

# МОДЕЛИРОВАНИЕ КАРТИН ДИФРАКЦИИ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ 2D СТРУКТУР

Богомазов Н.С.<sup>1</sup>, студент гр.740301

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники<sup>1</sup>  
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. 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).

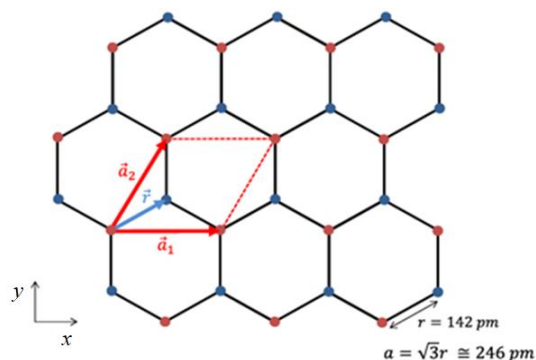


Рисунок 2 – Прямая решетка графена

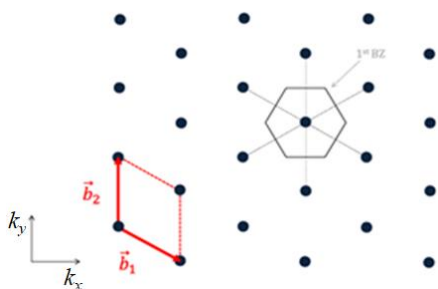


Рисунок 3 – Обратная решетка графена

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.

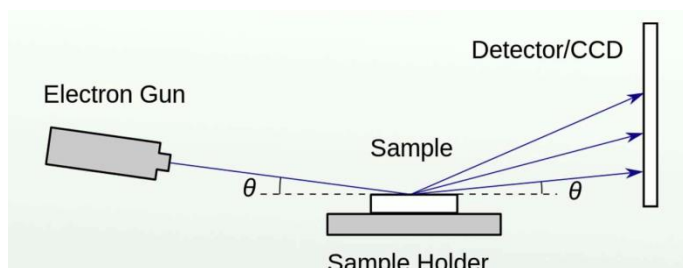


Рисунок 5 – Упрощенная схема установки RHEED

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

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 1) от азимутального угла.

Данный метод получил название азимутальной дифракции быстрых отраженных электронов (АДБОЭ, ARHEED). На рисунке 6 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 6 исследуемый графен состоит из двух фракций кристаллитов, повернутых друг относительно друга на 30°.

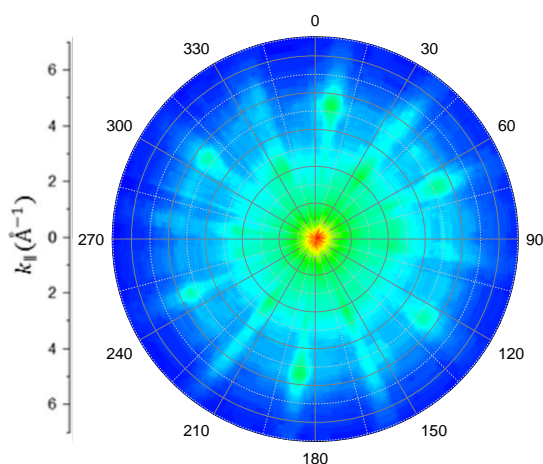


Рисунок 6 – Картина АДБОЭ буферного слоя графена

Для расчета и дальнейшего построения модели обратного пространства и моделирования дифрактограммы в разработанной мною программе вводятся исходные данные о структуре.

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 ( $\vec{b}$ ) выражаются следующим образом:

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

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

Радиус “кружков” задается для учета чувствительности прибора и конечности кристалла, из-за чего точка решетки 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:

6. Построение осей по  $x$  (используется как приближение сферы Эвальда ввиду ее больших размеров по сравнению с изучаемой областью) и  $y$ .
7. Построение сферы Эвальда с упрощением до модели “круга Эвальда”.
8. Построение гексагональной обратной решетки графена.
9. 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.
10. 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 7.

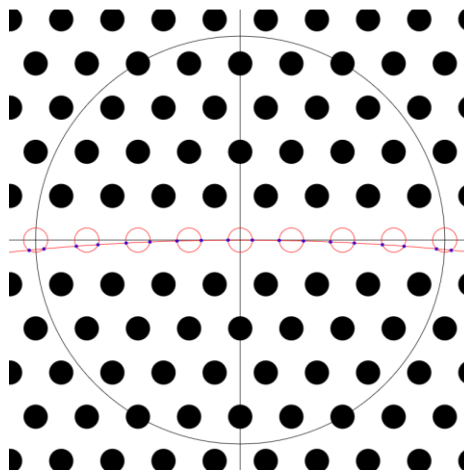


Рисунок 7 – Область обратной решетки, построенная программой

После получения данных пересечения “кружков” со сферой Эвальда вычисляются трансляционные вектора для построения дифрактограммы, которые затем вносятся в массив, содержащий данные данной дифрактограммы для конкретного угла.

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 SiO<sub>2</sub>/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.