

02;03

Упругое рассеяние атомных пар Mo–Mo, Mo–S и S–S в диапазоне относительных кинетических энергий 2–200 eV

© А.П. Палов

Научно-исследовательский институт ядерной физики
им. Д.В. Скобельцына Московского государственного университета
им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
E-mail: a_palov@mail.ru

Поступило в Редакцию 6 февраля 2018 г.

Бинарные межатомные потенциалы Mo–Mo, Mo–S и S–S, апробированные методом молекулярной динамики, использованы для расчета сдвигов фаз и сечений упругого рассеяния атомов в диапазоне относительных кинетических энергий 2–200 eV. Ожидается, что полученные дифференциальные и интегральные сечения рассеяния будут полезны для описания распыления нанометровых слоев MoS₂, при проектировании перспективных устройств наноэлектроники и фотоники.

DOI: 10.21883/PJTF.2018.10.46101.17243

Пленки MoS₂ с толщинами от одного молекулярного слоя (~ 0.65 nm) до нескольких десятков нанометров считаются перспективными 2D-полупроводниками для создания гибких устройств наноэлектроники и фотоники [1]. Они обладают такими полезными свойствами, как изменение ширины запрещенной зоны (1.3–1.8 eV) и подвижности носителей заряда (~ 100–300 cm² · V⁻¹ · s⁻¹) в зависимости от толщины пленки [2].

В случае распыления пленок MoS₂ низкоэнергетическими атомами происходит преимущественное выбивание частиц меньшей массы, т.е. атомов серы, приводящее к возникновению на поверхности MoS₂ проводящего слоя, состоящего из молибдена [3], что дает дополнительные возможности при проектировании устройств наноэлектроники и фотоники.

Распыление обычно описывают с помощью уравнения Больцмана при известных сечениях рассеяния [4] и метода молекулярной динамики

Параметры бинарных потенциалов в уравнении (1) для нанометровых пленок MoS₂ (взяты из работы [7])

Атомная пара	A, eV	ρ , Å	B, Å ⁴	r_{\max} , Å
Mo–S	6.0672	0.7590	15.0787	3.16
S–S	0.4651	0.6501	22.3435	3.76
Mo–Mo	3.5040	0.6097	25.1333	4.27

(МД) при известных потенциалах межатомного взаимодействия [5]. Использование метода МД помогает понять энергетические и угловые закономерности распыления и рассчитать такие важные параметры, как объемная и поверхностная энергии связи атомов в твердом теле. Из-за высоких требований к компьютерным ресурсам применение метода МД к реальным задачам нанoeлектроники ограничено, и основным подходом при моделировании наноустройств до сих пор остается метод Монте-Карло (МК). Цель настоящей работы — рассчитать используемые в методе МК квантово-механические дифференциальные и интегральные сечения упругого рассеяния пар атомов, состоящих из Mo и S.

Самый прямой и надежный путь для выбора потенциалов состоит в использовании бинарной части эмпирических трехчастичных потенциалов, апробированных методом МД для нанометровых пленок MoS₂. В данной работе для описания упругого рассеяния исследуемых атомных пар применяется бинарный потенциал вида [6]

$$V(r) = \begin{cases} A \exp\left(\frac{\rho}{r - r_{\max}}\right) \left(\frac{B}{r^4 - 1}\right), & r < r_{\max}, \\ 0, & r \geq r_{\max}, \end{cases} \quad (1)$$

параметры A, ρ , B и r_{\max} которого приведены в таблице.

На рис. 1 показаны потенциалы, использованные в настоящей работе для атомных пар Mo–Mo, Mo–S и S–S. Хорошо видно, что все три потенциала имеют области притяжения с ямами разной глубины: 0.15 eV и равновесным расстоянием $R_e = 1.549$ Å для пар S–S, 1.52 eV и $R_e = 3.119$ Å для пар Mo–Mo и 1.21 eV и $R_e = 2.366$ Å для пар Mo–S.

Фазовые сдвиги $\delta_l(E)$ определялись путем анализа решения радиального уравнения Шредингера в асимптотической области для

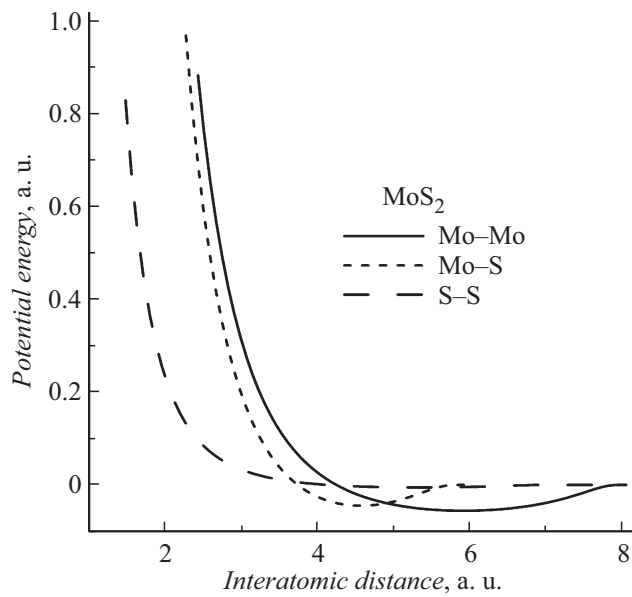


Рис. 1. Потенциальная энергия атомных пар Mo–Mo, Mo–S и S–S, используемая при описании свойств и распыления нанометровых пленок MoS₂.

относительной кинетической энергии атомов E в диапазоне 2–200 eV. Расчеты фазовых сдвигов проводились до значения 0.001 rad, что для 200 eV соответствовало максимальному орбитальному квантовому числу $l_{\max} = 4316$ для Mo–Mo, $l_{\max} = 4214$ для Mo–S и $l_{\max} = 4539$ для пары S–S. Полученные значения $\delta_l(E)$ затем были использованы для расчетов дифференциального и интегрального сечений упругого рассеяния.

Дифференциальное сечение (ДС) рассеяния пары Mo–S в системе центра масс рассчитывалось на основе уравнения

$$\frac{d\sigma_{CM}}{d\Omega}(E, \theta) = \left| \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{k} e^{i\delta_l(E)} \sin \delta_l(E) P_l(\cos \theta) \right|^2, \quad (2)$$

где $P_l(\cos \theta)$ — l -й полином Лежандра, а $k = \{2\mu_{\text{Mo-S}}E/\hbar^2\}^{1/2}$ — волновой вектор, θ — угол рассеяния в системе центра масс молекулы

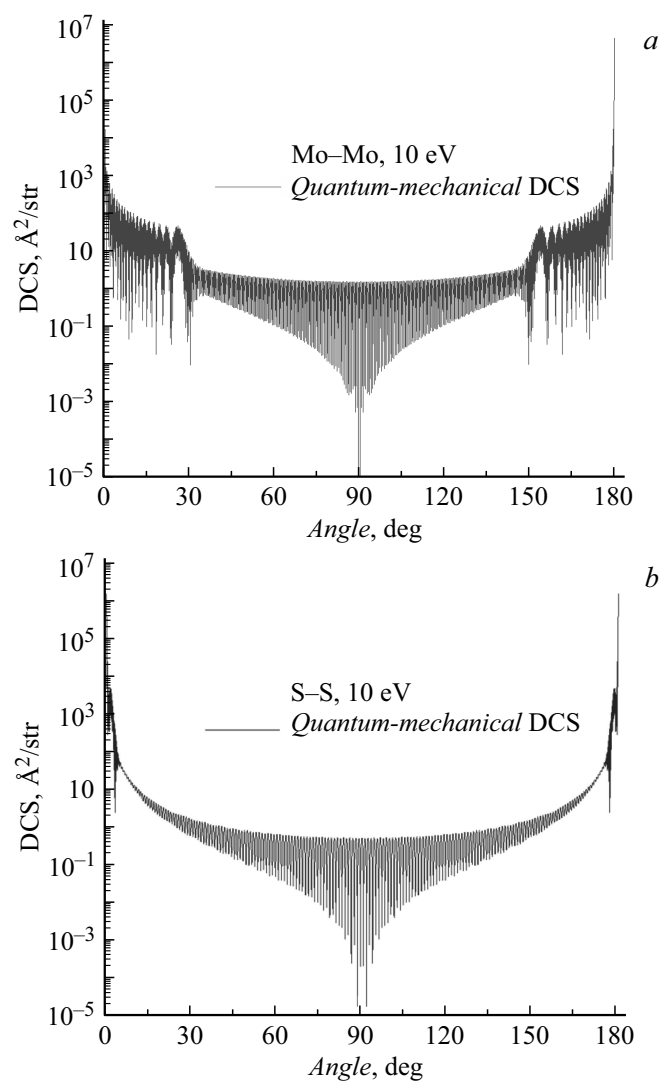


Рис. 2. Дифференциальное сечение рассеяния (DCS) атомных пар Mo–Mo (*a*), S–S (*b*) и Mo–S (*c*) для относительной кинетической энергии 10 eV как функция угла рассеяния в системе центра масс атомной пары.

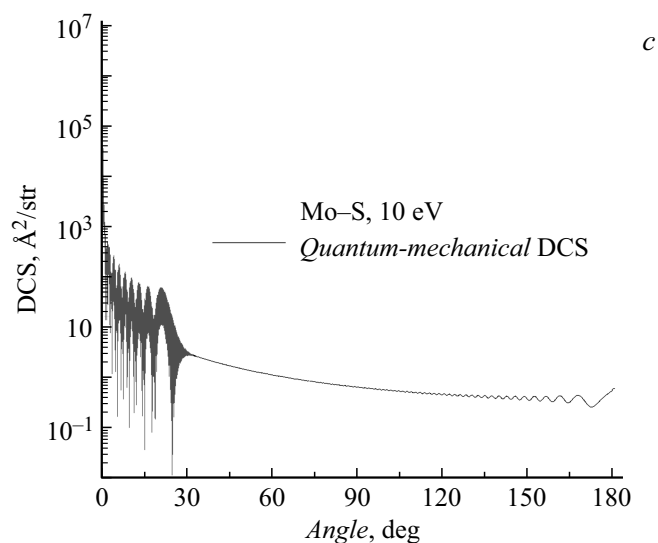


Рис. 2 (продолжение).

Mo-S, $\mu_{\text{Mo-S}}$ — приведенная масса молекулы Mo-S, E — кинетическая энергия относительного движения атомов Mo и S.

ДС рассеяния пар тождественных атомов Mo-Mo и S-S в системе центра масс рассчитывалось на основе уравнения [8]

$$\frac{d\sigma_{CM}}{d\Omega}(E, \theta) = 2 \left| \sum_{l=0,2,4,\dots}^{\infty} \frac{(2l+1)}{k} e^{i\delta_l(E)} \sin \delta_l(E) P_l(\cos \theta) \right|^2, \quad (3)$$

где $k = \{2\mu E/\hbar^2\}^{1/2}$ — волновой вектор, θ — угол рассеяния в системе центра масс молекул Mo-Mo или S-S, μ — приведенная масса молекулы Mo-Mo или S-S, E — кинетическая энергия относительного движения атомов Mo и Mo или S и S.

Расчет интегральных сечений проводился по аналитическим формулам, полученным интегрированием выражений (2), (3) по всем полярным и азимутальным углам.

На рис. 2 представлены дифференциальные сечения атомных пар Mo-Mo (a), S-S (b) и Mo-S (c) для относительной кинетической

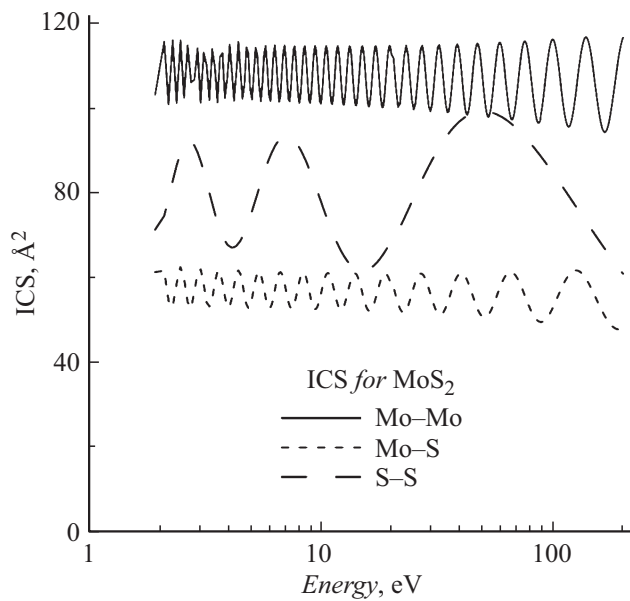


Рис. 3. Зависимость интегрального сечения упругого рассеяния (ICS) атомных пар Mo–Mo, S–S и Mo–S от относительной кинетической энергии атомов.

энергии 10 eV как функция угла рассеяния в системе центра масс атомной пары. В случае тождественных атомов (рис. 2, *a* и *b*) видно, что ДС зеркально-симметричны относительно угла 90° . Для наиболее тяжелой пары Mo–Mo (рис. 2, *a*) хорошо видны максимумы при радужных углах (близких к 30° и 150°), соответствующие положению сингулярности в классическом ДС. Для пары Mo–S (рис. 2, *c*) радужный угол равен 25° , а ДС падает почти монотонно с дальнейшим увеличением угла рассеяния.

На рис. 3 изображены интегральные сечения упругого рассеяния атомных пар как функции относительной кинетической энергии. Главной отличительной чертой полученных интегральных сечений является наличие хорошо распознаваемых глори-осцилляций. Согласно [9], количество глори-максимумов равно числу связанных состояний, существующих для исследуемого потенциала. В случае пар Mo–Mo, Mo–S и

S–S число таких состояний равно 65, 27 и 13 соответственно. На рис. 3 для всех трех потенциалов изображена лишь часть таких максимумов.

Автор ожидает, что дифференциальные и интегральные сечения упругого рассеяния, полученные для парных потенциалов атомов, входящих в состав пленок MoS₂, будут применяться при описании распыления либо при решении кинетического уравнения, либо при использовании метода МК для типичных энергий плазма-процессинга, т. е. 2–200 eV.

Все фазовые сдвиги и сечения упругого рассеяния рассчитывались с помощью программ, созданных в НИИЯФ МГУ.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М.В. Ломоносова [10] при поддержке Российского научного фонда (проект № 14-12-01012).

Автор благодарен Е.Н. Ворониной (физический факультет МГУ) за плодотворные дискуссии.

Список литературы

- [1] Tsai M.-L., Su S.-H., Chang J.-K., Tsai D.-S., Chen C.-H., Wu C.-I., Li L.-J., Chen L.-J., He J.-H. // *ACS Nano*. 2014. V. 8. P. 8317–8322.
- [2] Pradhan N.R., Rhodes D., Zhang Q., Talapatra S., Terrones M., Ajayan P.M., Balicas L. // *Appl. Phys. Lett.* 2013. V. 102. P. 123105.
- [3] Ma Q., Odenthal P.M., Mann J., Le D., Wang C.S., Zhu Y., Chen T., Sun D., Yamaguchi K., Tran T., Wurch M., McKinley J.L., Wyrick J., Magnone K.M., Heinz T.M., Rahman T.S., Kawakami R., Bartels L. // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2013. V. 25. P. 252201.
- [4] Aiello D., Pletnev V.V., Falcone G., Forlano L. // *Nuovo Cimento D*. 1994. V. 16. P. 75–88.
- [5] Ghorbani-Asl M., Kretschmer S., Spearot D.E., Krasheninnikov A.V. // *2D Mater.* 2017. V. 4 P. 025078(1–9).
- [6] Stillinger F.H., Weber T.A. // *Phys. Rev. B*. 1985. V. 31 P. 5262–5271.
- [7] Jiang J.-W., Park H.S., Rabczuk T. // *J. Appl. Phys.* 2013. V. 114 P. 064307.
- [8] Balint-Kurti G.G., Palov A.P. *The theory of molecular collisions*. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2015. 294 p.

- [9] *Bernstein R.* // J. Chem. Phys. 1960. V. 33. P. 795–804.
- [10] *Sadovnichy V., Tikhonravov A., Voevodin Vl., Opanasenko V.* „Lomonosov“: supercomputing at Moscow State University // Contemporary high performance computing: from petascale toward exascale. Ser. Chapman & Hall/CRC Comput. Sci. Boca Raton: CRC Press, 2013. P. 283–307.