

МОДЕЛИРОВАНИЕ КАРТИН ДИФРАКЦИИ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ 2D СТРУКТУР

Богомазов Н.С.¹, студент гр.740301

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники¹
г. Минск, Республика Беларусь

Комиссаров И.В. – канд. физ.-мат. наук

В работе представлен алгоритм симуляции дифракционных картин быстрых отраженных электронов посредством языка программирования JS, а также получение данных для дальнейшей обработки и их анализа.

Одним из перспективных направлений для приложений графена является использование его в качестве буферного слоя на аморфных подложках для эпитаксиального роста пленок широкозонных нитридных полупроводников. Как было показано в работе [1], осажденные пленки GaN/AlN характеризуются присутствием двух фракций кристаллитов со взаимным углом поворота 30° в плоскости пленки. В связи с этим становится актуальной проблема контроля качества кристалличности буферного слоя графена, как задающего качество эпитаксиальной пленки осажденной на нем.

Целью моей работы является разработка алгоритма симуляции дифракционных картин быстрых отраженных электронов для двумерных структур, таких как графен. Симуляция учитывает переход в обратное пространство и входные параметры, такие как:

- энергия электронов источника;
- размер кристаллита;
- чувствительность прибора;
- угол поворота подложки.

На рисунке 1 представлен пример типичной дифракционной картины (дифрактограммы) исследуемого графена. Ниже описано теоретическое обоснование такого результата.



Рисунок 1 – Типичная дифрактограмма графена полученная методом RHEED

На рисунке 2 представлена прямая решетка с трансляционными векторами \vec{a}_1 и \vec{a}_2 для графена в двумерном пространстве. По формулам перехода к обратному пространству можно получить трансляционные вектора \vec{b}_1 и \vec{b}_2 , с использованием которых была построена двумерная обратная решетка графена (см. рисунок 3).

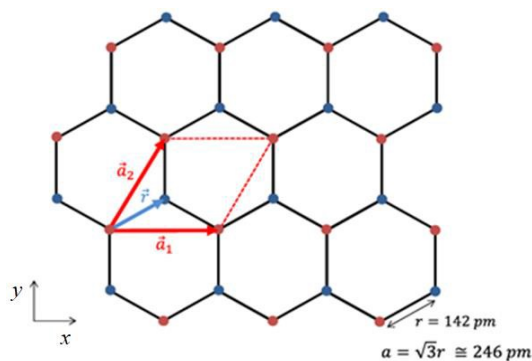


Рисунок 2 – Прямая решетка графена

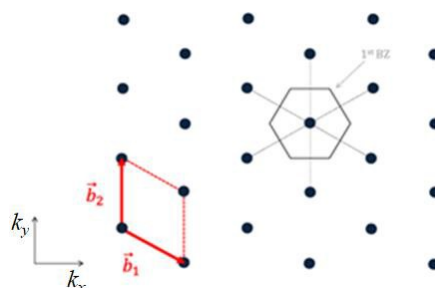


Рисунок 3 – Обратная решетка графена

В трехмерном пространстве обратная решетка представляет собой гексагональную решетку бесконечно длинных проводов (см. рисунок 4), поскольку вектор \vec{b}_1 , перпендикулярный плоскости XY, обратно пропорционален межплоскостному расстоянию C, которое для однослойного графена принимается стремящимся к нулю.

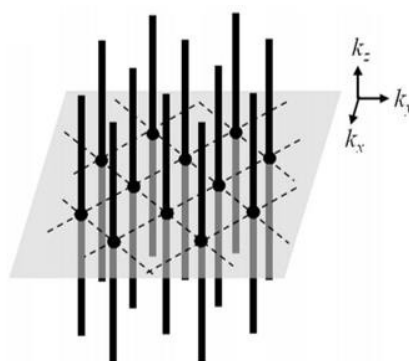


Рисунок 4 – Обратная решетка графена в трехмерном пространстве

Метод RHEED реализуется следующим образом. В установку, состоящую из электронной пушки (источника электронов с заданной энергией), держателя образца и детектора (см. рисунок 5) помещается образец на держатель. Далее под скользким углом направляется электронный луч, в результате взаимодействия которого с образцом на детектор приходят дифрагированные лучи отраженных электронов.

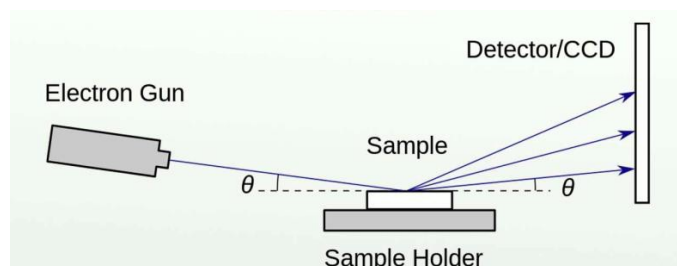


Рисунок 5 – Упрощенная схема установки RHEED

Согласно [2] условием дифракции является нахождение точек (проводов в трехмерном случае) обратного пространства на поверхности (внутри) сферы Эвальда (см. рисунок 6). При выполнении этих условий на детекторе будут наблюдаться полосы.

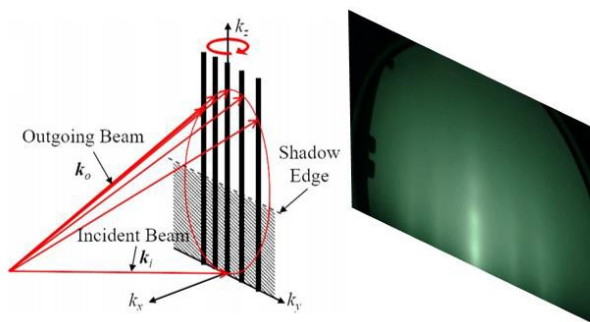


Рисунок 6 – Графическое представление условия дифракции

Дифракционная картина, представленная на рисунке 1, не является статичной и является функцией азимутального угла φ - угла поворота образца вокруг оси, перпендикулярной плоскости образца.

Авторами работы [3] был предложен метод анализа дифракционных данных, при котором строится зависимость интенсивности дифракции (яркости флуоресцентного экрана вдоль выделенной толстой пунктирной линии, см. рисунок 7) от азимутального угла.

Данный метод получил название азимутальной дифракции быстрых отраженных электронов (АДБОЭ, ARHEED). На рисунке 8 представлен полученный мною в результате обработки RHEED-данных ARHEED-картина для графена, представляющая собой его обратное пространство (угол соответствует азимутальному углу поворота образца).

Согласно рисунку 8 исследуемый графен состоит из двух фракций кристаллитов, повернутых друг относительно друга на 30° . Данное утверждение согласуется с рентгеновскими данными для кристаллической структуры GaN/AlN, осажденной на таком графене.

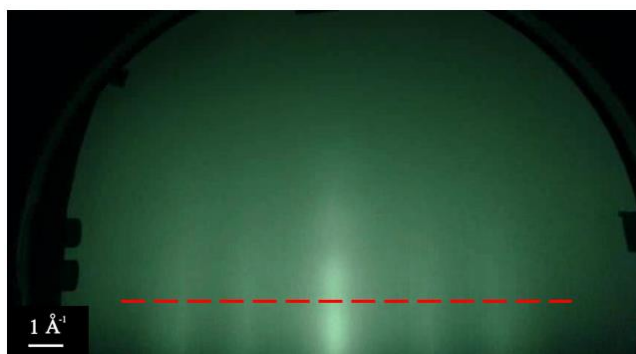


Рисунок 7 – Типичная дифрактограмма графена полученная методом RHEED с демонстрацией анализируемого профиля

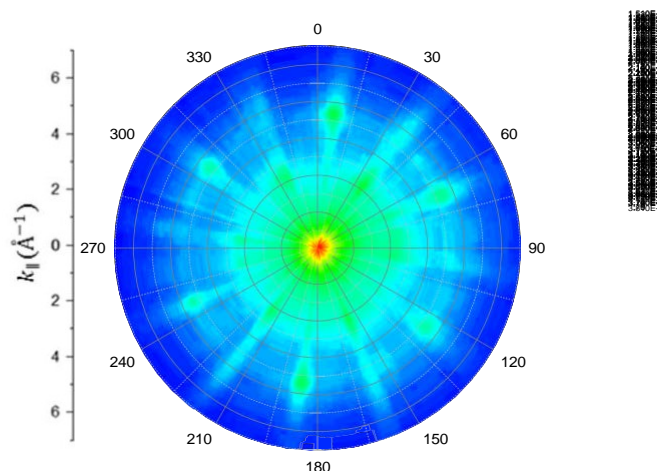


Рисунок 8 – Картина АДБОЭ буферного слоя графена

Для расчета и дальнейшего построения модели обратного пространства и моделирования дифрактограммы в разработанной мною программе вводятся исходные данные о структуре, которые изображены на рисунке 9.

Electron energy[eV * 10 ³ , 10-250]	<input type="text" value="60"/>
Circle radius[Å ⁻¹ , 0.2-1]	<input type="text" value="0.7"/>
Lattice constant [Å, 1-4]	<input type="text" value="2.46"/>
Angle	<input type="text" value="0"/>

Рисунок 9 – Исходные данные, задаваемые для моделирования

Энергия электронов (в эВ) используется для расчета радиуса сферы Эвальда по формуле:

$$k = 0.512\sqrt{E} \text{ \AA}^{-1}, \text{ где} \quad (1)$$

E – энергия электронов, выраженная в эВ

Трансляционные вектора обратной решетки (\vec{b}_i) выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -1, 0 \right) & |\vec{b}_1| &= \frac{2\pi}{a} \frac{2}{\sqrt{3}} \\ \vec{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1, 0 \right) & |\vec{b}_2| &= \frac{2\pi}{a} \frac{2}{\sqrt{3}} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -1/2, 0 \right) & |\vec{a}_1| &= a = 2.46 \text{ \AA} \\ \vec{a}_2 &= a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, 1/2, 0 \right) & |\vec{a}_2| &= a = 2.46 \text{ \AA} \end{aligned} \quad (3)$$

Радиус —кружков задается для учета чувствительности прибора и конечности кристалла, из-за чего точка решетка Бравэ в обратном пространстве имеет конечные размеры.

С помощью рассчитанных данных, задаваемых для анализа определенных состояний кристаллической решетки графена, комплекс программы создает обратную решетку с дальнейшим математическим расчетом параметров, необходимых для построения дифрактограммы.

Работу данного этапа программы можно разделить на несколько этапов:

1. Построение осей по x (используется как приближение сферы Эвальда ввиду ее больших размеров по сравнению с изучаемой областью) и y .
2. Построение сферы Эвальда с упрощением до модели —круга Эвальда.
3. Построение гексагональной обратной решетки графена.
4. Расчет соприкосновения —кружков со сферой Эвальда. Включает окрашивание их контуров в красный цвет, их —пустое заполнение и подчеркивание точек пересечения для более точной настройки программы.
5. Передача данных, полученных при этапе 4 в код программы, создающий дифрактограмму для данной обратной решетки и угла.

Результат выполнения данной части программы изображен на рисунке 10.

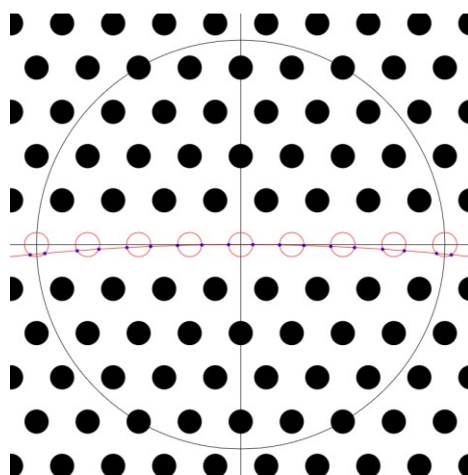


Рисунок 10 – Область обратной решетки, построенная программой

2.3 Получение данных моделирования для дальнейшей обработки

После получения данных пересечения —кружков со сферой Эвальда вычисляются трансляционные вектора для построения дифрактограммы (рисунок 11), которые затем вносятся в массив, содержащий данные данной дифрактограммы для конкретного угла. Данный массив затем преобразуется в строку для внесения в массив для полного вращения решетки с индексом угла, на котором он был получен.



Рисунок 11 – Дифрактограмма смоделированной обратной решетки графена

Для получения данных, рассчитанных в результате моделирования, используются три функции, позволяющие записать в файл необходимые данные:

– Функция `—rolling outll` используется для вращения решетки и заполнения массива данных при вращении решетки на 360 градусов.

– Функция `—data for single anglell` используется для получения данных для одного угла, она создает файл в формате `txt`, содержащий вводимые данные и строку с данными дифрактограммы для определенного угла.

– Функция `—data for the whole circlell` используется для получения данных для полного оборота решетки после заполнения массива данных первой функцией, а также вводимых данных. Пример полученных данных изображен на рисунке 12.

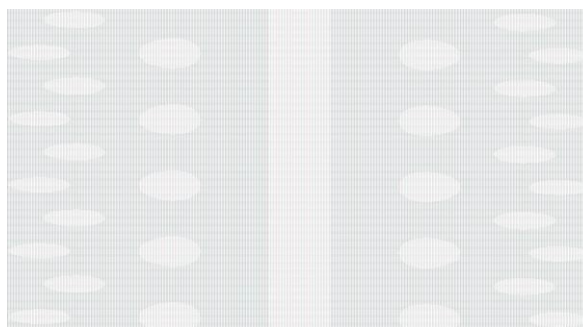


Рисунок 12 – Пример полученного массива с дифрактограммами при вращении на 360 градусов

Дальнейший анализ и обработка данных, полученных в результате данного моделирования, проводится с помощью программного комплекса Origin.

Результаты данной работы:

- разработан алгоритм симуляции дифракционных картин БОЭ на 2D-структурах Бравэ;
- построены картины БОЭ для разных размеров кристаллита и энергий электронов;

Список использованных источников:

1. Borisenko D. P. et al. Plasma assisted-MBE of GaN and AlN on graphene buffer layers // *Japanese Journal of Applied Physics*. – 2019. – Т. 58. – №. SC. – С. SC1046.
2. Xiang Y. et al. Reflection high-energy electron diffraction measurements of reciprocal space structure of 2D materials // *Nanotechnology*. – 2016. – Т. 27. – №. 48. – С. 485703.
3. Lu Z. et al. Revealing the crystalline integrity of wafer-scale graphene on SiO₂/Si: an azimuthal RHEED approach // *ACS applied materials & interfaces*. – 2017. – Т. 9. – №. 27. – С. 23081-23091.
4. Murdock A. T. et al. Controlling the orientation, edge geometry, and thickness of chemical vapor deposition graphene // *ACS nano*. – 2013. – Т. 7. – №. 2. – С. 1351-1359.