

## دراسة نظرية لبعض الخواص البصرية لسطح المركب InAs(001) باستخدام اطياف الانعكاسية السطحية

سيناء منذر محمد علي\*

تاريخ قبول النشر 2006/6/27

### الخلاصة:

تم في هذا البحث دراسة سلوك ثابت العزل الكهربائي بجزائيه الحقيقي والخيالي لسطح المركب InAs(001) عند امتزازه بذرات احد الغازات كالاوكسجين مثلا ، وذلك باستخدام احدى طرق التحليل العددي (طريقة تطابق المربعات الصغرى الغير الخطية). تم ايضا بناء نموذج رياضي لربط المدخلات الطيفية لهذا السطح والحصول على ثابت العزل الكهربائي. اظهرت النتائج توافقا جيدا مع النتائج المنشورة والمعتمدة.

### المقدمة:

نستطيع دراسة المستويات السطحية من خلال نتائج تقنية اطياف الانعكاسية السطحية التفاضلية (Surface Differential Reflectivity Spectrum (SDR)) والتي هي عبارة عن تقنية بصرية تعتمد على قياس التغير في الانعكاسية الضوئية للسطح بوجود وبزوال المستويات السطحية نسبة الى مقدار الانعكاسية بزوال المستويات السطحية [5] والتي تعطى بالمعادلة الاتية [6] :

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{(R^{cleanInAs} - R^{O2/InAs})}{R^{cleanInAs}} \quad (1)$$

حيث:

$\Delta R / R$  : النسبة بين التغير بالانعكاسية الذي يحدث للعينة قبل وبعد التعرض لعملية الامتزاز بأحدى ذرات الغاز (وغالبا ما يكون O2 ) الى الانعكاسية R .

$R^{cleanInAs}$  : الانعكاسية عند سطح المركب InAs(001) النظيف.

$R^{O2/InAs}$  : الانعكاسية عند تعرض السطح InAs(001) لعملية الامتزاز بذرات غاز O2 .

سوف يتم في هذا البحث دراسة اطياف المركبتين الحقيقية والخيالية لـ ثابت العزل الكهربائي Dielectric Constant لسطح المركب

InAs(001) باستخدام اطياف تقنية SDR والتي تعطى بالمعادلة الاتية [7] :

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{4d\omega}{C \cos \theta \text{Im}} \left\{ \frac{[\epsilon_b(\omega) - \sin^2 \theta] \Delta \epsilon_{\perp}(\omega) + \epsilon_b^2(\omega) \sin^2 \theta [\epsilon_{\perp}(\omega)]^{-1}}{[\epsilon_b(\omega) - 1][\epsilon_b(\omega) \cos^2 \theta - \sin^2 \theta]} \right\} \quad (2)$$

حيث:

لقد ازداد الاهتمام في السنوات الاخيرة بدراسة الانتقالات البصرية الجارية على سطوح اشباه الموصلات والتغيرات التي تحدث عند امتزاز ذرات احد الغازات كالاوكسجين بسطح المادة ، وذلك لما لها اهمية بالغة في كثير من التطبيقات العملية .

الدراسة النظرية لتكوين سطوح اشباه الموصلات تساعدنا في التعرف على المواصفات ذلك السطح وخصائصه [1] فالسطح هو حالة تشويش للطبقة التحتية (bulk) ، ذلك لما تاخذه ذرات السطح من انماط للتوزيع تشابه او تخالف الترتيب الهندسي للذرات عند الطبقة التحتية والمحددة للتركيب البلوري (crystal structure) للمادة، ويأتي هذا من تأثير ما يسمى بـ استرخاء السطح (surface relaxation) في التركيب الالكتروني للسطح (surface unreconstruction) حيث يسبب هذا الاسترخاء تغييرا في المستويات السطحية هذه التغيرات تؤثر بدورها في الخواص البصرية ويعطي الاثنان معا سلوكا جديدا للمادة [2]

اغلب الجهود المبذولة لفهم الخواص البصرية لسطوح اشباه الموصلات تتجه دوما نحو دراسة ما يسمى بـ المستويات السطحية (surface state) التي هي عبارة عن مستويات الكترونية (منفصلة او متصلة ) متمركزة ضمن الفجوة الممنوعة (energy gap) التي تفصل بين حزمتي التكافؤ والتوصيل .

وتفهم هذه المستويات عن طريق ما يسمى بـ الأصرة المتدللية (dangling bond) [3] التي تعتبر السبب الرئيس في منشأ نطاقيين من المستويات السطحية ، النطاق الاول والذي تكون مستوياته مملوءة ويقع بالقرب من /تقسم حلوتينيا التكافؤ، والآخر الذي يقع في المنطقة الممنوعة وتكون مستوياته فارغة [4] .

يتم اعادة بناء السطح (surface reconstruction) من خلال عملية امتزاز السطح (adsorption) بغاز الاوكسجين مؤديا الى اختفاء هذه الاصرة وبالتالي زوال المستويات السطحية .

$$\varepsilon_2^s(\omega) = \sum_j \frac{A_j \Gamma_j \omega}{(\omega_j^2 - \omega^2) + \omega^2 \Gamma_j^2} \quad (5b)$$

وبادخال الطاقات  $(\hbar\omega)$  وقيم  $\Delta R/R$  والاعلومات  $(A_j \Gamma_j \omega)$  يصبح بالامكان حساب الجزئين الحقيقي والخيالي لثابت العزل الكهربائي المذكورين في المعادلة 5(a,b).

واخيرا فلا بد من الاشارة الى العلاقة التي تربط اطياف  $\Delta R/R$  مع الانتقالات الحادثة عند الطبقة التحتية bulk والتي تتمثل بالمعادلة الاتية :-

$$\frac{\Delta R}{R} = d \left[ A(\varepsilon_2^s - \varepsilon_{202}) - B(\varepsilon_1^s - \varepsilon_{102}) \right] \quad (6)$$

حيث:

$\varepsilon_{102}, \varepsilon_{202}$ : الجزء الحقيقي والخيالي لثابت العزل الكهربائي لطبقة الاوكسجين الممتازة مع ذرات سطح المركب InAs(001) على التوالي. A, B: كميتان تعبران عن الجزء الحقيقي والخيالي لثابت العزل الكهربائي للطبقة التحتية، والتي يمكن حسلها من المعادلتين الاتيتين [10]:

$$\left. \begin{aligned} A &= \frac{\varepsilon'_b - 1}{(1 - \varepsilon'_b)^2 + \varepsilon''_b{}^2} \\ B &= \frac{\varepsilon''_b}{(1 - \varepsilon'_b)^2 + \varepsilon''_b{}^2} \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

حيث:

$\varepsilon'_b, \varepsilon''_b$ : دالتي العزل الكهربائي للطبقة التحتية للمركب InAs(001) بجزئيهما الحقيقي والخيالي على التوالي.

#### الحسابات:

1. تم حل المعادلة 5(a,b)، باحدى طرق التحليل العددي وهي طريقة تطابق المربعات الصغرى غير الخطية (Non-Linear Least Square fitting) [12].  
2. تم بناء نموذج رياضي يتناول ربط المدخلات الطيفية لسطوح اشباه الموصلات

الموجودة في المعادلة 5(a,b) وهي  $(A_j \Gamma_j \omega)$ .  
3. تم بناء البرمجيات الخاصة لحساب (NLS-QF) وذلك لوصف خاصية العزل لسطح المركب InAs(001).

$\varepsilon_b(\omega)$ : ثابت العزل الكهربائي للطبقة التحتية والتي تحسب عن طريق [8].

d: سمك طبقة السطح = 5A0.

C: سرعة الضوء الساقط.

$\omega$ : تردد الفونون الساقط.

$\theta$ : زاوية السقوط.

$\Delta[\varepsilon_{\perp}(\omega)]^{-1}, \Delta\varepsilon_{11}$ : دالتي العزل الكهربائي لسطح InAs(001) عند سقوط الضوء المستقطب بمركبتين احدهما موازي والاخر عمودي على السطح النظيف للعينة عند تعرض السطح لعملية الامتزاز بذرات الاوكسجين على التوالي، ويعطيان بالمعادلة الاتية [8]:

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon_{11}(\omega) &= \varepsilon_{11}(\omega) - \varepsilon_{11}^{O2/InAs}(\omega) \\ \Delta[\varepsilon_{\perp}(\omega)]^{-1} &= [\varepsilon_{\perp}(\omega)]^{-1} - [\varepsilon_{11}^{O2/InAs}(\omega)]^{-1} \end{aligned} \quad (3)$$

يتم حساب دالتي العزل الكهربائي بجزئيهما الحقيقي والخيالي المعرفتين في المعادلة اعلاه عن طريق ايجاد اعلومات (parameters) تعطي افضل تطابق مع النتائج العملية وذلك باستعمال العلاقات الجبرية

بين الكميتين  $\Delta[\varepsilon_{\perp}(\omega)]^{-1}, \Delta\varepsilon_{11}$  مع قيم  $\Delta R/R$  وقياس احدهما بدلالة الاخرى. باستخدام هذه الطريقة نفترض ان الشكل العام للحل هو [9]:

$$\Delta\varepsilon^s(\omega) = \varepsilon_b + \sum_j \frac{A_j}{(\omega_j^2 - \omega^2) - i}$$

حيث:

$\Delta\varepsilon^s(\omega)$ : ثابت العزل الكهربائي لسطح InAs(001).

Aj: ثابت فيزيائي يصف الانتقالات الجديدة المرتبطة بعملية الامتزاز.

$\omega_j$ : تردد الفونون البصري الناتج عن اهتزازات الشبكة.

$\Gamma_j$ : ثابت فيزيائي يصف ظاهرة الاضمحلال البصري.

وعليه يكون الجزء الحقيقي والخيالي للكمية  $\Delta\varepsilon^s(\omega)$  هي كالآتي:

$$\varepsilon_1^s(\omega) = \varepsilon_b + \sum_j \frac{A_j (\omega_j^2 - \omega^2)}{(\omega_j^2 - \omega^2) + \omega^2 \Gamma_j^2} \quad (5a)$$

نجد من الشكل (a)3 حدوث انتقال بصري يظهر حول الطاقة (2.4eV) وقمة سالبة حول الطاقة (1.7eV) في المنحني (a)3 .

ان ظهور القمة الموجبة للمنحني (2x4) تعني حدوث امتصاص على طول الاتجاه [1-10] لسطح As ، وهذا الانتقال يعطي تفسيراً هاماً وهو حدوث انتقالات بصرية بين الطبقة التحتية (bulk-surface) والسطح وبين مستويات السطح نفسها (surface-surface) .

اما المنحني (a)3 فيملك قمة سالبة عند الطاقة (1.7eV) ، ويعني هذا حدوث امتصاص عالي في المستويات الالكترونية بالاتجاه [110] اي على طول الاصرة In-In على السطح .

الشكل 4(a,b) يمثل حساب دالة العزل الكهربائي بجزئها الحقيقي والخيالي للطبقة التحتية والمتمثلة

بالكميتين  $\epsilon''_b, \epsilon'_b$  وكما في المعادلة 7(a,b) مع حساب الكميتين (A,B) كدالة لطاقة الفوتون الساقط لسطح المركب InAs(001) على التوالي.

يبين الشكل 4(a,b) تأثير الطبقة التحتية bulk في الانتقالات البصرية الحادثة بين bulk والسطح من جهة ومستويات السطح نفسها من جهة اخرى ، والمتمثلة في الكمية B وكما في الشكل 4(b) هذا نجدها ذات قيم كبيرة اكبر من قيم A مما يؤدي الى عدم حدوث التطابق بين منحنيات الجزء الخيالي لدالة السطح وبين اطراف  $\Delta R/R$  وكما لاحظناه في الشكلين 2(a,b) و 5(a,b) .

### الاستنتاجات:

1- برهنت طريقة تطابق المربعات الصغرى الغير خطية بانها مفيدة في حساب الجزئين الحقيقي والخيالي لثابت العزل الكهربائي لسطح المركب InAs(001). حيث ان حسابنا لهذين الجزئين ساعدنا في معرفة الانتقالات البصرية بين المستويات السطحية نفسها وبين المستويات السطحية والطبقة التحتية وكما لاحظنا في الشكلين (1,2) على التوالي.

2- ان عملية امتزاز ذرات الاوكسجين بذرات سطح المركب InAs(001) كشف عن امكانية دراسة المستويات السطحية surface state عند الطاقات الاعلى والادنى من طاقة فجوة الطاقة .

3- حدوث انتقالات بصرية لسطح المركب InAs(001) عند الطاقات المتمركزة حول القيم (2.4,3.5,4.4)eV بعملية امتزاز ذرات الاوكسجين بذرات سطح المركب ، مما يعني الغاء او ازالة الكثير من المستويات السطحية بتلك العملية ، كما في الشكلين 2,3(a,b) على التوالي.

4. تمت مقارنة النتائج التي تم الحصول عليها لـ  $\Delta R/R$  مع ما متوفر من نتائج منشورة من قبل C.Goletti [10] .

### النتائج والمناقشة:

يمثل الشكل (1a) نتائج اطراف  $\Delta R/R$  في حالة امتزاز ذرات الاوكسجين بذرات سطح المركب InAs(001) كدالة لطاقة الفوتون وبالاتجاه (2x4) ويمثل الشكل (1b) الامتزاز في الاتجاه (4x2) ، والتي تم الحصول عليها باستخدام تقنية (SDR) عمليا والنمذجة الرياضية نظريا ، حيث ساعدت الطريقتان على اعطاء فكرة عن مفهوم التركيب الالكتروني لسطوح اشباه الموصلات بشكل عام ودراسة سطح المركب InAs(001) بشكل خاص. نجد من الشكل (1a) ان هنا ثلاث انتقالات ، الاول حدث عند الطاقة (2.4eV) وانتقال واسع حول الطاقين (3.5eV) ويستمر عند الطاقة (4.4eV) . بينما يظهر طيف سالب عند الطاقة (1.7eV) بالاتجاه (4x2) .

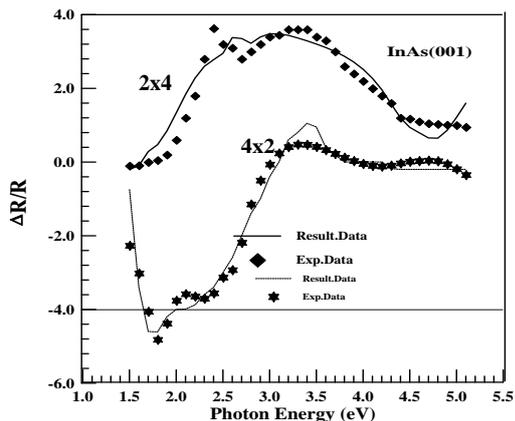
نجد اختلاف واضح بين الطورين (2x4) و (4x2) ، فالمنحني الاول يمثل اتجاه طبقة سطح المركب InAs(001) بالاتجاه [110] لاحتواء هذا الاخير على جزئين من In لكل وحدة خلية بينما يظهر الطيف السالب للتقنية (SDR) عندما يعاد ترتيب السطح من (2x4) الى (4x2) فيظهر انخفاض شديد حول القمة (1.7eV) ثم ظهور القمة الموجبة حول الطاقة (3.5eV) ويتوقف عند الطاقة (4.4eV) وهذا ما يمثله الشكل (1b) .

الشكل 2(a,b) يمثل سلوك الجزء الحقيقي لثابت العزل الكهربائي لسطح المركب InAs(001) كدالة لطاقة الفوتون الساقط وبالاتجاهين (2x4) ، (4x2) على التوالي ، والتي تم الحصول عليها بحل المعادلة 5(a,b) باحدى طرق التحليل العددي وهي طريقة تطابق المربعات الصغرى التقاضلية الغير الخطية وبرمجة هذا الحل بأحدى لغات البرمجة (لغة فورتران) .

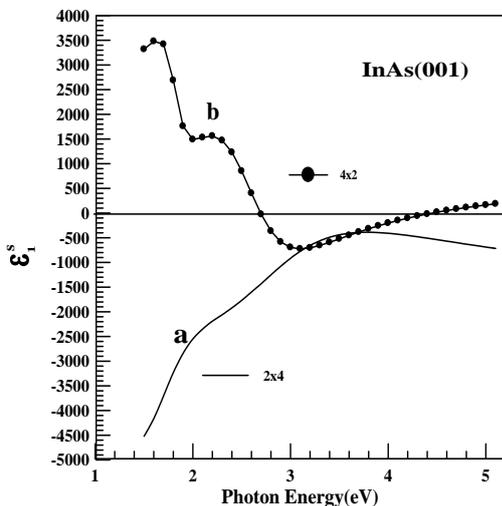
نجد من سلوك هذا الثابت حدوث انتقالات عند القيم السالبة وتزداد بزيادة عملية الامتزاز بذرات الاوكسجين ، يأتي هذا من تأثير الطبقة التحتية bulk ومساهمتها مع الانتقالات الحادثة عند سطح العينة وذلك بسقوط فوتونات بطاقات اعلى من طاقة فجوة الطاقة .

يتضح هذا التأثير في المعادلة (6) حيث يصبح الحد الثاني من المعادلة ذو قيم اكبر بكثير من قيم الحد الاول وهذا ما سوف نلاحظه في الشكل (4) .

الشكل 3(a,b) يمثل الجزء الخيالي لدالة العزل الكهربائي لسطح المركب InAs(001) وبالاتجاهين (2x4) ، (4x2) كدالة لطاقة الفوتون الساقط.



شكل ( 1 ) اطيف الانعكاسية السطحية لـ InAs(001). الخط المتصل يمثل النتائج النظرية المحسوبة من الموديل الرياضي، النتائج العملية أخذت من المصدر [10].



شكل ( 2 ) الجزء الحقيقي لثابت العزل الكهربائي لسطح InAs(001).

4- من دراسة سلوك الجزاين الحقيقي والخيالي لسطح المركب InAs(001) يتضح ارتباط المستويات السطحية بانطقة الأصرة المتدلالية (dangling bond).

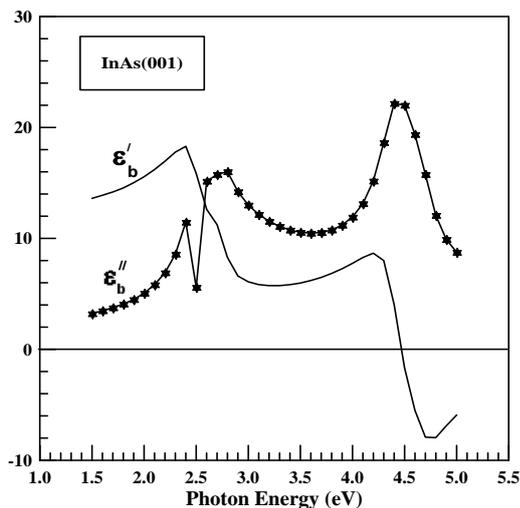
5- عدم وجود تطابق بين اطيف  $\Delta R/R$  واطيف الجزاين الحقيقي والخيالي لثابت العزل الكهربائي، وهذا بسبب تأثير الطبقة التحتية bulk المتمثلة

بالكميتين  $\epsilon''_b, \epsilon'_b$  المعرفتين في المعادلة 7(a,b).

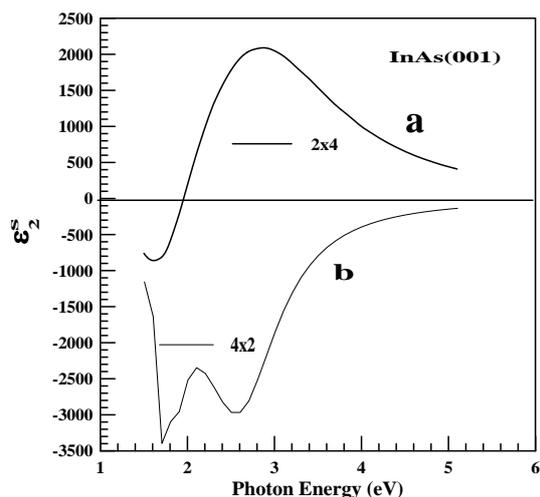
6- ان حسابنا لثابت العزل الكهربائي بجزايه الحقيقي والخيالي يساعدنا في حساب العدد الفعال للالكترونات لكل ذرة Neff، لاحقاً، والذي يشترك في الانتقالات البصرية.

### Reference:

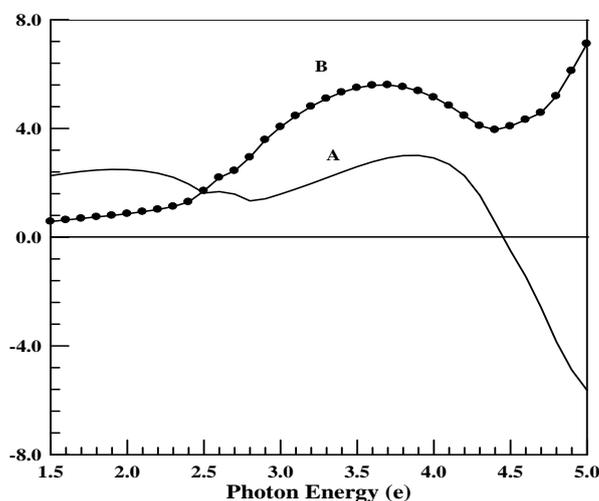
- 1- M.Henzler, Surfs. 25(1971)650.
- 2- Y.Luo, D.A.Slater, R.M.Osgood, Appl.Phys.Lett.67 (1995)55.
- 3- K.Brommer et al., Phys.Rev.Lett.68 (1992)1355.
- 4- R.O.Jones, Phys.Rev.Lett.20 (1968) 992.
- 5- S.Selci, J.Vac.Sci.Technol.A5 (1987) 827.
- 6- C.Nogucz et al., Phys.Rev.Lett.76 (1996)4923.
- 7- سينا منذر، مجلة أم سلمة للعلوم، العدد 16، 2004.
- 8- D.E.Aspen, A.A.Studna, Phys.Rev. B27 (1983)985.
- 9- J.Anderson, G.w.Rubloff, Phys.Rev. B10 (1974)2401.
- 10- C.Goletti, F.Arcprete, Phys.Rev.B64 (2001)193301.
- 11- T.R.Mccalla, " Introduction to Numerical Methods & Fortran programming", John Wiley & Sons, New York, 1967.



شكل ( 4 ) الجزء الحقيقي و الخيالي لثابت العزل الكهربائي للطبقة التحتية للمركب InAs(001)



شكل ( 3 ) الجزء الخيالي لثابت العزل الكهربائي لسطح InAs(001)



شكل ( 5 ) A,B المحسوبة من المعادلة ( 7 ) .

## Theoretical Studies of Sum Optical Properties for InAs (001) by Surface Differential Reflectivity S.M.AL-Mukhtar\*

\*Department of Physics-College of Science for Women, University of Baghdad-Jadiryah/Baghdad-iraq.

### Abstract:

The real and imaginary part of complex dielectric constant for InAs(001) by adsorption of oxygen atoms has been calculated, using numerical analysis method (non-linear least square fitting).

As a result a mathematical model built-up and the final result show a fairly good agreement with other genuine published works.