости интенсивности $I(d)$ упруго рассеянных ионов показал, что в диапазоне E_0 от 200 до 1000 эВ независимо от $\alpha \sim 90\%$ всех ионов упруго рассеивается в слое толщиной 2 ат.сл. (рис.7). Это подтверждает, что метод СОРИНЭ является методом анализа поверхностного монослоя.

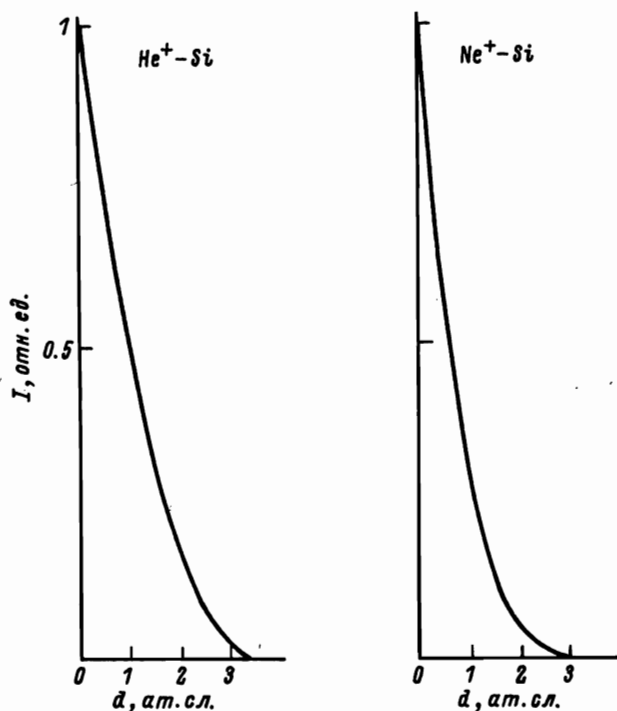


Рис.7. Рассчитанные толщинные зависимости интенсивности $I(\alpha)$ упруго рассеянных ионов He^+ и Ne^+ от поверхности Si , $E_0=400$ эВ, $\theta=135^\circ$

ЛИТЕРАТУРА

1. Электронная и ионная спектроскопия твердых тел/Под ред.Л.Фирмэнса, Дж.Вэнника, В.М.Декейсера. М.: Мир, 1981.
2. Wilsch H.//Fest Körperprobleme. 1978. В.109.
3. Nigatberger M.//Adv.in Elect.and Elect.Phys.1981. V.56. P.291.
4. Галль Р.Н., Стожаров В.М.//Научное приборостроение. Л.: Наука, 1983. С.3.
5. Braun P., Rüdener F., Viehböck F.//Adv.in Elect.and Elect.Phys.1981.V.57.P.23
6. Волков С.С., Толстогузов А.Б. Спектроскопия обратно рассеянных ионов низких энергий. М.: ЦНИИ "Электроника", 1981, вып.15. Сер.7. Обзоры по электронной технике.
7. Проблемы физики поверхности полупроводников/Под ред.О.В.Снитко. Киев, 1981.
8. Фирсов О.Б.//ДАН СССР. 1963. Т.169. С.1311.
9. Арифов У.А. Взаимодействие атомных частиц с поверхностью твердого тела. Ташкент, 1968.
10. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Курс статистического моделирования. М.: Наука, 1976.