

## اندازه‌گیری هیدروژن در عمق نمونه سیلیکان متخلخل به روش آشکارسازی ذرات پس‌زده از برخورد کشسان

محمد ترکیهای اصفهانی<sup>۱\*</sup>، امیدرضا کاکویی<sup>۲</sup> و وحید فتح‌اللهی<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup>دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، اصفهان، ایران.

<sup>۲</sup>پژوهشکده فیزیک و شتابگرها، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران، ایران.

\*اصفهان، کاشان، دانشگاه کاشان، دانشکده فیزیک، کد پستی: ۸۳۳۱۷۵۳۱۵۳

پست الکترونیکی: [torkiha@kashanu.ac.ir](mailto:torkiha@kashanu.ac.ir)

### چکیده

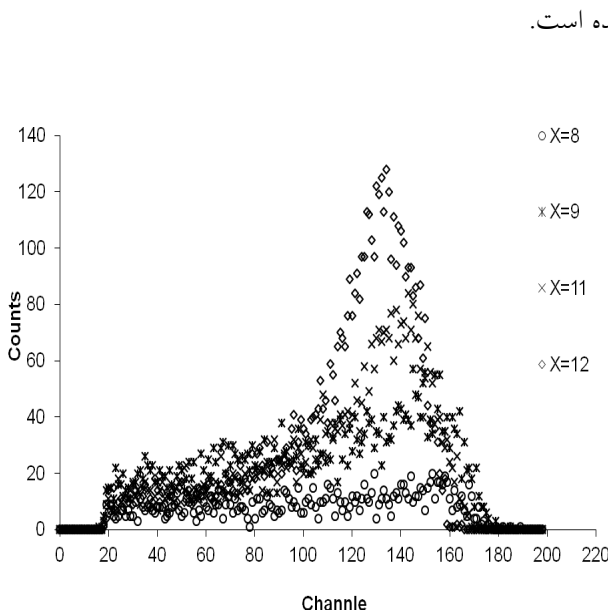
سیلیکان متخلخل (PS) از حل الکتروشیمیایی سیلیکان در محلول HF+DMF به دست می‌آید. در فرایند تشکیل حفره‌ها در سیلیکان، ترکیبات هیدروژن‌دار در سطح دیواره‌های حفره‌ها ایجاد می‌شوند. در این تحقیق با اندازه‌گیری میزان هیدروژن در عمق نمونه PS، توزیع تخلخل در عمق نمونه تخمین زده شده است. با توجه با ناکارآمدی نرم‌افزارهای شبیه‌سازی متداول آنالیز با باریکه یونی، برنامه مناسبی برای شبیه‌سازی به روش مونت-کارلو نوشته شد تا نزدیک‌ترین توزیع به نتیجه آزمایش به دست آید. غلظت هیدروژن در عمق نمونه متناسب با میزان تخلخل در نظر گرفته شده است. نتیجه به دست آمده نشان می‌دهد که بیشترین تخلخل برای نمونه ۹۰٪ بوده است که در عمق ۱۳۹-۶۹ nm ایجاد شده است.

کلیدواژگان: سیلیکان متخلخل، اندازه‌گیری هیدروژن، ERDA.

### ۱. مقدمه

همین دلیل مشخصه‌یابی فیزیکی سیلیکان متخلخل پس از ساخت از اهمیت بالایی برخوردار است. روش‌های تجربی متنوعی برای اندازه‌گیری هیدروژن در نمونه‌های سیلیکان متخلخل ارائه شده‌اند. در این کار پژوهشی روش «آشکارسازی ذرات پس‌زده از برخورد کشسان» برای اندازه‌گیری مستقیم هیدروژن موجود در نمونه و نمایه عمقی آن در نمونه انتخاب شده است [۱]. این روش همانند سایر روش‌های آنالیز با باریکه یونی روشی سریع و غیر مخرب است که نیاز به آماده‌سازی خاصی برای نمونه ندارد و می‌تواند تا عمق ده‌ها میکرومتر از

در طول دو دهه گذشته سیلیکان متخلخل ( PS: porous silicon) به دلیل کاربردهای متنوع آن در حوزه‌های مختلفی نظیر حسگرهای شیمیایی و بیولوژیک، زیست‌پزشکی، اپتیک و فوتونیک بسیار مورد توجه بوده است. مساحت قابل توجه سطح داخلی سیلیکان متخلخل باعث می‌شود این ماده از نظر شیمیایی بسیار فعال باشد و نقش مهمی در خواص فیزیکی لایه‌های متخلخل ایفا کند. این مساحت بزرگ می‌تواند مقادیر چشمگیری از عناصر موجود در محیط اطراف را به خود جذب کند. به



شکل (۱): طیف هیدروژن‌های پس‌زده برای چهار موقعیت روی نمونه

همان‌طور که از نمودار پیداست، در موقعیت ۱۲ mm وجود مقادیر قابل توجه هیدروژن پس‌زده شده نشان‌دهنده موقعیت مناسب برای بررسی طیف است. در مکان‌های ۸ و ۹ میزان تخلخل کمتر بوده که میزان ذرات پس‌زده نیز کمتر است. البته برای ذرات پس‌زده در انرژی‌های کم که متناظر با عمق بیشتری از نمونه است، طیف‌ها تطابق بیشتری دارند. به این ترتیب می‌توان نتیجه گرفت که عمق متوسط حفره‌ها در موقعیت ۱۲mm کمتر بوده و هیدروژن قابل توجهی با انرژی بزرگ‌تر نسبت به حالت ۸ و ۹ پس‌زده شده است.

با توجه به اینکه میزان تخلخل در موقعیت‌های متفاوت تغییر می‌کند، برای به‌دست‌آوردن یک نتیجه میانگین، طیف‌های شکل (۱) را با هم جمع کرده و به‌عنوان یک طیف تحلیل می‌شود (شکل ۲). در این شکل، شبیه‌سازی توسط کد SIMNRA که به‌طور گسترده‌ای در آنالیز با باریکه یونی استفاده می‌شود، انجام شده است.

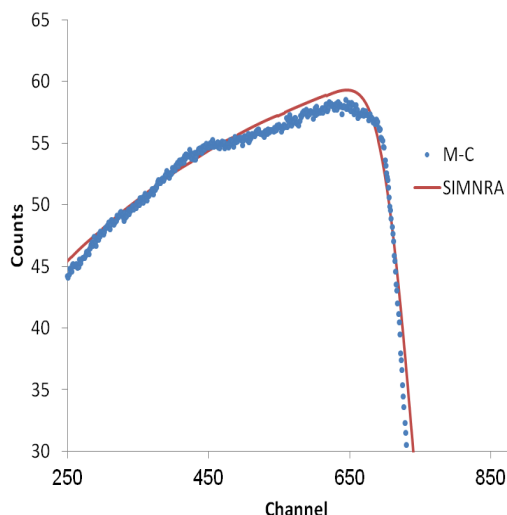
نمونه را کاوش نماید. این روش‌ها براساس برخورد باریکه‌ای از ذرات باردار با انرژی چند میلیون الکترون ولت به نمونه و ثبت ذرات و پرتوهای ایجادشده در سطح و عمق نمونه، توسط آشکارسازهای مختلف است [۲]. در هر نوع از آنالیزها برای ثبت طیف باید به اندازه‌ای آزمایش را ادامه داد تا به‌طور مشخصی افت‌وخیزهای آماری از قله‌های طیف تمیز داده شوند و به همین دلیل زمان لازم برای هر روش متفاوت است.

## ۲. آزمایش

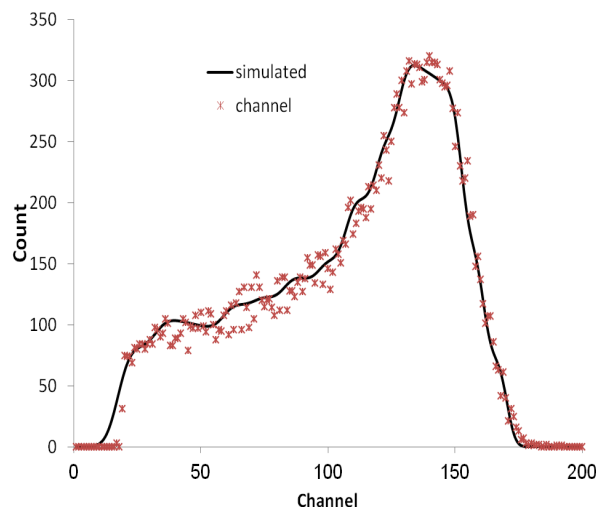
نمونه سلیکان متخلخل مورد استفاده در این پژوهش، توسط فرایند خورش الکتروشیمیایی با محلول DMF+HF تهیه شده است. برای اینکه سطح نمونه آماده عاری از هرگونه آلودگی محیطی گردد، نمونه با محلول فرایند خورش شسته و سپس در محفظه برهمکنش تحت خلأ قرار داده شد. نمونه تحت هندسه آزمایش طیف‌سنجی ذرات پس‌زده از برخورد کشسان قرار گرفت و با استفاده از باریکه هلیوم با انرژی  $180 \text{ keV}$  و جریان  $10 \text{ nA}$  و ابعاد  $1 \text{ mm}^2$  حاصل از شتاب‌دهنده واندوگراف  $3 \text{ MeV}$  پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای آنالیز شد. محصولات برهم‌کنش توسط آشکارساز سد سطحی اندازه‌گیری شده است. در این آزمایش، ولتاژ تغذیه آشکارساز  $20 \text{ V}$  انتخاب شد. با توجه به زاویه فرودی خراشان برخورد باریکه به هدف، اندازه‌گیری‌ها برای موقعیت‌های  $6 \text{ mm}$  الی  $12 \text{ mm}$  گونیومتر در محور افقی صفحه عمود بر باریکه فرودی تکرار شد. با سیستم الکترونیکی شامل تقویت‌کننده‌ها شمارنده‌های چند کاناله و رایانه نتایج آشکارسازها به‌صورت طیف ذخیره شد.

## ۳. بحث و نتیجه‌گیری

با توجه به مقطع قابل توجه باریکه فرودی در زاویه خراشان و ناهمگن بودن میزان تخلخل نمونه در نواحی مختلف، طیف ذرات پس‌زده برای موقعیت‌های  $8 \text{ mm}$ ،  $9 \text{ mm}$ ،  $11 \text{ mm}$  و  $12 \text{ mm}$  گونیومتر جمع‌آوری و در نمودارهای شکل (۱) رسم

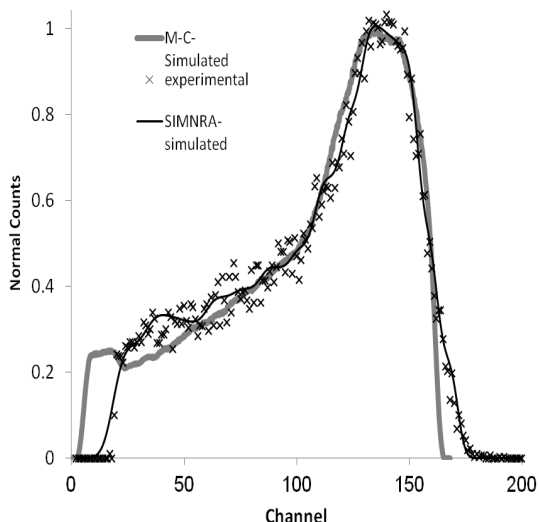


شکل (۳): مقایسه شبیه سازی مونت کارلو با کد SIMNRA



شکل (۴): طیف مجموع و شبیه‌سازی با کد SIMNRA

برای نمونه PS نتایج در مقایسه با نتایج SIMNRA در شکل (۴) آورده شده است.



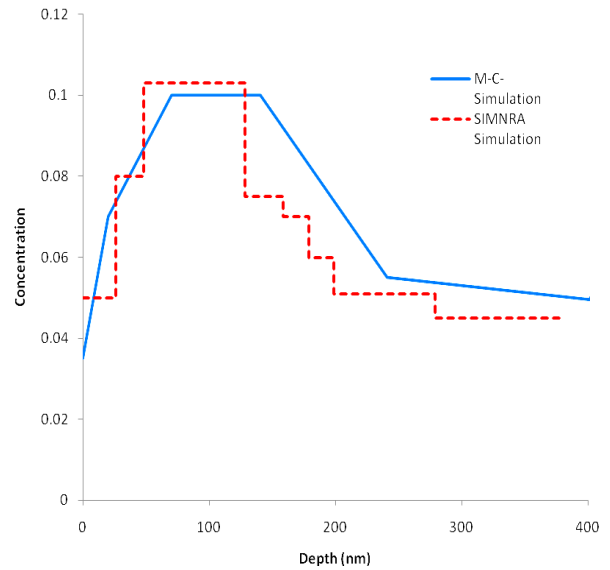
شکل (۵): طیف مجموع به همراه شبیه‌سازی مونت کارلو و SIMNRA

برای انجام این شبیه‌سازی، تعداد ۵۰۰۰۰۰ ذره در نظر گرفته شده است. برای رسیدن به نمودار شکل زیر توابع غلظت متفاوتی انتخاب شده تا طیف شبیه‌سازی با داده‌های آزمایش توافقی بیشتری داشته باشد.

متناسب با تابع غلظت به کاررفته نمودار میزان هیدروژن در عمق در مقایسه با داده‌های نرم‌افزار مورد استفاده در شکل (۵) مقایسه شده است.

از طیف به دست آمده، نمودار غلظت هیدروژن در عمق نمونه استخراج می‌شود. با توجه به اینکه نمونه مورد نظر متخلخل است و در کد مورد استفاده امکان در نظر گرفتن تخلخل وجود ندارد، شبیه‌سازی انجام شده قابل اعتماد نیست [۳ و ۴]. در این کار، برنامه مناسب برای شبیه‌سازی مونت-کارلو پس‌زدگی کسسان ذرات به زبان فرترن نوشته شده و امکان ایجاد تخلخل با وارد کردن تابعی برای غلظت سیلیسیوم در عمق نمونه ایجاد شده است. در این برنامه، سطوح مقطع فرایندهای مورد نظر از منابع استخراج شده است. در برنامه نوشته شده در ابتدا نوع، انرژی و هندسه ذره فرودی و همچنین هندسه و قدرت تفکیک آشکارساز را وارد برنامه می‌کنیم و سپس مکان برهم‌کنش را به صورت تصادفی انتخاب کرده، ذره در مسیر رسیدن به آشکارساز با توجه به سطوح مقطع ایستاندگی و پراکندگی مقداری از انرژی خود را از دست می‌دهد و در نهایت با توجه به انرژی ذره رسیده به آشکارساز و قدرت تفکیک آشکارساز در یک کانال انرژی ثبت می‌گردد. با تکرار برای تعداد زیادی ذره طیف ذرات به دست می‌آید. برای اعتبارسنجی برنامه، نتایج شبیه‌سازی یک نمونه غیرمتخلخل با نتایج SIMNRA برای ۵۰۰۰۰ ذره فرودی مقایسه شد که انحراف دو نمودار از هم کمتر از ۴ درصد تعیین شده است (شکل ۳).

همان‌طور که گفته شد، نباید انتظار داشت که توافق خوبی در شکل دیده شود. شبیه‌سازی مونت کارلو ضخامت بیشتری را برای نمونه در نظر می‌گیرد، زیرا که در شبیه‌سازی SIMNRA تمامی نمونه به‌صورت غیر متخلخل در نظر گرفته شده که به میزان تخلخل باید به ضخامت نمونه افزود تا نتایج واقعی به‌دست آید. برای مثال در شبیه‌سازی SIMNRA عمق لایه دارای بیشترین تخلخل در محدوده ۱۲۸-۴۸ nm به‌دست می‌آید. با اضافه کردن ۱۰ درصد نجلجل، عمق لایه متخلخل ۱۴۰-۵۳ nm به‌دست می‌آید که با نتایج شبیه‌سازی مونت کارلو یعنی ۱۳۹-۵۹ nm توافق خوبی دارد. به این معنی که هرچه به عمق بیشتر می‌رویم، اثرات تخلخل بیشتر نمایان می‌شود.



شکل (۵): مقایسه توزیع هیدروژن در عمق سیلیکان متخلخل به‌دست آمده از شبیه‌سازی به روش مونت-کارلو و کد SIMNRA

#### ۴. مراجع

- [1] F. Pászti, E. Kótai, G. Mezey, A. Manuaba, L. Pócs, Hydrogen and deuterium measurements by elastic recoil detection using alpha , Nucl. Insr. and Meth. in Phys. Res.B, Vol.15(1986) 486-491.
- [2] R. Curtis Bird and J. S. Williams, Ion Beams for Materials Analysis, (1989).
- [3] M. Torkiha, M. Lamehi-Rachti, D. Agha-Aligol, F. Razi Microbeam analysis of lateral inhomogeneity in depth penetration of Pd in porous silicon, Nucl. Insr. and Meth. in Phys. Res. B, 266(2008)1507-1510.
- [4] E. Kótai, F. Pászti, E. Szilágyi, Investigation of beam effect on porous silicon, Nucl. Insr and Meth. in Phys. Res. B, Vol.161 (2000)260-263.