

На правах рукописи

САБЛИН ВИКТОР АЛЕКСАНДРОВИЧ

**РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВ ИССЛЕДОВАНИЯ
МОНОАТОМНОГО СЛОЯ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ
ИОНАМИ НИЗКИХ И ГИПЕРТЕРМАЛЬНЫХ ЭНЕРГИЙ**

Специальность 01.04.10 – “Физика полупроводников”

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Рязань 2011

Работа выполнена в ФГБОУ ВПО «Рязанский государственный радиотехнический университет»

Научный руководитель

доктор физико-математических наук,
профессор Волков Степан Степанович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
профессор Шешин Евгений Павлович
кандидат химических наук
Шишкин Виктор Александрович

Ведущая организация

Калужский филиал Московского государственного
технического университета им. Н. Э. Баумана

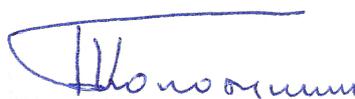
Защита состоится «21» июня 2011 г. в зале ученого совета, аудитория 235, в 11 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.211.03 в ФГБОУ ВПО «Рязанский государственный радиотехнический университет» по адресу: 390005, г. Рязань, уг. Гагарина, д. 59/1.

Отзывы в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просим направлять по адресу: 390005, г. Рязань, ул. Гагарина, д. 59/1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВПО «Рязанский государственный радиотехнический университет»

Автореферат разослан «___» _____ 2011 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
д-р техн. наук, профессор



Б. И. Колотилин

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Большое количество физических процессов, протекающих в современных приборах, связано с поверхностью полупроводниковых материалов, её характеристиками и откликом на внешние воздействия. Широкое распространение тонкопленочных технологий, гетероструктур, а также нанотехнологий привело к необходимости изучения влияния интерфейсов (границ раздела, поверхности) на параметры изготавливаемых приборов. Физические свойства поверхности, особенно полупроводников, принципиально отличаются от свойств объема. Наличие границы раздела, которая может быть и внутренней в случае контакта материалов с разными физическими свойствами (например, полупроводник металл), приводит к изменению пространственного расположения атомов на поверхности и электронного распределения в приповерхностной области. В случае многокомпонентных материалов концентрации элементов на поверхности могут существенно отличаться от объемных. Состав моноатомного слоя поверхности оказывает влияние на величину работы выхода, высоту потенциального барьера и, в случае полупроводниковых материалов, определяет изгиб зон. Совершенство структуры этого слоя сказывается на стабильности характеристик прибора. Таким образом, изменение состава и структуры моноатомного слоя поверхности позволяет формировать электронные свойства полупроводникового материала, используя в качестве модифицирующих материалов металлы и диэлектрики. Это позволяет создавать гетероструктуры, свойства которых принципиально не могут быть получены при использовании свойств объема полупроводников. Поэтому получение как можно более полной информации о составе, структуре, состоянии поверхности и протекающих на ней физических процессах является важной научной задачей.

Для диагностики состава и структуры моноатомных пленок используются методы электронной и рентгеновской спектроскопии, а также метод статической вторично-ионной масс-спектроскопии. Однако глубина анализируемого слоя в этих методах больше размера атома, что может приводить к ошибкам при расшифровке экспериментальных результатов. Достоверные сведения о составе монослоя поверхности позволяет получать метод регистрации отраженных ионов вследствие большого сечения рассеяния, сравнимого с размером постоянной решетки, а также из-за большой нейтрализации ионов при соударении, в результате чего регистрируются преимущественно ионы, претерпевшие однократное (парное) соударение с атомом поверхности. В диапазоне низких и гипертермальных энергий зондирование поверхности ионами позволяет получать сведения о составе, структуре и взаимном расположении атомов одного внешнего атомного слоя, что недоступно другим методам анализа. При таких начальных энергиях ионов возникают трудности аппаратной реализации ана-

литических приборов, связанные с трудностями формирования пучков ионов и регистрацией малоинтенсивных рассеянных потоков, и при расшифровке получаемых спектров, связанные с необходимостью учета ряда физических факторов, влиянием которых при более высоких энергиях можно было пренебречь.

Экспериментальные результаты по рассеянию ионов инертных газов He и Ne от полупроводниковых (Si(111), As, InAs(100), GaAs) материалов показали, что парный характер рассеяния сохраняется до начальных энергий ионов ниже 10 эВ (до 1.5 – 2 эВ). В ряде экспериментальных и теоретических работ описаны результаты, которые интерпретируются как отклонение от парного характера взаимодействия. Это происходит при начальных энергиях ионов ниже 100 эВ и выражается в постепенном увеличении относительной энергии (E_1/E_0) рассеянных ионов с уменьшением энергии налетающих ионов, что объясняется отражением иона в результате одновременного соударения с несколькими атомами (многоатомное рассеяние) из-за увеличения сечения взаимодействия при уменьшении начальной энергии ионов. Наряду с этим в спектрах ионов инертных газов (He, Ne), рассеянных от кристаллических и поликристаллических поверхностей полупроводников (Si, As, InAs, GaAs), появляется пик, аналогичный пику упруго отраженных электронов. Энергия пика равна начальной энергии ионов, а ширина пика более чем на порядок меньше ширины парного пика. Природа данного пика не определена. Неясным остается и наличие парных пиков при столь низких энергиях. Не изучено влияние на вид спектра теплового движения атомов и энергетических связей между атомами полупроводника, вклад которых в результат рассеяния возрастает с уменьшением начальной энергии ионов.

Таким образом, физический механизм взаимодействия ионов с поверхностью в диапазоне низких и гипертермальных энергий с учетом особенностей полупроводниковых материалов остается до конца не выясненным.

Целью работы являлась разработка физических и методических основ исследования моноатомного слоя поверхности полупроводниковых материалов ионами низких и гипертермальных энергий (от 5000 до 2 эВ).

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

- 1) сравнение возможностей методов анализа поверхности;
- 2) анализ существующих потенциалов парного взаимодействия для определения влияния, оказываемого выбором потенциала, на результат рассеяния иона от атома или поверхности полупроводника;
- 3) разработка программных средств численного моделирования парного, парно-последовательного и последовательно-группового взаимодействия иона с одиночным атомом или группой атомов поверхности полупроводников;

4) изучение с помощью моделирования особенностей парного и последовательно-группового взаимодействия ионов гипертермальных энергий с атомами поверхности полупроводников;

5) теоретическое изучение и моделирование физических механизмов взаимодействия ионов гипертермальных энергий с атомами поверхности полупроводников, приводящих к рассеянию без потерь энергии;

6) разработка теоретической модели формирования спектра рассеяния ионов низких и гипертермальных энергий, содержащего пика парного рассеяния и пик рассеяния без потерь энергии, от внешнего монослоя поверхности полупроводников;

7) разработка методических основ анализа одного внешнего моноатомного слоя поверхности полупроводников ионами низких и гипертермальных энергий для определения элементного состава, взаимного расположения атомов и структурно-фазового (кристаллического или аморфного) состояния внешнего и приповерхностных слоев;

8) исследование поверхности полупроводников (Si, GaAs) с применением разработанных средств анализа.

Научная новизна

1. Теоретически обоснована физическая модель взаимодействия ионов гипертермальных энергий с поверхностью (1 – 3 монослоя) полупроводниковых материалов, которая заключается в рассеянии иона от общей эквипотенциальной поверхности группы поверхностных атомов (поверхностного кластера) и позволяет объяснить наличие в спектрах рассеяния гипертермальных ионов (< 80 эВ) от кристаллических поверхностей полупроводниковых материалов (Si, InAs) пика рассеяния без потерь энергии.

2. Теоретически обосновано введение в формулу количественного анализа метода спектроскопии обратно рассеянных ионов дополнительного безразмерного коэффициента, который изменяется в пределах от 1 до 5, учитывающего влияние поступательного кинетического движения атомов поверхности с тепловыми скоростями на величину сечения рассеяния и интенсивность пика парного упругого рассеяния, что повышает достоверность количественного анализа в диапазоне низких и гипертермальных энергий.

3. Разработаны методические основы диагностики элементного состава и структуры внешнего моноатомного слоя поверхности полупроводников, учитывающие поступательное кинетическое движение атомов поверхности с тепловыми скоростями, наличие связей между атомами и анизотропию взаимного расположения атомов, ионными пучками низких и гипертермальных энергий в диапазоне от 2 до 5000 эВ.

4. Разработаны теоретическая модель, алгоритмы и программные средства численного моделирования рассеяния ионов поверхностью полупроводников, которые отличаются от существующих учетом особенностей

взаимодействия в диапазоне энергий от 2 до 5000 эВ, а именно учетом кинетической энергии теплового движения атомов и связей между атомами полупроводника, и позволяют исследовать и моделировать спектры рассеяния, состоящие из пиков парного рассеяния и пика рассеяния без потерь энергии, и определять на основе экспериментальных данных элементный состав, структуру и структурно-фазовое состояние внешнего монослоя и двух-трех последующих слоев поверхности полупроводников.

Достоверность полученных результатов обеспечена применением классических уравнений математической физики, применением для их решения обоснованных и проверенных численных методов, а также соответствием разработанных моделей и расчетных результатов экспериментальным данным.

Практическая ценность работы заключается в следующем.

1. Разработаны методические основы диагностики поверхности полупроводников, которые впервые обеспечивают определение кристаллической или аморфной фазы (структурно-фазовое состояние) в очень тонком приповерхностном слое (до монослоя).

2. Уточнена методика количественного анализа элементного состава поверхности введением безразмерного коэффициента (варьирующегося в пределах 1 – 5) относительного изменения величины сигнала в пике из-за влияния теплового движения атомов поверхности на форму пика рассеяния.

3. Разработаны программно-методические средства диагностики поверхности, позволяющие определять оптимальные режимы анализа поверхности за счет моделирования энергетических спектров анализируемых материалов на основе известных физических процессов взаимодействия ионов с поверхностью, что приводит к уменьшению времени и повышению достоверности анализа.

4. Разработаны методические средства, которые позволяют проводить анализ внешних монослоев металлов и диэлектриков, а также определять фоновые примеси в сверхчистых материалах, используя диффузионные и сегрегационные процессы при нагреве.

Положения и результаты, выносимые на защиту

1. Методические основы диагностики поверхности полупроводников методом спектроскопии обратно рассеянных ионов низких энергий, позволяющие определять элементный состав, взаимное расположение атомов, структурно-фазовое состояние внешнего монослоя поверхности, а также зарядовое состояние адатомов и энергию межатомных связей на поверхности полупроводников, что позволяет анализировать зонную структуру поверхности.

2. Средства численного моделирования взаимодействия зондирующих ионов с поверхностью полупроводников и моделирования физических процессов на поверхности и в приповерхностных слоях, учитывающие пространственное расположение атомов поверхности, поступательное кинетическое движение атомов поверхности с тепловыми скоростями, а также наличие связей между атомами полупроводника и позволяющие получать спектры рассеяния, состоящие из пиков парного рассеяния и пика рассеяния без потерь энергии и определять на основе экспериментальных данных элементный состав, структуру и структурно-фазовое состояние внешнего монослоя и двух-трех последующих слоев поверхности полупроводников.

3. Уточнение формулы количественного анализа метода спектроскопии обратно рассеянных ионов низких энергий введением дополнительного коэффициента, учитывающего тепловое движение атомов в сочетании с аппаратными факторами геометрии рассеяния, что изменяет относительную величину пика в зависимости от условий эксперимента в пределах 1 – 5 раз.

4. Физический механизм формирования пика рассеяния без потерь энергии, обнаруженного экспериментально на поверхности Si и InAs, который заключается в рассеянии ионов от общих эквипотенциальных поверхностей групп поверхностных атомов (поверхностных кластеров), формируемых на поверхности динамически в результате реакции электронной подсистемы поверхности полупроводников на налетающие ионы с энергией < 80 эВ.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы были представлены на 3 международных конференциях: XVI международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП–2003» (Звенигород, 2003), XVII международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП–2005» (Звенигород, 2005), XVIII международной конференции «Взаимодействие ионов с поверхностью ВИП–2007» (Звенигород, 2007).

Публикации: по теме диссертации опубликовано 7 научных статей, 4 тезиса докладов в сборниках материалов международных конференций.

Структура и объем диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, 4-х глав, заключения, библиографического списка из 130 наименований и приложения. Работа содержит 184 страницы, 58 рисунков, 13 таблиц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулирована её цель, отражены научная новизна и практическая ценность, представлены результаты, выносимые на защиту.

Первая глава. Поверхность полупроводниковых материалов отличается от объема изменением пространственного расположения атомов и состава приповерхностных слоев, а также наличием поверхностных локализованных состояний. В результате электронные и физико-химические свойства поверхности существенно отличаются от объемных. Это приводит к тому, что поверхность полупроводника становится важным физическим объектом, уникальные свойства которого активно используются в элементах и приборах электронной техники.

Для исследования элементного состава и структуры поверхности используются следующие методы анализа. Метод электронной оже-спектроскопии (ЭОС) является наиболее экспрессным методом анализа с высокой достоверностью расшифровки спектров. Метод вторичной ионной масс-спектрометрии (ВИМС) основан на распылении мишени и является наиболее чувствительным к объемным примесям. Метод рентгено электронной спектроскопии (РЭС) позволяет определять энергию химических связей. Методы дифракции быстрых и медленных электронов (ДБЭ и ДМЭ) позволяют наблюдать трансляционную симметрию поверхности. Метод спектроскопии обратно рассеянных ионов низких энергий (СОРИНЭ) из-за большого значения сечения ионно-атомного рассеяния и регистрации преимущественно однократно рассеянных ионов позволяет анализировать только внешний моноатомный слой поверхности. По результатам анализа была составлена таблица сравнения характеристик перечисленных методов (таблица 1). Из приведенного анализа возможностей методов следует, что единственным методом анализа поверхности, позволяющим достоверно определять элементный состав, структуру (взаимное расположение атомов) и структурно-фазовое (кристаллическое или аморфное) состояние внешних моноатомных слоев поверхности полупроводников и материалов микроэлектроники, является метод СОРИНЭ.

Поэтому в главе также подробно рассмотрены способы, используемые для описания взаимодействия частиц (ионов и атомов) между собой и с твердым телом. Рассмотрены аппаратные и физические факторы, влияющие на формирование спектров рассеяния. Описаны теоретические представления об эффекте нейтрализации ионов при взаимодействии с твердым телом. Приведены наблюдаемые экспериментально особенности взаимодействия частиц в диапазоне низких и гипертермальных энергий. Описана установка, расположенная в Институте энергетики межфазных границ (Италия) и предназначенная для анализа поверхности с помощью ионов низких и гипертермальных энергий.

На основе приведенных данных сделаны выводы и осуществлена постановка задачи исследований.

Вторая глава. В *разделе 2.1* описана экспериментальная установка, разработанная в Научно-исследовательском технологическом институте

Таблица 1. Сравнение характеристик методов анализа поверхности

| Метод | Электронная оже-спектроскопия (ЭОС) | Вторичная ионная масс-спектрометрия (ВИМС) | Дифракция медленных электронов (ДМЭ) | Рентгено-электронная спектроскопия (РЭС) | Спектроскопия обратно рассеянных ионов низких энергий (СОРИНЭ) |
|------------------------|-------------------------------------|---|--------------------------------------|--|--|
| Характеристика | | | | | |
| Первичный зонд | электроны | ионы | электроны | фотоны | ионы |
| Энергия частиц | 1 – 10 кэВ | 1 – 15 кэВ | 0.001 – 0.02 кэВ | 1 – 2 кэВ | 0.002 – 5 кэВ |
| Диаметр зонда | 0.01 – 1 мм | 0.001–0.01 мм | 1 мм | 0.05 x 5 мм | 0.1 – 1 мм |
| Плотность тока зонда | $10^{-4} - 10^2$ А/см ² | 0.01 – 50 мА/см ² | 1 – 10 мкА/см ² | | 0.01 – 400 нА/см ² |
| Достоверность | наилучшая | хорошая | хорошая | хорошая | хорошая |
| Регистрируемые частицы | электроны | ионы | электроны | электроны | ионы |
| Чувст. по сигналу | 10^2 имп/нА | 10^5 имп/нА | | 10^2 имп/нА | 10^4 имп/нА |
| Глубина анализа | ~ 15 Å | 50 – 200 Å | 3 – 5 Å | 15 – 40 Å | монослой |
| Элементный состав | все кроме Н и Не | все | нет | все кроме Н и Не | все кроме Н и Не |
| Хим. связи | выборочно | выборочно | нет | наилучший | выборочно |
| Структура | нет | нет | решетки, сверхрешетки | нет | взаимное распол. атомов |
| Фазовое состояние | нет | нет | да | выборочно | да |
| Зонная структура | нет | нет | нет | да | да |
| Чувствительность | 10^{19} ат/см ³ | 10^{15} ат/см³ | | 10^{19} ат/см ³ | 10^{17} ат/см ³ |

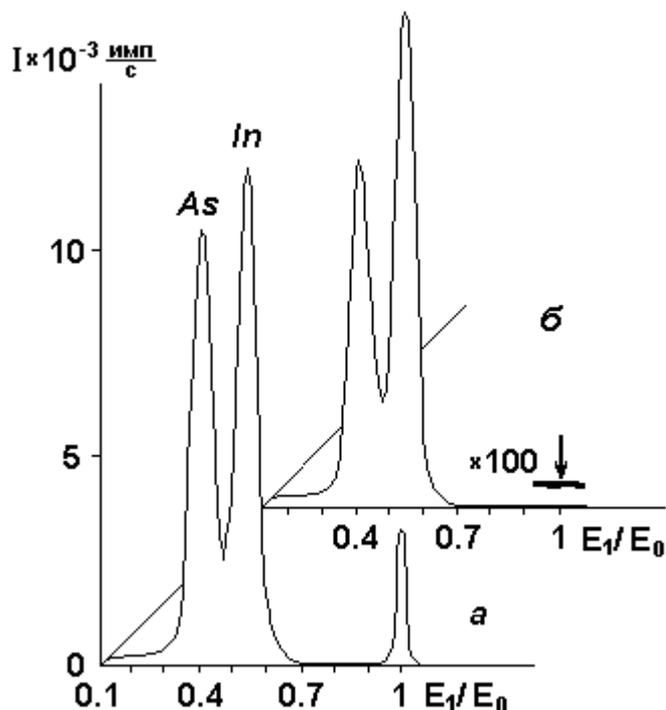


Рисунок 1 - Энергетический спектр ионов Ne^+ ($E_0 = 28.8$ эВ), рассеянных поверхностью InAs(100): а - кристаллическая поверхность; б - поверхность после аморфизации

(Рязань), которая состоит из цилиндрического зеркального анализатора с расположенной на его оси ионной пушкой. Угол регистрации рассеянных ионов составляет, в зависимости от настроек, $\theta = 135 \div 140^\circ$ с минимальной неопределенностью угла рассеяния $\Delta\theta = \pm 1^\circ$. Параметры модуля позволяют исследовать рассеяние ионов в диапазоне энергий от единиц до не-

скольких тысяч электронвольт.

В *разделе 2.2* приведены экспериментальные результаты рассеяния ионов гипертермальных энергий монокристаллическими, поликристаллическими и аморфными поверхностями полупроводников на примере InAs. При рассеянии от структурированных поверхностей в спектрах появляется пик, расположенный на энергии, равной начальной энергии ионов, ширина которого определяется разрешением энергоанализатора. Установлено, что пик рассеяния без потерь энергии формируется ионами сканирующего пучка и не является аппаратным артефактом. Амплитуда пика в 2 – 3 раза больше для монокристаллических поверхностей, чем для поликристаллических, и полностью отсутствует на аморфных материалах (рис. 1). Повышение температуры образца выше 300 К приводит к уменьшению интенсивности пика рассеяния без потерь энергии, а затем и к его полному исчезновению при 450 – 500 К. Пик полностью отсутствует на окисленной поверхности образцов, т.е. не происходит отражения ионов от заряженных участков поверхности.

Раздел 2.3 посвящен описанию парных сферически симметричных потенциалов отталкивания. Приведены теоретические потенциалы, такие как аппроксимации потенциала Томаса–Ферми, эмпирические потенциалы, самым известным из которых является потенциал Борна–Майера, и потенциалы, полученные в результате последних исследований по восстановлению потенциала взаимодействия из экспериментальных данных.

Для целей диссертационной работы был разработан пакет программного обеспечения, описание которого приведено в *разделе 2.4*. Пакет позволяет рассчитывать параметры парного рассеяния по формулам рассеяния, при этом в качестве начальных значений могут выступать как при-

цельные параметры, так и углы рассеяния иона, и рассчитывать результаты взаимодействия иона с произвольной конфигурацией атомов динамическим методом (он же метод молекулярной динамики). Потенциал взаимодействия между частицами выбирается из 26 присутствующих в пакете. В методе молекулярной динамики атомами мишени можно задавать начальную скорость и вектор движения, также возможно разбиение частиц на группы, что позволяет использовать разные потенциалы для описания взаимодействия между разными группами частиц.

Одним из физических факторов, влияние которого на результат рассеяния ионов низких и гипертермальных энергий не изучено, является поступательное кинетическое движение атомов поверхности с тепловыми скоростями. Для изучения влияния этого фактора в работе были разработаны алгоритм вычисления сечения рассеяния (рис. 2) и алгоритм построения пика парного упругого рассеяния (рис. 3) на движущемся атоме. Моделирование взаимодействия иона с движущимся атомом производится следующим образом. Пусть атом располагается в начале координат. Одна из координатных осей выбирается параллельной направлению движения иона, другая таким образом, чтобы вектор движения атома лежал в образованной координатной плоскости. Для описания начальных условий рассеяния используются две величины: L и f_p (рис. 2), где L равно расстоянию от иона до начала координат по оси, параллельной направлению движения иона, а параметр f_p играет роль, аналогичную прицельному расстоянию r , используемому при описании рассеяния на неподвижном атоме. Величина L выбирается такой, чтобы суммарное взаимодействие частиц на расстоянии больше данного оказывалось пренебрежимо мало. Параметры движения атома описываются с помощью величин кинетической энергии E_a и угла движения атома α , который измеряется, как и углы рассеяния и отдачи, относительно направления начального движения иона.

Расчет сечения рассеяния производится в два этапа. На первом определяется значение параметра f_p (для заданного значения L), при котором ион рассеивается на 180° . Из данной точки в плоскости, перпендикулярной к направлению движения иона, строятся лучи, на каждом из которых определяется расстояние r_θ , приводящее к рассеянию иона на заданный угол θ . При этом также определяется энергии рассеяния E_θ (рис. 2).

Для построения пика парного рассеяния иона на движущемся до начала взаимодействия атоме приведенным выше способом рассчитываются максимальная и минимальная энергии рассеяния иона E_θ на угол θ (или в диапазоне углов) для углов движения атома α от 0° до 180° с определенным шагом. На рис. 3 приведена методика расчета пика парного упругого рассеяния иона на движущемся атоме в предположении, что пик рассеяния иона от атомов, движущихся под определенным углом α , имеет прямоугольную форму, а относительная высота его равна вероятности w движения атома под данным углом (рис. 3, б). Для вычисления формы

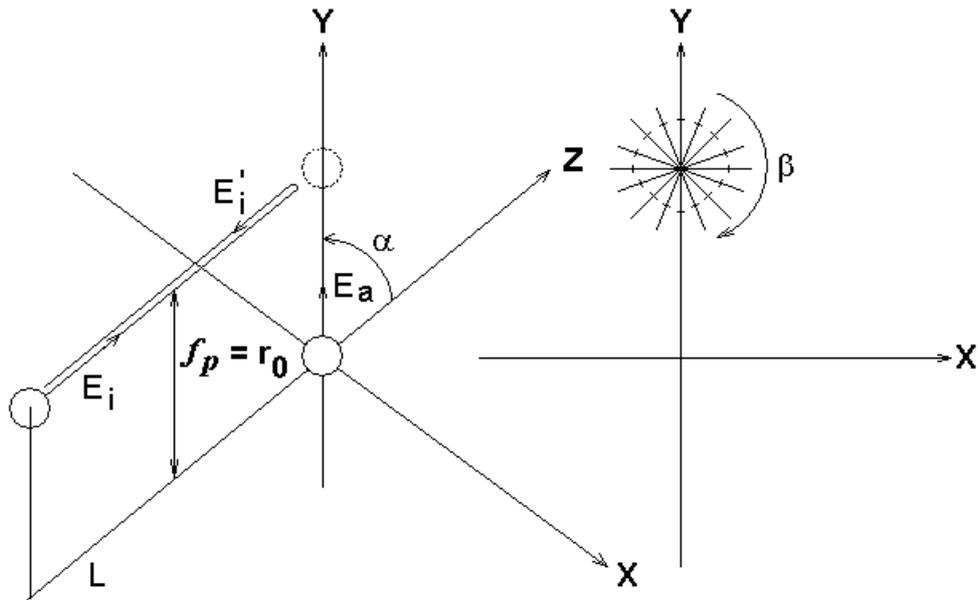


Рисунок 2 - Методика определения дифференциального сечения рассеяния в случае движущегося в плоскости YZ (под произвольным углом α) атома. Здесь f_p – «прицельное расстояние», r_0 – расстояние, на котором ион рассеивается под углом 180°

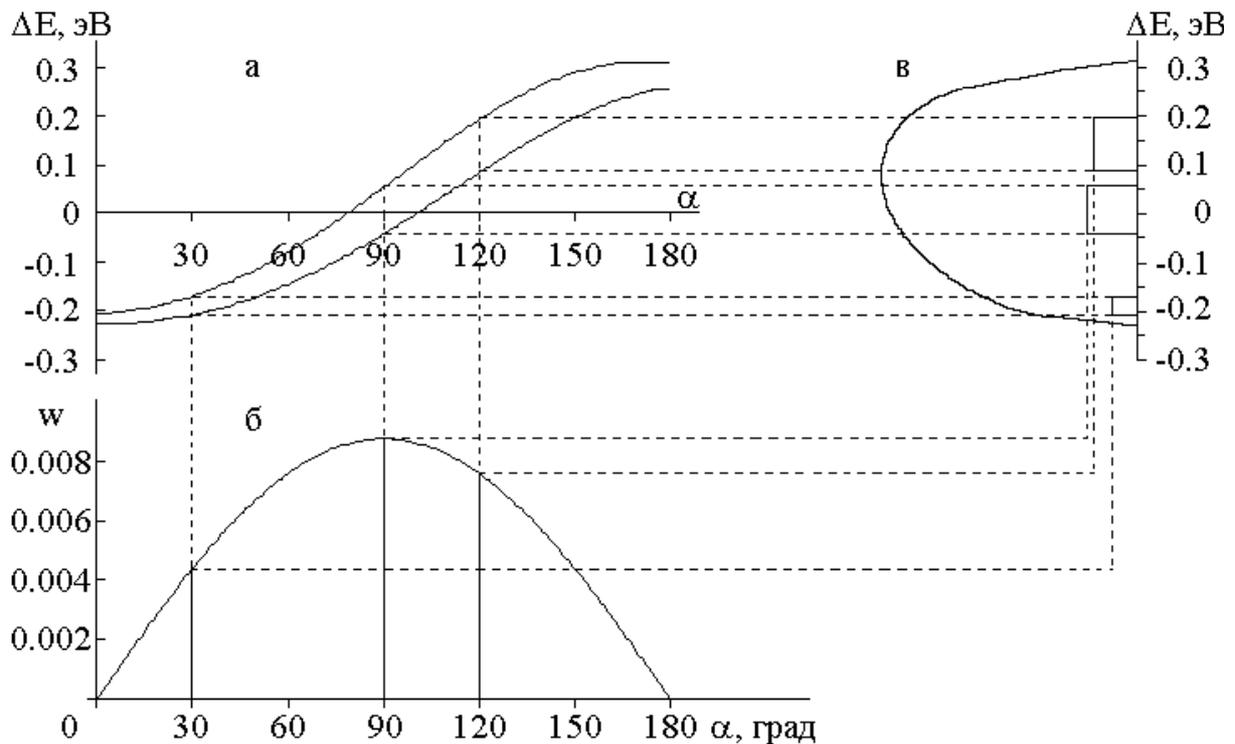


Рисунок 3 - К методике расчета пика парного рассеяния от движущегося атома на примере пары Ne^+ (10 эВ) – Si (0.03 эВ): а - зависимость энергетического диапазона рассеяния иона в пределах углов регистрации анализатора ($134 - 138^\circ$) на движущемся под углом α атоме от α . За нулевое значение принята энергия рассеяния на 136° от неподвижного атома; б - зависимость вероятности движения w свободного атома по отношению к налетающему иону от угла α ; в - результат суммирования отдельных пиков рассеяния иона от движущегося атома для всего диапазона углов α

парного пика диапазон энергий рассеяния иона от максимальной до минимальной разбивается на узлы, в каждом из которых суммируется вклад всех пиков рассеяния от движущегося под разными углами α атома

$$I_i = \sum_{k=1}^n I_k^{\alpha}(E_i),$$

где I_i – интенсивность парного пика в узле i ; n – количество учитываемых углов движения атома α ; E_i – энергии узла i ; I_k^{α} – интенсивность k -го пика рассеяния от движущегося под углом α_k атома.

Третья глава посвящена определению физического механизма рассеяния ионов без потерь энергии и исследованию влияния поступательного кинетического движения атомов поверхности с тепловыми скоростями на параметры рассеяния.

Раздел 3.1. При описании рассеяния по формулам рассеяния предполагается, что траектории движения частиц после взаимодействия можно аппроксимировать асимптотами. В результате получается, что атом начинает движение не из своего начального положения, а со сдвигом на величину x_2

$$x_2 = p \operatorname{tg}(c/2) - x_1, \quad x_1 = (2t M_1 + p(M_2 - M_1) \operatorname{tg}(c/2)) / (M_1 + M_2),$$

$$t = \sqrt{r_m^2 - p^2} - \int_{r_m}^{\infty} \left[\left(\sqrt{1 - p^2/r^2} - V(r)/E \right)^{-1} - \left(\sqrt{1 - p^2/r^2} \right)^{-1} \right] dr,$$

где p – прицельный параметр; M_1, M_2 – масса иона и атома соответственно; χ – угол рассеяния в системе центра масс; E – энергия иона; $V(r)$ – потенциал взаимодействия; r_m – апсидальное расстояние.

В работе установлено, что для разных потенциалов отталкивания зависимости $x_2(E)$ имеют разный вид. По результатам анализа в работе предлагается использовать вид зависимости $x_2(E)$ как критерий классификации потенциалов взаимодействия как «жестких» или «мягких» для заданной пары ион-атом в диапазоне низких и гипертермальных энергий.

Сдвиг атома под действием иона может привести к последовательно-групповому взаимодействию и к увеличению энергии иона после рассеяния. Расчеты показывают, что величина сдвига для пары $\text{Ne}^+ - \text{Si}$ в диапазоне от 2 до 5000 эВ составляет десятые доли ангстрема, т.е. мала по сравнению с межатомным расстоянием. Моделирование рассеяния иона цепочкой атомов динамическим методом показывает, что даже когда расчетная величина x_2 существенно меньше межатомного расстояния, возможен переход от парного ионно-атомного взаимодействия к последовательно-групповому. За время рассеяния иона ($10^{-15} - 10^{-14}$ с) взаимодействие в цепочке успевает охватить 2 – 3 атома. Этого количества атомов недостаточно для того, чтобы потери энергии ионом оказались меньше разрешения энергоанализатора и сформировался пик рассеяния без потерь энергии.

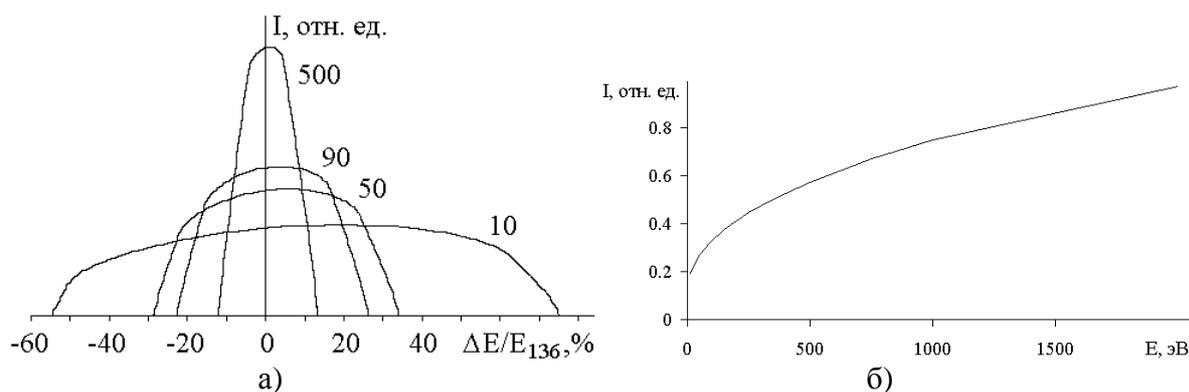


Рисунок 4 - Влияние теплового движения атомов для пары $\text{Ne}^+\text{-Si}$: а - на форму пика парного рассеяния при разной энергии иона; б - на зависимость интенсивности пика от энергии иона. Энергия атома Si 0.03 эВ. Для пиков за ноль взята энергия рассеяния от неподвижного атома на угол 136° . Углы регистрации $136^\circ \pm 2^\circ$

Известно, что в результате последовательного многократного рассеяния энергия иона может оказаться больше, чем в результате парного рассеяния. Анализ процесса показывает, что при многократном рассеянии на одинаковый угол происходит сохранение ионом наибольшей энергии. Однако для пары $\text{Ne}^+\text{-Si}$ количество актов малоуглового рассеяния, приводящих к конечному углу рассеяния 140° и уровню потерь энергии ионов в 1 %, равно 428. Поэтому механизм многократного рассеяния исключается из дальнейшего рассмотрения.

Считается, что может существовать механизм возврата иону энергии, потерянной при столкновении. При этом другие способы, которыми ион может потерять или получить энергию, кроме столкновения с атомом или группой атомов, не известны. В случае взаимодействия иона с отдельным атомом условия, приводящие к рассеянию иона без потерь энергии, заключаются во встречном параллельном движении иона и атома при равенстве их импульсов. Начальная энергия атома в этом случае определяется по формуле $E_a = E \cdot M_1 / M_2$. Наличие тангенциальной составляющей скорости у атома приводит к изменению конечной энергии частиц после рассеяния. Это значит, что формирование узкого пика рассеяния без потерь энергии в результате рассеяния иона на отдельном атоме маловероятно.

Из-за поступательного кинетического движения атомов поверхности с тепловыми энергиями средняя величина сечения рассеяния иона на движущемся атоме оказывается больше сечения рассеяния на неподвижном атоме, также меняется форма пика парного упругого рассеяния (рис. 4, а). По сравнению с теоретическим пиком пик рассеяния на движущемся атоме является уширенным, его интенсивность меньше (рис. 4, б).

Таким образом, условий взаимодействия иона с отдельным атомом или цепочкой атомов, которые бы приводили к формированию пика рассеяния без потерь энергии, не обнаружено.

Раздел 3.2. Случай одновременного столкновения с несколькими атомами обычно рассматривают как взаимодействие с частицей, масса ко-

Таблица 2. Количество атомов N, обеспечивающих заданный уровень потерь энергии при рассеянии иона на 140°

| Уровень потерь энергии ΔE, % | Пара взаимодействия | | | |
|------------------------------|---------------------|---------|---------|---------|
| | Ne – Si | Ne – As | Ne – In | Ne – Au |
| 1 | 253 | 95 | 62 | 37 |
| 0.5 | 507 | 190 | 124 | 73 |
| 0.1 | 2537 | 951 | 621 | 362 |

торой больше массы отдельного атома. Увеличение массы, с которой происходит столкновение, приводит к уменьшению потерь энергии при взаимодействии. Формула, позволяющая для однокомпонентной мишени определить количество атомов, одновременное взаимодействие с которыми приведет к потерям энергии ионами меньше заданной величины, имеет вид

$$NM_2 = M_1 \frac{1 + (E - DE)/E - 2\sqrt{(E - DE)/E} \cos q}{1 - (E - DE)/E},$$

где N – количество атомов мишени, принимающих участие в столкновении, θ – угол рассеяния в лабораторной системе координат, ΔE – уровень потерь энергии ионов, равный или меньше разрешения энергоанализатора. Зависимость количества атомов N от уровня допустимых потерь энергии ионов ΔE приведена в таблице 2. Исходя из большого количества атомов, необходимого для уровня потерь меньше разрешения по энергиям современных приборов (0.5 %), считается, что механизм рассеяния без потерь энергии не может описываться многоатомным рассеянием.

Результатом проделанных в диссертационной работе исследований является вывод о том, что рассеяние без потерь энергии возможно только в случае многоатомного взаимодействия. Предлагаемый в работе механизм взаимодействия иона с большим количеством атомов заключается в рассеянии иона от общей внешней эквипотенциальной поверхности группы атомов поверхности (поверхностного кластера), энергия которой равна начальной энергии иона и в формировании которой принимают участие все атомы кластера. Энергетическая граница появления пика связана со способностью электронной подсистемы поверхности коллективно реагировать на воздействие, оказываемое ионом. Формирование общей внешней эквипотенциальной поверхности с энергией до 80 эВ происходит из-за изменения потенциала взаимодействия атомов кластера с ионом. Потенциал меняется при изменении плотности электронного газа в области кластера. Уменьшение плотности электронного газа приводит к уменьшению экранирующего действия, оказываемого электронами на атомы решетки, и к усилению отталкивающего действия потенциала атома. Плотность электронного газа меняется в результате возникновения согласованных колебаний электронов под действием налетающего иона. В случае поликристаллических поверхностей границы зерен являются естественным препят-

ствием для согласованных колебаний электронов поверхности, поэтому вероятность формирования поверхностного кластера будет меньше, чем для монокристаллических поверхностей. В случае аморфных поверхностей формирования согласованных колебаний электронов поверхности не происходит. Также условия для формирования коллективных колебаний электронов поверхности ухудшаются с увеличением температуры твердого тела. Таким образом, предложенная модель формирования пика рассеяния без потерь энергии полностью соответствует наблюдаемым экспериментальным фактам.

Четвертая глава посвящена практическому использованию метода СОРИНЭ и методик, разработанных автором диссертации, для анализа внешнего моноатомного слоя поверхности полупроводников и исследования физических процессов адсорбции.

В ходе экспериментального изучения процесса напыления пленки Cs на поверхности GaAs(110) установлено, что атомы цезия адсорбируются на поверхность GaAs в виде монослоя. При концентрациях менее 0.2 монослоя атомы цезия адсорбируются в виде ионов. Это происходит потому, что первый потенциал ионизации цезия ($eV_{i1Cs} = 3.89$ эВ) меньше ширины зоны проводимости арсенида галлия ($e\chi_{GaAs} = 4$ эВ). В результате формируются поверхностные донорные уровни, расположенные у дна зоны проводимости. При доле напыленного слоя более 0.2 атомы цезия начинают адсорбироваться в дипольном состоянии. Дипольный слой приводит к снижению поверхностного потенциального барьера. Моноатомная пленка цезия на поверхности полупроводника выполняет одновременно две функции – формирование поверхностных донорных уровней, приводящих к изгибу зон, и уменьшение потенциального барьера, что в результате приводит к появлению отрицательного электронного сродства, высокому значению коэффициента вторичной электронной эмиссии и квантового выхода фотоэлектронов, включая дальнюю инфракрасную область (рис. 5). Приведенная структура Cs-[p-GaAs] используется в полупроводниковых фотоэлектронных преобразователях. Полученные результаты раскрывают физический механизм действия этих приборов, что делает возможным дальнейшее совершенствование их характеристик.

Известно, что наличие на поверхности GaAs избытка мышьяка приводит к улучшению адсорбционных свойств поверхности. Изучение зависимости концентраций элементов GaAs во внешнем монослое от температуры образца выявило состояние поверхности, обогащенное мышьяком, существующее в узком диапазоне температур и сохраняющееся при быстром охлаждении образца (рис. 6). В этом случае концентрация мышьяка в два раза выше, чем при нормальных условиях.

Известно, что атомы поверхности обладают тепловой энергией, часть которой затрачивается на тепловые колебания. Теоретические иссле-

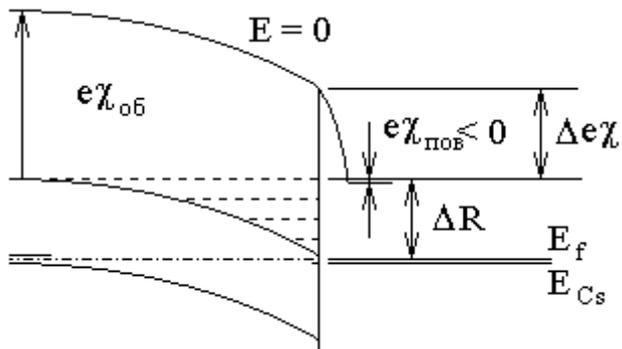


Рисунок 5 - Зонная структура поверхности GaAs с изовалентным легированием Ge и напыленным монослоем Cs: E_f – энергия уровня ферми; E_{Cs} – энергия поверхностных донорных центров Cs; $e\chi$ – энергия сродства к электрону (объемная и поверхностная); ΔR – глубина квантовой ямы; $\Delta e\chi$ – энергия снижения поверхностного барьера

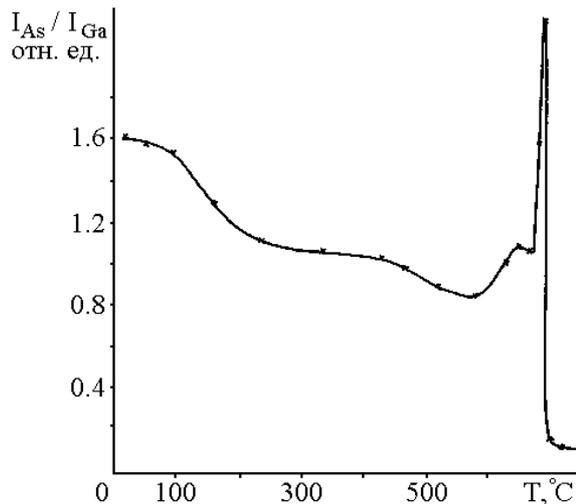


Рисунок 6 - Изменение интенсивностей пиков элементов во внешнем монослое поверхности GaAs(110) при нагреве образца¹

дования, проведенные в работе, показали, что результат взаимодействия ионного зонда низких и гипертермальных энергий оказывается чувствительным к энергии поступательного кинетического движения атомов поверхности.

В спектрах рассеяния ионов средних и высоких энергий для количественного анализа используется интенсивность парного пика. В диапазоне низких и гипертермальных энергий из-за влияния физических факторов происходит уширение пика, и поэтому более точную количественную информацию несет площадь пика. Так, при начальной энергии ионов 1000 эВ экспериментально наблюдаемая ширина пиков на полувысоте Si и As для ионов Ne составляет 50 и 30 эВ соответственно. Расчеты показывают, что за счет углов регистрации $136^\circ \pm 2^\circ$ и уширения пика из-за теплового движения атомов ширина на полувысоте теоретических пиков составит 5.19 эВ или 10 % от экспериментальной ширины пика для Si и 13.44 эВ или 45 % от экспериментальной ширины пика для As. Уширение теоретических пиков до величин, наблюдаемых экспериментально, происходит как из-за влияния других физических процессов, так и из-за влияния аппаратуры.

В экспериментальных спектрах парные пики редко бывают полностью разрешенными, что не позволяет точно вычислять их площадь. Поэтому учет изменения высоты пика за счет уширения позволит повысить достоверность количественного анализа. В работе показано, что одним из физических факторов, приводящих к уширению парного пика, является движение атомов поверхности с тепловыми энергиями. Изменение интен-

¹ Тимашев М. Ю. Новые аналитические возможности при исследовании поверхности твердых тел (с разработкой аппаратуры): дис. ... канд. физ.-мат. наук. Рязань, 1992. 233 с.

Таблица 3. Значение дополнительного коэффициента K_T для пары $\text{Ne}^+ - \text{Si}$

| Энергия иона, эВ | Коэффициент K_T | |
|------------------|-------------------|---------|
| | 136° | 136±2° |
| 20 | 8.09671 | 4.56614 |
| 50 | 8.14344 | 3.69824 |
| 90 | 8.15693 | 3.13613 |
| 200 | 8.16247 | 2.42641 |

сивности парного пика из-за теплового движения атомов в зависимости от начальной энергии иона приведено на рис. 4, б. Для повышения достоверности количественного анализа учетом влияния теплового движения атомов поверхности на результат взаимодействия в формулу количественного анализа вводится дополнительный безразмерный коэффициент

$$I = I_0 N \frac{dS}{dW} DWP^+ K_A K_T K_\phi,$$

где I_0 – интенсивность первичного пучка ионов; N – концентрация элемента на поверхности; $d\sigma/d\Omega$ – дифференциальное сечение рассеяния; $\Delta\Omega$ – входной (телесный) угол анализатора; P^+ – вероятность сохранения заряда первичным ионом; K_A – коэффициент, учитывающий влияние аппаратуры; K_T – коэффициент, учитывающий влияние кинетического теплового движения на сечение рассеяния и интенсивность пика; K_ϕ – коэффициент, учитывающий влияние прочих физических факторов. Значения коэффициента K_T для пары частиц $\text{Ne}^+ - \text{Si}$ и разных диапазонов углов регистрации приведены в таблице 3. Энергия атома равнялась 0.03 эВ, потенциал взаимодействия Томаса–Ферми в приближении Мольер. Оценки показывают, что достоверность количественного анализа повышается на 30 %.

Отличительной особенностью полупроводниковых материалов является наличие ковалентных связей между атомами. Связи ограничивают колебания атомов и поэтому являются одной из причин перехода от парного взаимодействия иона с атомом к последовательно-групповому. Это приведет к увеличению доли энергии, сохраняемой ионом в процессе рассеяния. При рассеянии в диапазоне углов 134° – 138° (что соответствует случаю цилиндрического зеркального анализатора) на отдельном атоме (парное взаимодействие) и на цепочке атомов, где энергетические связи между атомами моделируются потенциалом взаимодействия с притягивающей частью (потенциал Леннарда–Джонса), энергетический диапазон рассеяния ионов гипертермальных энергий на цепочке смещается в сторону более высоких энергий. В случае пересечения диапазонов парного рассеяния и рассеяния на цепочке произойдет уширение пика рассеяния в сторону больших энергий. Увеличение начальной энергии иона приводит к уменьшению влияния последовательно-группового взаимодействия на результат рассеяния. Таким образом, пики рассеяния ионов гипертермальных энергий содержат информацию об энергии связи между атомами. Варьируя на-

Таблица 4. Результаты, достигнутые в работе, в сравнении с известными данными

| Параметр | Диапазон энергий | | | |
|--|---|----------------------------------|---|---|
| | $E_0 = 100 - 5000$ эВ (низкие энергии) | | $E_0 = 2 - 100$ эВ (гипер- термальные энергии) | |
| | по известным работам | достигнуто в работе | по известным работам | достигнуто в работе |
| Количество потенциалов, учитываемых ПО, видов | 1 – 5 | 26 | 1 – 5 | 26 известных 1 новый |
| Глубина анализа | 1 монослой | 1 монослой | – | 1 монослой |
| Особенности спектра | Парные пики | Парные пики | Парные пики | Парные + пик без потерь энергии |
| Определение кристаллического или аморфного состояния | – | – | – | Для структур алмаза, ОЦК, ГЦК 1 – 3 монослоя |
| Вклад тепловых колебаний в ширину парного пика | – | 10 – 50 % | – | 10 – 50 % |
| Достоверность количественного анализа | Низкая | Учет тепловых колебаний +30% | – | Учет тепловых колебаний +30% |
| Определение зарядового состояния адатомов | – | ион – диполь с погрешностью 20 % | – | ион – диполь с погрешностью 20 % |
| Диаметр зонда, мм | 1 | 0.1 | – | 1 |
| Чувствительность аппаратная, имп/(нА·с) | $1 - 2 \cdot 10^4$ | $2 \cdot 10^4$ | – | $2 \cdot 10^4$ |
| Угловое разрешение рассеяния | В пределах 0 – 4 град, не регулир. | 0 – 4 градуса, регулируемая | – | 0 – 4 градуса, регулируемая |
| Погрешность по интенсивности пика | Сведений нет | 0.03 % по стат. шуму | – | 0.03 % по стат. шуму |
| Предел обнаружения, ат/см ² | 10^{12} | $10^{11} - 10^{12}$ | – | 10^{12} |
| Доза анализа, атомов | $n \cdot 10^{15}$ | Не ограничена | – | Не ограничена |

чальную энергию ионов, угол падения пучка на образец и поворачивая образец относительно пучка ионов, можно определить пространственную локализацию межатомных связей.

Сравнение результатов, приведенных в литературных источниках и достигнутых в работе, приведено в табл. 4.

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы, которые состоят в следующем.

1. Разработаны физические и методические основы диагностики, а также программные средства численного моделирования элементного состава и структуры внешних монокристаллических слоев поверхности полупроводников ионными пучками низких и гипертермальных энергий в диапазоне от 5000 до 2 эВ.

2. Установлено, что использование диапазона гипертермальных энергий позволяет определять кристаллическое состояние внешнего монослоя поверхности и прилегающих слоев по наличию в спектре рассеяния пика рассеяния без потерь энергии и аморфное состояние по отсутствию пика.

3. Теоретическими и экспериментальными исследованиями полупроводниковых материалов (кремния, арсенида галлия, арсенида индия) при различных режимах зондирования поверхности показана возможность определения методом СОРИНЭ состава внешних монослоев поверхности и взаимного расположения атомов после различных технологических обработок.

4. Теоретическими исследованиями и численным моделированием показано, что пик рассеяния без потерь энергии, обнаруженный экспериментально на поверхности полупроводников, формируется в результате многоатомного рассеяния от групп поверхностных атомов – поверхностных кластеров, формируемых на поверхности динамически в результате реакции электронной подсистемы поверхности на налетающие ионы.

5. Установлено, что поступательное кинетическое движение атомов с тепловыми скоростями оказывает влияние на форму пика парного упругого рассеяния, приводя к уширению пика при уменьшении его высоты, появлению несимметричности пика относительно теоретической энергии парного рассеяния со сдвигом максимума в сторону больших энергий.

6. Уточнена формула количественного анализа методом СОРИНЭ состава монослоя поверхности введением дополнительного безразмерного коэффициента, учитывающего тепловое движение атомов в сочетании с аппаратными факторами геометрии рассеяния, что изменяет относительную величину пика в зависимости от условий эксперимента в пределах от 1 до 5 раз.

7. Численным моделированием показано, что энергетические связи между атомами уменьшают интенсивность пика парного рассеяния ионов

гипертермальных энергий за счет изменения формы пика, что позволяет определять энергию связи между атомами поверхности полупроводниковых материалов из экспериментальных спектров рассеяния.

8. Впервые предложен критерий классификации потенциалов оттачивания как «жестких» и «мягких» для заданной пары ион-атом в диапазоне низких и гипертермальных энергий.

Автор выражает благодарность работникам научной лаборатории НИТИ под руководством своего научного руководителя Волкова С. С. за предоставленные экспериментальные результаты.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. *Саблин В. А.* Особенности моделирования парного взаимодействия ионов с атомами вещества // *Электроника: сб. науч. тр. Рязан. гос. радиотехн. акад. Рязань, 2003. С. 91 – 94.*

2. *Саблин В. А.* Исследование динамика парного взаимодействия ионов с атомами поверхности // *Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2003): Материалы XVI международной конференции 25 – 29 августа 2003, г. Звенигород. М., 2003. Т. 2. С. 292 – 294.*

3. *Волков С. С., Саблин В. А.* Потенциалы межчастичного взаимодействия // *Вестник Рязанской гос. радиотехн. акад. Рязань, 2003. Вып. 13. С. 61 – 66.*

4. *Саблин В. А.* Взаимодействие частиц, пакет прикладных программ «Эврика» // *Электроника: сб. науч. тр. Рязан. гос. радиотехн. акад. Рязань, 2005. С. 97 – 100.*

5. *Волков С. С., Саблин В. А.* Кластерная модель взаимодействия ионов гипертермальных энергий с поверхностью // *Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2005): Материалы XVII международной конференции 25 – 29 августа 2005, г. Звенигород. М., 2005. Т. 1. С. 246 – 248.*

6. *Аристархова А. А., Волков С. С., Путилин И. К., Саблин В. А., Тимашев М. Ю.* Потенциальное отражение ионов гипертермальных энергий от поверхности // *Вестник Рязанской гос. радиотехн. акад. Рязань, 2006. Вып. 17. С. 81 – 86.*

7. *Аристархова А.А., Волков С.С., Путилин И.К., Саблин В.А., Тимашев М.Ю.* Кластерная модель взаимодействия ионов гипертермальной энергии с поверхностью // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2006. № 7. С. 27 – 32.*

8. *Волков С. С., Дмитриевский Ю. Е., Китаева Т. И., Саблин В. А., Тимашев М. Ю., Трубицын А. А.* Влияние аппаратных и физических факторов на интенсивность рассеяния ионов низких энергий // *Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2007): Материалы XVIII международной конференции 24 – 28 августа 2007, г. Звенигород. М., 2007. Т. 1. С. 285 – 287.*

9. Волков С. С., Дмитриевский Ю. Е., Китаева Т. И., Саблин В. А. Моделирование спектров вторичных ионов на основе интегральных аппаратных и физических характеристик // Взаимодействие ионов с поверхностью (ВИП-2007): материалы XVIII Международной конференции 24 – 28 августа 2007, г. Звенигород. М., 2007. Т. 2. С. 145 – 147.

10. Саблин В. А. Особенности взаимодействия иона с движущимся атомом // Электроника: сб. науч. тр. Рязан. гос. радиотехн. акад. Рязань, 2006. С. 28 – 32.

11. Саблин В. А. Особенности взаимодействия иона гипертермальных энергий с тепловым атомом. Приближение свободного атома // Вестник Рязанского гос. радиотехн. универ. Рязань. 2010. № 1. С. 72 – 76.

САБЛИН Виктор Александрович

**РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСКИХ ОСНОВ ИССЛЕДОВАНИЯ
МОНОАТОМНОГО СЛОЯ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ИОНАМИ
НИЗКИХ И ГИПЕРТЕРМАЛЬНЫХ ЭНЕРГИЙ**

Автореферат диссертации
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Подписано в печать 13 мая 2011. Формат 60×90/16.
Бумага офсетная. Печать трафаретная.
Усл. печ. л. 1,0. Тираж 100 экз. Заказ №_____

ООО «Интермета».
390000, Рязань, ул. Семинарская, 5.

