Энергетические спектры рассеянных ионов от дефектной поверхности InP(001) <$\bar{1}$10>

М. Отабаев[a], С. Хакимов[b], У. Кутлиев[a,*]

[a]*Ургенчский государственный университет, Ургенч, 220100, Узбекистан*
[б]*Андижанский технический университет, Андижан, 170100, Узбекистан*
[*]*e-mail: kutliev.u.o@gmail.com*

Поступила в редакцию 30.12.2025
После доработки 06.04.2026
Принята к публикации 07.04.2026

Приведены результаты компьютерного моделирования рассеяния ионов Ar^+ от ступенчатой поверхности InP(001)<$\bar{1}$10> при разных значениях угла падения с помощью метода аппроксимации бинарных столкновений. Получена зависимость энергии рассеянных ионов от угла их рассеяния и показано, что при малых углах падения наблюдается рассеяние от идеальной части поверхности. Увеличение угла падения приводит к рассеянию ионов от атомной ступеньки, смоделированной на поверхности. Установлено, что при рассеянии от ступенчатой поверхности в зависимости $E(\theta)$ рассеянных ионов наблюдаются овалы, соответствующие многократному рассеянию при одном и том же угле рассеяния. Кроме того, получены энергетические спектры, подтверждающие, что с увеличением угла падения ионов появляются пики, соответствующие зеркально рассеянным, рассеянным от торцевого атома и деканалированным ионам.

Ключевые слова: рассеяние ионов, деканалирование, компьютерное моделирование, дефекты

УДК 537.539
https://doi.org/10.52577/eom.2026.62.2.56

ВВЕДЕНИЕ

Взаимодействие ионов с поверхностью твердого тела представляет собой сложный много-стадийный процесс, в котором переплетаются явления атомной физики, физики твердого тела и поверхностной науки. В идеализированной модели кристаллической решетки, где атомы расположены в строгом порядке, рассеяние ионов подчиняется определенным закономерностям, позволяющим анализировать структуру и состав поверхности. Однако реальные материалы неизбежно содержат дефекты, такие как вакансии, межузельные атомы, дислокации и границы зерен, которые существенно нарушают эту идеальную картину [1–3].

Наличие дефектов приводит к локальному искажению потенциала взаимодействия между ионами и атомами поверхности, что, в свою очередь, кардинально меняет траектории рассеянных ионов. Дефекты могут выступать в роли дополнительных центров рассеяния, создавая новые каналы рассеяния и приводя к изменению угловых и энергетических распределений рассеянных частиц. Например, вакансии могут привести к появлению «теневых» областей, где вероятность рассеяния ионов снижается, а межузельные атомы могут, наоборот, увеличить вероятность рассеяния в определенных направлениях [4–7].

Изучение рассеяния ионов от дефектных поверхностей позволяет проникнуть в фундаментальные механизмы взаимодействия ионов с твердым телом на атомном уровне. Анализ угловых и энергетических распределений рассеянных ионов, а также их зависимость от энергии первичных ионов и типа дефектов, дает возможность получить ценную информацию о межатомных потенциалах, электронных процессах, динамике поверхностных атомов, механизме образования дефектов. Также изучение дефектов на поверхности полупроводниковых соединений представляет большой интерес. Рассеяние ионов с поверхности полупроводников является важным процессом, который определяет их физико-химические свойства и технологические характеристики. В частности, наличие дефектов в кристаллической решетке существенно влияет на траекторию ионов, их энергию и углы рассеяния. Исследование этих явлений позволяет лучше понять поверхностные процессы, что имеет значение для микро- и наноэлектроники, а также для разработки новых функциональных материалов [8–10]. В этой статье приведены результаты компьютерного моделирования рассеяния ионов Ar^+ от ступенчатой поверхности

InP(001)<$\bar{1}$10) при разных значениях угла падения.

МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Известно, что ионно-рассеивательная спектроскопия дает важную информацию о поверхности твердого тела. Столкновения при малых значениях энергий бомбардирующих ионов с атомами на поверхности твердого тела можно рассматривать как изолированные парные столкновения, так и их последовательности. Этот вывод основывается на рассмотрении времени взаимодействия падающего иона и атома кристалла, а также энергий, характерных для таких столкновений. Так как отталкивающая составляющая потенциала быстро уменьшается с увеличением межатомного расстояния, то время взаимодействия для таких столкновений составляет величины порядка 10^{-15}–10^{-16}с, что гораздо меньше периода колебаний решетки, равного примерно 10^{-13} с. Поэтому, когда энергия, передаваемая в процессе столкновения, превышает энергию связи атома мишени (5–20 эВ), этот атом можно считать изолированным от решетки [11–13].

Если частица с массой M_1 и атомным номером Z_1, обладающая скоростью v_0 (и кинетической энергией E_0), упруго сталкивается с недвижущимся атомом мишени с массой M_2 и атомным номером Z_2, то частица с массой M_1 рассеивается в лабораторной системе координат на угол θ_1 по отношению к направлению ее первоначального движения. Связь этих параметров определяется следующими соотношениями:

$$E_1 = (1+\mu)^{-2} E_0 \left(\cos\theta_1 \pm \sqrt{(f\mu)^2 - \sin^2\theta_1}\right)^2.$$

Для описания ион-атомных столкновений использовались потенциалы Бирзака–Циглера–Литтмарка [14]:

$$V_{SBL} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}\left(\left(0{,}1818\exp\left(-3{,}2\frac{r}{a}\right) + 0{,}5099\exp\left(-0{,}9423\frac{r}{a}\right) + \right.\right.$$
$$\left.\left. +0{,}2802\exp\left(-0{,}4029\frac{r}{a}\right) + 0{,}02817\exp\left(-0{,}2616\frac{r}{a}\right)\right)\right),$$

где $a = 0{,}8853 a_0 \left(Z_1^{0{,}23} + Z_2^{0{,}23}\right)^{-}$ функция экранирования.

Потенциал Бирзака–Циглера–Литтмарка (ZBL) – это универсальный межатомный потенциал, используемый для описания взаимодействия атомов и ионов на малых расстояниях, особенно в задачах рассеяния ионов и радиационных повреждений твердых тел. В этом столкновений происходит потеря энергии, и неупругая часть энергии определяется формулой Фирсова, модифицированной Л.М. Кишиневским [15]:

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

где a_{tf} = 0,468Å, v и E_r – относительная скорость и энергия атома соответственно, Z_1^- и Z_2 – заряд сталкивающихся ионов и атомов, v – см/с, E_r – эВ, $r_{\min}$ – Å.

На рис. 1 представлены полуканал, который образовался на ступенчатой поверхности InP(001)<$\bar{1}$10), и некоторые траектории рассеянных ионов. Ширина и глубина этого полуканала равна 2,86Å и 4,01Å соответственно. Следует отметить, что также могут наблюдаться зигзагообразные траектории рассеянных ионов.

На рис. 2 представлена зависимость $E(\theta)$ рассеянных ионов Ar^+ от ступенчатой поверхности InP(001)<$\bar{1}$10) при разных значениях угла падения с начальной энергией E_0 = 5 кэВ. Известно, что зависимость $E(\theta)$ рассеянных ионов от идеальной поверхности представляет в основном овалы, соответствующие одно- и двукратно рассеянным ионам [16]. В случае ступенчатой поверхности эта зависимость вглядит иначе. На рис. 2а показано это распределение при $\psi = 7^0$. Наши расчеты показали, что в зависимости наблюдаются только два овала, соответствующих многократному рассеянию ионов при $\theta = 11{,}6^0$ и $\theta = 12{,}85^0$. Рассеяния ионов на других значениях угла рассеяния не наблюдается. Это связано с большим значением ширины полуканала и малым значением угла падения ионов. Увеличение угла падения ионов ($\psi = 9^0$) приводит к формированию больших значений угла рассеяния, что отражено в зависимости $E(\theta)$ рассеянных ионов (рис. 2б). Из рис. 2б видно, что, кроме овала, образованного при $\theta = 18^0$, появляется еще один овал при $\theta = 90^0$. Овалы, соответствующие многократному рассеянию ионов и формирующиеся при больших значениях угла рассеяния, наблюдаются при меньших значениях энергии рассеянных ионов. При $\psi = 11^0$ число овалов увеличивается и значения угла рассеяния ионов имеют более широкий диапазон (рис. 2в). Следует отметить, что при малых значениях угла рассеяния образуются малые овалы, а при больших значениях угла рассеяния – открытые овалы, что объясняется большим значением массы падающих ионов аргона по сравнению с массой атомов фосфора, который образует

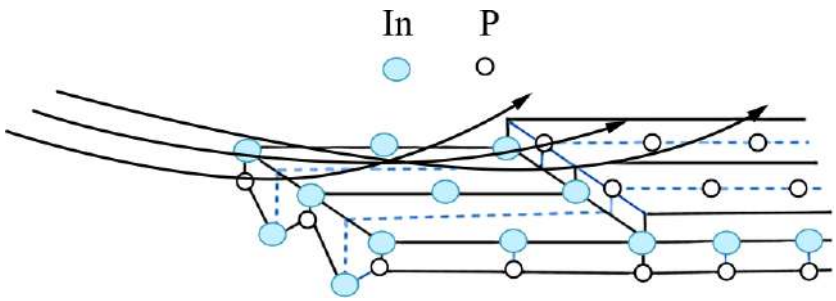


Рис. 1. Ступенчатая поверхность InP(001)< ī10>.

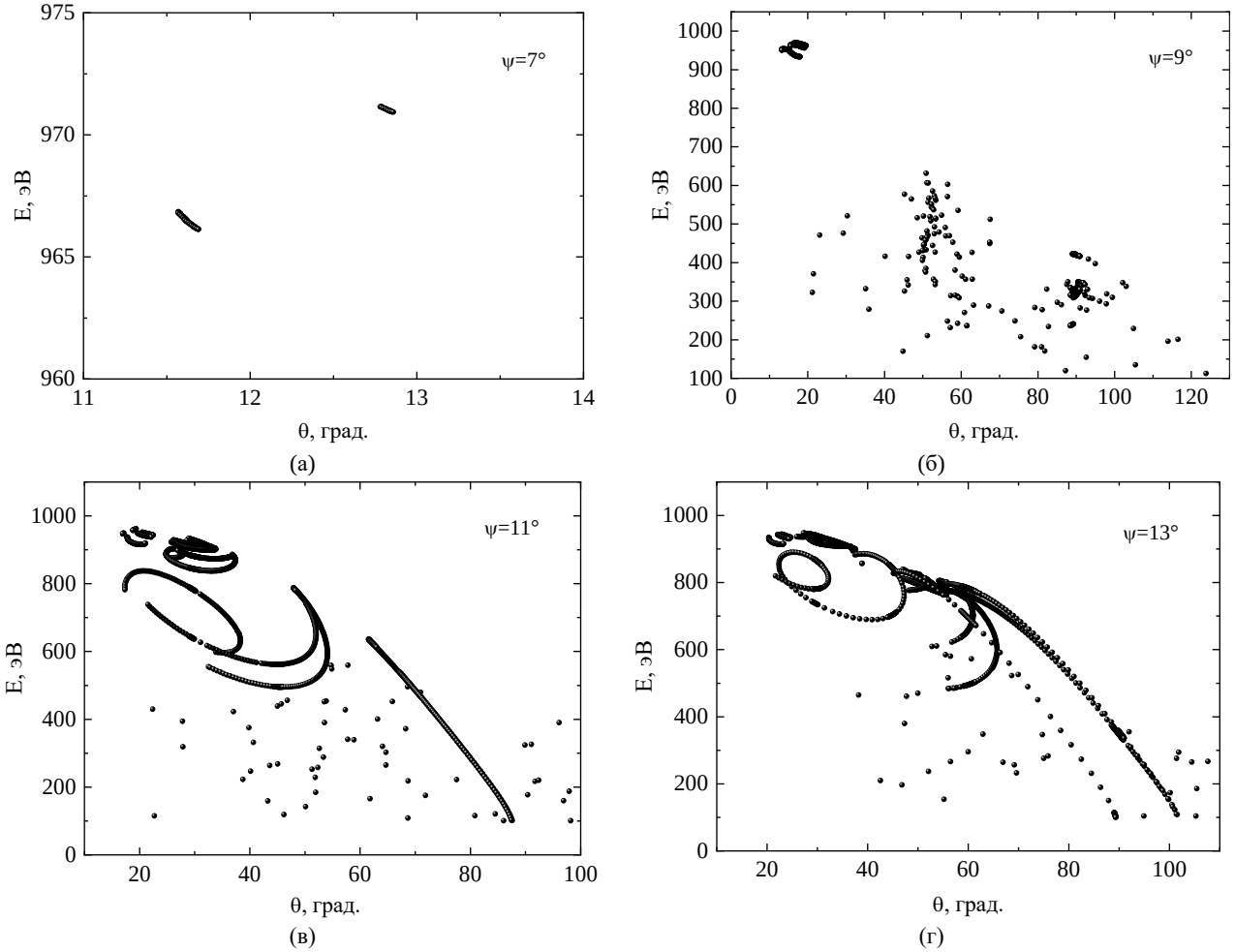


Рис. 2. Зависимость $E(\theta)$ рассеянных ионов Ar^+от ступенчатой поверхности InP(001)<ī10> с начальной энергией E_0 = 5 кэВ при разных значениях угла падения: (а) – $\psi = 7^0$; (б) – $\psi = 9^0$; (в) – $\psi = 11^0$; (г) – $\psi = 13^0$.

поверхностную ступеньку. В этом случае наблюдаются овалообразные зависимости в диапазоне углов рассеяния ионов $\theta = 20–70^0$. При значениях угла рассеяния ионов больше и меньше этих значений наблюдается малое количество ионов.

Подобную картину, представленную на рис. 2г, можно наблюдать также при $\psi = 13^0$. Из этой зависимости видно увеличение числа овалов из многократно рассеянных ионов Ar^+. В этом случае наблюдаются овалообразные зависимости в диапазоне угла рассеяния ионов $\theta = 20–90^0$, тогда как при других значениях угла рассеяния фиксируется малое количество ионов. Анализ результатов показал, что увеличение угла падения ионов приводит к еще большему сужению овалов в зависимости.

Нами также рассчитано энергетическое распределение рассеянных ионов Ar^+ от ступенчатой поверхности InP(001)<ī10> при различных значениях угла падения при начальной энергии E_0 = 5 кэВ (рис. 3). На рис. 3а представлено энергетическое распределение рассеянных ионов при угле падения $\psi = 7^0$, соответствующем условиям скользящего падения. Как видно из графика, данное распределение характеризуется наличием одного ярко выраженного пика, что указывает на доминирование механизма рассеяния в данных условиях. Для интерпретации природы этого пика был проведен детальный анализ траекторий

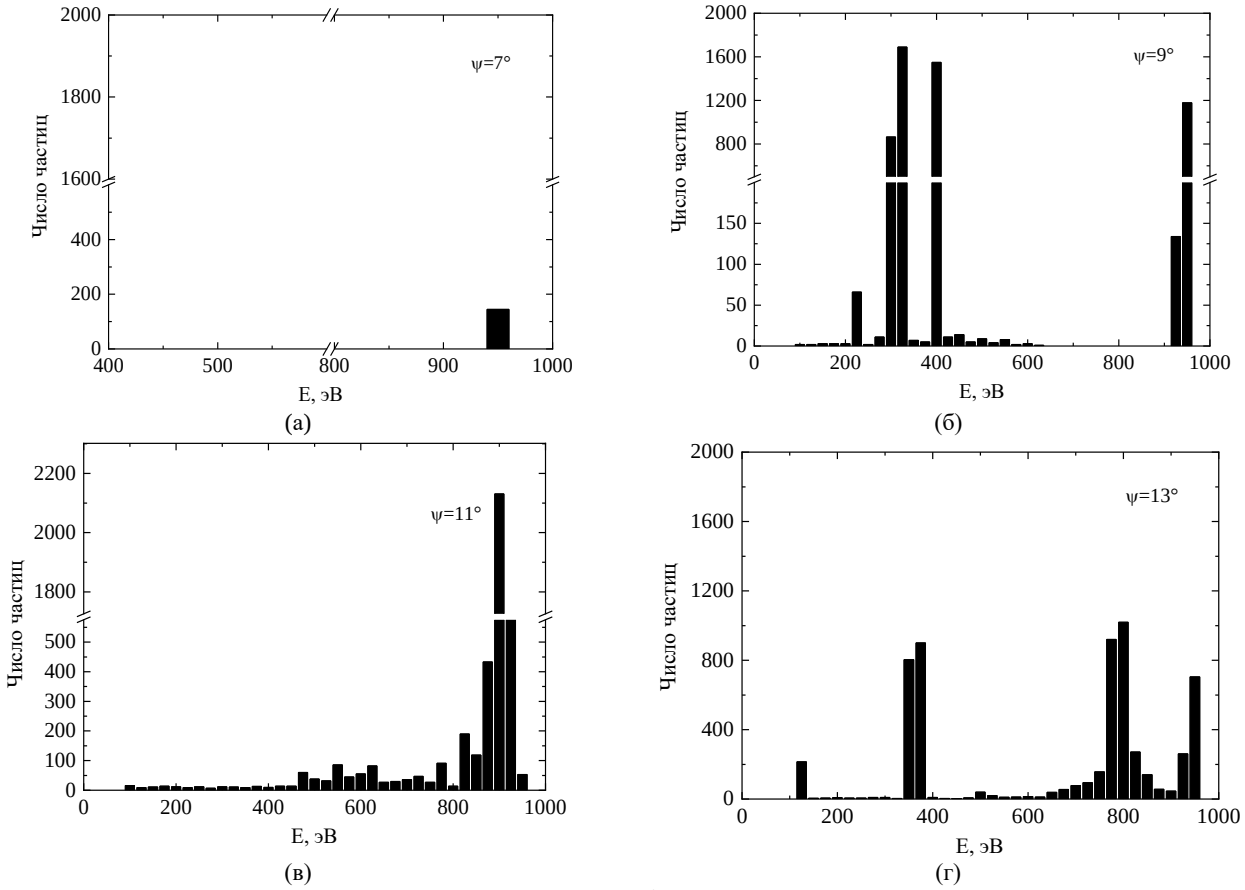


Рис. 3. Энергетическое распределение рассеянных ионов Ar^+ от ступенчатой поверхности InP(001)<$\bar{1}$10) с начальной энергией E_0 = 5 кэВ при разных значениях угла падения: (а) – ψ = 7^0; (б) – ψ = 9^0; (в) – ψ = 11^0; (г) – ψ = 13^0.

рассеянных ионов с использованием численного моделирования. Анализ полученных результатов показал, что формирование данного пика обусловлено в основном зеркальным рассеянием ионов под углом θ = 14^0. Это означает, что ионы отражаются от практически идеальной гладкой части поверхности кристалла без существенного взаимодействия с атомами ступеней. Энергия этих ионов лежит в диапазоне 966–971 эВ.

На рис. 3б представлено энергетическое распределение рассеянных ионов при ψ = 9^0. Пик, расположенный на высокоэнергетической части спектра, относится к ионам, рассеянным на θ = 18^0 (зеркальное рассеяние). Их энергия лежит в диапазоне 940–968 эВ. А пик, расположенный при энергии 230–420 эВ, относится к ионам, рассеянным от торцевого атома ступеньки, и их угол рассеяния равен θ = 90^0. Следует отметить, что в самой низкоэнергетической части спектра наблюдаются малоинтенсивные пики, относящиеся к деканалированным ионам. Их угол рассеяния θ>90^0. Расчет траектории деканалированных ионов показывает, что она сначала идет по прямой, а после захвата в канал, образованный за счет ступеньки, приобретает зигзагообразную форму. На рис. 3в показан энергетический спектр рассеянных ионов при ψ = 11^0. Наиболее интенсивный пик, сформированный в высокоэнергетической части спектра, относится к зеркально рассеянным ионам при θ = 22^0. До этого пика образовался пик ионов с углом рассеяния θ = 33^0. Ионы с энергией 500–600 эВ относятся к ионам, рассеянным при θ = 50^0. Малоинтенсивные пики, расположенные в низкоэнергетической части спектра, относятся к деканалированным ионам, причем их число незначительно.

На рис. 3г представлен энергетический спектр при ψ = 13^0. Интенсивный пик, сформированный в наиболее высокоэнергетической части, относится к зеркально рассеянным ионам от идеальной части поверхности. Пик, образованный при энергиях рассеянных ионов 700–800 эВ, относится к ионам, рассеянным при θ = 50^0. А пики, образованные при 100 и 350 эВ, относятся к ионам, рассеянным при θ = 90^0. Малоинтенсивные пики деканалированных ионов образовались в диапазоне энергий 200–300 эВ.

ВЫВОДЫ

Нами получена зависимость $E(\theta)$ рассеянных ионов Ar^+ от ступенчатой поверхности InP(001)<$\bar{1}$10) при разных значениях угла падения при начальной энергии E_0=5 кэВ. Расчеты показали, что до ψ = 7^0 наблюдается зеркальное

рассеяние ионов. С $\psi = 9^0$ происходит рассеяние ионов на углы, превышающие угол зеркального рассеяния, и наблюдается рассеяние на большие углы (до $\theta = 120^0$). Это объясняется тем, что ионы, захваченные поверхностным каналом, при выходе из него рассеиваются на большие углы. Энергетические спектры рассеянных ионов также подтверждают наличие рассеяния как от идеальной, так и от дефектной части поверхности. В спектрах наблюдаются пики зеркально рассеянных ионов и ионов, рассеянных от торцевого атома и деканалированных от поверхностного канала, образованного атомами ступеней.

Таким образом, изучение рассеяния ионов от дефектных поверхностей не только расширяет наши знания о фундаментальных аспектах взаимодействия ионов с твердым телом, но и открывает новые возможности для диагностики и модификации материалов на атомном уровне.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Muñoz -Marquez, M. A., Parkinson, G. S., Woodruff, D.P., Hentz, A., et al., Energy loss in medium-energy ion scattering: A combined theoretical and experimental study of the model system Y on Si(111), *Phys. Rev. B*, 2005, vol. 72, no. 7, art. ID 075415.
   https://doi.org/10.1103/PhysRevB.72.075415
2. Parkinson, G.S., Muñoz-Márquez, M.A., Quinn, P.D., Gladys, M.J., et al., The methanethiolate-induced pseudo-(100) reconstruction of Cu(111): A medium energy ion scattering structure study, *Surface Science*, 2005, vol. 598 (1–3). p. 209. ISSN 0039-6028
3. Karimov, M.K., Kutliev, U.O., Khajieva, I.A., Bobojonova, S.B., et al., Study of defect InGaP(001) surface by the low energy ion scattering spectroscopy, *AIP Conference Proceedings*, 2022, vol. 2467, 020018. https://doi.org/10.1063/5.0092420
4. Kutliev, U.O., Otabaev, M.U., and Karimov M.K., Investigation Ne ions scattering from the stepped InP 001) <$\bar{1}$10> surface, *Journal of Physics: Conference Series*, 2022, 2388(1), 012092.
5. Brown, D., Quinn, P.D., Woodruff, D.P., Bailey P., et al., MEIS structural study of the Ni(111)((3x(3)R30(- Pb surface phase), *Phys .Rev. B.*, 2000, vol. 61, p. 7706.
   https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.7706
6. Brown, D., Woodruff, D.P., Noakes, T.C.Q., and Bailey, Paul () CN-induced surface layer expansion of Ni(110): a MEIS study, *Surface Science*, 2001, 476 (3), L241-L246. ISSN 0039-6028.
7. Donaev, S.B., Tashatov, A.K., and Umirzakov, B.E., Effect of Ar^+ Ion Bombardment on the Composition and Structure of the Surface of $CoSi_2$/ Si(111) Nanofilms, *Journal of surface investigation*, 2015, vol. 9, p. 406.
   https://doi.org/10.1134/S1027451015020263
8. Isakhanov, Z.A., Mukhtarov, Z.E., Umirzakov, B.E., and Ruzibaeva, M.K., Optimum ion implantation and annealing conditions for stimulating secondary negative ion emission, *Technical physics*, 2011, vol. 56, no. 4, p. 546.
   doi: 10.1134/S1063784211040177
9. Pedemonte, L., Tatarek, R., Aschoff, M., Bruning, K., et al., Surface structure and dynamics of the Ag(110) surface studied by low energy ion scattering, *Nucl. Instr. and Method in physics B*, 2000, vol. 164–165, p. 645.
   https://doi.org/10.1016/S0168-583X(99)01044-7
10. Danailov, D.M., Pfandzelter, R., Igel, T., and Winter, H., Show more Multimodal angular distributions in grazing scattering of fast He-atoms from Fe(001) surfaces *Nucl. Instr. and Method in physics B*, 2000, vol. 164-165, p. 583.
    https://doi.org/10.1016/S0168-583X(99)01145-3
11. Robinson, M., and Torrens, I., Computer simulation of atomic displacement cascades in solids in the binary-collision approximation, *Phys. Rev. B*, 1974, vol. 9, p. 5008.
12. Dzhurakhalov, A.A., and Umarov, F.F., Anomalous inelastic energy losses and trajectory effects at small angle ion scattering by single crystal surface, *Instrum. Methods Phys. Res. B*, vol. 136–138, p. 1092.
13. Zhang, Sh., van Den Berg, J.A., Armour, D.G., Whelan, S., et al., Medium energy ion scattering analysis of damage in silicon caused by ultra-low energy boron implantation at different substrate temperatures, IEEE Publishing, 2000, ISBN 20000-7803-6462-7
14. Ziegler, J.F., Ziegler, M.D., and Biersack, J.P., SRIM – The stopping and range of ions in matter, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B.*, 2010, vol. 268, no. 11-12, p.1818. https://doi.org/10.1016/j.nimb.2010.02.091
15. Parilis, E.S., Kishinevsky, L.M., Turaev, N.Yu., Baklitzky, B.E., et al., *Atomic Collisions on Solid Surfaces*, North- Holl. Publ., 1993, 664 p.
16. Kutliev, U.O., Karimov, M.K., and Otaboev, M.U., Orientation Effects during Scattering of Ar^+ Ions from the InP(001) Surface under Grazing-Angle Ion Bombardment, *Inorganic Materials: Applied Research*, 2020, vol. 11, no. 3, p. 503.

Summary

This paper presents the results of computer simulations of scattered Ar^+ ions from a stepped InP(001)<$\bar{1}$10> surface at different incidence angles using the binary collision approximation method. The dependence of the energy of scattered ions on their scattering angle was obtained, and it is shown that at small incidence angles, scattering occurs from the ideal part of the surface. An increase in the incidence angle leads to ion scattering from the atomic step modeled on the surface. The obtained results demonstrate that, during scattering from the stepped surface, oval- shaped features appear in the $E(\theta)$ dependence of scattered ions, corresponding to multiple scattering at the same scattering angle. Energy spectra were also obtained, confirming that with increasing the incidence angle of ions, peaks appear corresponding to specularly scattered ions, ions scattered from the edge atom, and dechanneled ions.

Keywords: ion scattering, dechanneling, computer simulation, defects