

NGHIÊN CỨU MÔ PHỎNG SỰ ẢNH HƯỞNG CỦA KÍCH THƯỚC HẠT NANO TINH THỂ LÊN DÒNG ĐIỆN CẢM ỨNG CHÙM ĐIỆN TỬ THU NHẬN BỞI NANOCONTACT

SIMULATION STUDY OF THE EFFECT OF NANOCRYSTAL SIZE ON ELECTRON BEAM INDUCED CURRENT COLLECTED BY NANO-CONTACT

Đoàn Quảng Trị^{1*}, Vũ Ngọc Phan¹, Dương Xuân Núi¹, Dương Chính Cường², Nguyễn Văn Đạt³

¹*Viện Tiên tiến khoa học và công nghệ AIST - Trường Đại học Bách khoa Hà Nội,*

²*Trường Đại học Công nghệ thông tin và truyền thông Thái Nguyên;*

³*Khoa Cơ Điện - Học viện Nông nghiệp Việt Nam*

Đến Tòa soạn ngày 02/6/2017, chấp nhận đăng ngày 26/6/2017

Tóm tắt: Phương pháp mô phỏng Monte-Carlo được sử dụng để nghiên cứu sự ảnh hưởng của kích thước hạt nano tinh thể được tạo ra một cách ngẫu nhiên trên bề mặt vật liệu và được xem như là các trung tâm tái tổ hợp. Dòng điện cảm ứng chùm điện tử thu nhận bởi nano contact. Kết quả mô phỏng cho thấy, dòng điện cảm ứng chùm điện tử giảm khi kích thước hạt nano tinh thể tăng, quan hệ của chúng theo một hàm mũ bậc một. Độ dài khuếch tán hiệu dụng của hạt tối thiểu cũng được rút ra từ đường cong dòng điện cảm ứng chùm điện tử. Ảnh hưởng của kích thước hạt nano tinh thể nên độ dài khuếch tán cũng được xem xét, kết quả chỉ ra rằng độ dài khuếch tán giảm khi kích thước hạt nano tăng. Điều này được giải thích do sự tăng vùng tái tổ hợp bề mặt.

Từ khóa: Nano tinh thể, nano-EBIC, độ dài khuếch tán, mô phỏng Monte-Carlo.

Abstract: Using the Monte-Carlo simulation to study the effect of size nanocrystals (NCs) deposited randomly at the sample surface and considered as the center recombination. The electron beam induced current is collected by a nano-contact. Results are show that the electron beam induced current decrease when size of NCs augments as an exponential function. From the profiles of the electron beam induced current, the minority carrier diffusion length is extracted. The effect of NCs size on the minority carrier diffusion length is studied and the results show that the minority carrer diffusion length decrease with increasing of NCs size. This is explained because of the increasing the zone of recombination at the sample surface.

Keywords: Nanocrystals, nano-EBIC, length diffusion, Monte-Carlo simulation.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Từ khi được chế tạo thành công, nano tinh thể đã nhận được rất nhiều sự quan tâm của các nhà khoa học cũng như trong công nghiệp, bởi các đặc tính đặc biệt của chúng. Bên cạnh những phương pháp chế tạo nano tinh thể, chúng ta cũng cần có những kỹ

thuật để có thể xác định được những đặc trưng của chúng.

Gần đây sự kết hợp giữa máy hiển vi lực hạt nhân (AFM - Atomic Force Microscopy) và kính hiển vi điện tử quét (SEM - Scanning Electron Microscopy) - được gọi là kỹ thuật nano-EBIC (Nano Electron Beam Induced

Current) - cho thấy khả năng xác định các đặc tính của nano tinh thể cũng như một số thông số vật lý [1]. Để hiểu sâu hơn kỹ thuật này một thuật toán mô phỏng đã được phát triển, một số các thông số cũng đã được nghiên cứu như hình dạng nano contact, kích thước của nano-contact [2],... và gần đây chúng tôi cũng đã nghiên cứu đến sự ảnh hưởng của mật độ nano tinh thể [3]. Tuy nhiên theo hiểu biết của chúng tôi vẫn chưa có nghiên cứu nào kể cả thực nghiệm và mô phỏng nghiên cứu về ảnh hưởng của kích thước hạt nano tinh thể với một mật độ cố định.

Chính vì vậy trong phần này chúng tôi thực hiện một nghiên cứu về sự ảnh hưởng của kích thước nano tinh thể nên dòng điện cảm ứng chùm điện tử bằng phương pháp mô phỏng Monte-Carlo. Ở đây, các nano tinh thể được phân bố một cách ngẫu nhiên trên bề mặt và được coi như các trung tâm tái tổ hợp.

2. PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG

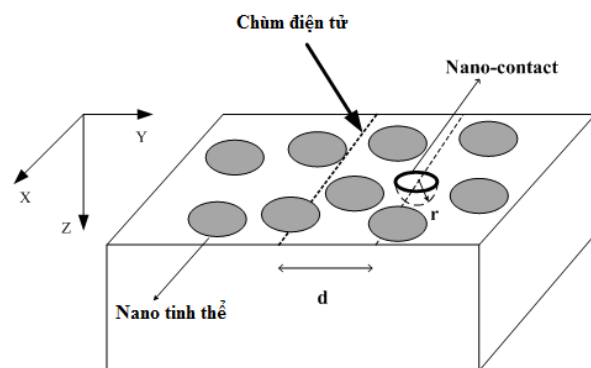
Để nghiên cứu sự ảnh hưởng của kích thước hạt nano tinh thể, trước tiên các hạt nano tinh thể (với mật độ $d_{\text{NCs}} = 100$ nano tinh thể/ μm^{-2}) được tạo ra một cách ngẫu nhiên trên bề mặt vật liệu đế (trong nghiên cứu này chúng tôi thực hiện trên vật liệu đế silic). Chúng được sắp xếp, bảo đảm sao cho giữa các hạt nano tinh thể không tiếp xúc với nhau, không chồng lên nhau và không tiếp xúc với nano-contact. Nano-contact có dạng hình bán cầu có bán kính r .

Sự tương tác giữa chùm điện tử và vật liệu được mô phỏng bằng phương pháp Monte-Carlo, đây là phương pháp được cho là khá hiệu quả trong việc mô phỏng hiện tượng này. Điều này được miêu tả khá chi tiết trong các nghiên cứu trước [2, 4, 5]. Ở đây, chúng tôi tập trung nghiên cứu sự ảnh hưởng của kích thước hạt nano tinh thể. Chùm điện tử (500 điện tử) với mức năng

lượng ban đầu E_0 , sẽ thâm nhập vào vật liệu để với một góc nghiêng 60° so với bề mặt vật liệu theo một đường thẳng song song, cách một khoảng d , với đường đi qua tâm của nano-contact. Hình 1 trình bày mô hình mẫu mô phỏng có chứa các hạt nano tinh thể trên bề mặt. Trong quá trình tính toán mô phỏng các nano tinh thể được xem như là các trung tâm tái tổ hợp. Khi các điện tử thâm nhập vào trong vật liệu chúng sẽ va chạm với các nút mạng của vật liệu và đổi hướng di chuyển. Sau các lần va chạm điện tử sẽ mất đi một phần năng lượng. Năng lượng mất đi giữa hai lần va chạm thành công được coi là để tạo ra các cặp điện tử - lỗ trống, số cặp điện tử - lỗ trống (N_{e-h}) được xác định qua công thức (1). Quá trình này được lặp lại cho đến khi mức năng lượng của điện tử ban đầu nhỏ hơn 50 eV hoặc chúng đi ra ngoài vật liệu.

$$N_{e-h} = \frac{\Delta E}{E_i} \quad (1)$$

Trong đó: ΔE - năng lượng mà điện tử tiêu hao giữa hai lần va chạm; E_i - năng lượng cấu tạo của cặp điện tử - lỗ trống của vật liệu để $E_i = 3 \times E_g$; E_g - năng lượng vùng cấm của vật liệu.



Hình 1. Sơ đồ minh họa bề mặt mẫu vật liệu chứa nano tinh thể của quá trình mô phỏng

Các điện tử được tạo ra sẽ di chuyển một cách tự do trong vật liệu cho đến khi chúng được thu nhận bởi nano-contact hoặc chúng bị tái tổ hợp khi chúng di chuyển đến vùng nano tinh thể hoặc chúng đi được tổng một

quãng đường lớn hơn độ dài khuếch tán (L) của vật liệu đế. Các điện tử thu nhận bởi nano-contact tại mỗi điểm sẽ tạo ra dòng điện cảm ứng chùm điện tử. Chúng tôi cũng đưa ra ở đây cách tính sự thu nhận hiệu dụng (η) bằng tỷ lệ tổng số điện tử thu nhận bởi nano-contact và tổng số điện tử được tạo ra tại mỗi điểm:

$$\eta = \frac{\sum \text{Điện tử thu nhận bởi nano-contact}}{\sum \text{Điện tử được tạo ra}} \quad (2)$$

Vấn đề chúng ta cần nghiên cứu ở đây xảy ra tại bề mặt vật liệu nơi chứa các nano tinh thể có mật độ giống nhau nhưng các kích thước của chúng lại khác nhau. Khi một điện tử được tạo ra di chuyển đến bề mặt của vật liệu đế, chúng có thể bị thu nhận bởi nano-contact khi sự di chuyển ngẫu nhiên của chúng tiến tới nano-contact hoặc chúng có thể bị tái tổ hợp khi chúng di chuyển đến vùng nano tinh thể. Đối với những điện tử được tạo ra khi di chuyển đến bề mặt vật liệu mà chúng không vào vùng một trong các hạt nano tinh thể, cũng không di chuyển đến vùng thu nhận bởi nano-contact, khi đó chúng có thể thu nhận bởi nano contact hay bởi một trong các nano tinh thể hoàn toàn dựa vào xác suất của chúng so với nano-contact và so với các nano tinh thể. Các xác suất này được tính toán trên cơ sở vận tốc tái tổ hợp bề mặt bằng không. Cụ thể, xác suất chúng được thu nhận bởi nano-contact [2]:

$$P_{R_{xy}} = \frac{2.acr \sin\left(\frac{r}{R_{xy} + r}\right)}{\pi} \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{R_{xy}}{L}}\right) \quad (3)$$

Trong đó: R_{xy} - khoảng cách giữa điện tử di chuyển đến bề mặt và nano-contact; L - độ dài khuếch tán vật liệu đế; r - bán kính nano-contact.

Tương tự như vậy, chúng tôi đưa ra cách tính xác suất điện tử tại bề mặt bị tái tổ hợp bởi một trong các hạt nano tinh thể như sau:

$$P_{NCi} = \frac{2.acr \sin\left(\frac{r_{NC}}{R_{NCi} + r_{NC}}\right)}{\pi} \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\frac{R_{NCi}}{L}}\right) \quad (4)$$

Trong đó: R_{NCi} - khoảng cách giữa điện tử di chuyển trên bề mặt vật liệu với nano tinh thể thứ i ; r_{NC} - bán kính hạt nano tinh thể.

Như vậy, xác suất của điện tử được tạo ra di chuyển đến bề mặt của vật liệu chứa các nano tinh thể thu nhận bởi nano-contact được xác định như sau:

Khi $R_{xy} \leq r$:

$$P_{n-c} = 1 \quad (5)$$

Khi $R_{xy} > r$:

$$P_{n-c} = P_{R_{xy}} \text{ nếu } P_{R_{xy}} = \max[P_{R_{xy}}, P_{NCi}] \quad (6)$$

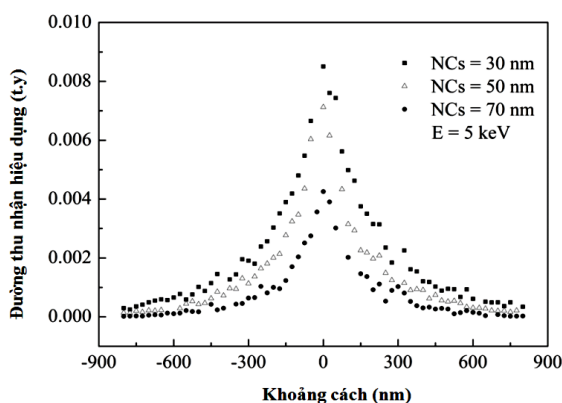
Quá trình mô phỏng được thực hiện tại từng điểm trên đường quét, tập hợp các điểm sẽ tạo thành đường thu nhận hiệu dụng.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

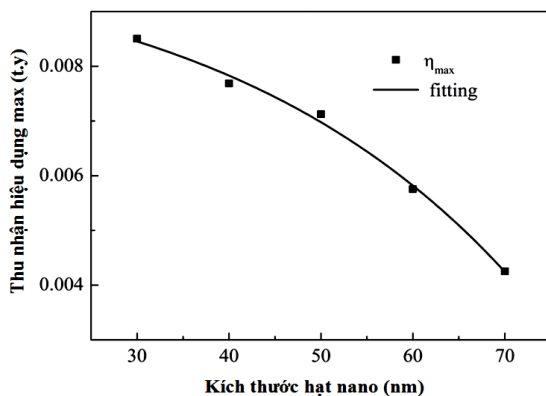
Để nghiên cứu sự ảnh hưởng của kích thước hạt nano tinh thể, chúng tôi đã thực hiện mô phỏng với các kích thước hạt nano tinh thể khác nhau: $NCs_1 = 30$ nm, $NCs_2 = 50$ nm và $NCs_3 = 70$ nm. Trong khi đó các thông số khác được giữ cố định trong quá trình thực hiện mô phỏng như bán kính nano-contact ($r = 10$ nm), độ dài khuếch tán vật liệu đế ($L = 1$ μ m), khoảng cách giữa đường quét của chùm điện tử và đường thẳng qua tâm nano contact ($d = 100$ nm), mật độ nano tinh thể ($d_{NCs} = 100$ NCs/ μ m²), góc nghiêng của chùm điện tử so với bề mặt vật liệu 60° , và vận tốc tái tổ hợp bề mặt bằng không.

Hình 2 là kết quả mô phỏng các đường thu nhận hiệu dụng của ba kích thước nano tinh thể NCs_1 , NCs_2 và NCs_3 với mức năng lượng chùm điện tử ban đầu là $E_0 = 5$ keV. Trước tiên chúng ta có thể quan sát thấy rằng các đường thu nhận hiệu dụng này hoàn toàn đối xứng qua tâm nano-contact. Kế tiếp chúng ta có thể thấy rằng đường thu nhận hiệu dụng giảm khi kích thước hạt nano tinh thể tăng.

Điều này hoàn toàn logic, bởi vì khi kích thước hạt nano tinh thể tăng kéo theo vùng mà các điện tử có thể bị tái tổ hợp bởi nano tinh thể tăng, vì vậy số điện tử tạo thành dòng điện cảm ứng sẽ giảm dẫn đến sự giảm của đường thu nhận hiệu dụng. Điều này càng được thấy rõ ràng hơn khi xem xét giá trị thu nhận hiệu dụng lớn nhất theo kích thước hạt nano tinh thể. Hình 3 cho thấy quan hệ giữa sự thu nhận hiệu dụng và kích thước hạt nano tinh thể là quan hệ hàm mũ bậc một ($\eta_{\max} \sim \exp(-d_{\text{NCs}}/t)$) như đường fitting thể hiện.



Hình 2. Đường thu nhận hiệu dụng theo khoảng cách của các kích thước hạt nano tinh thể: $\text{NCs}_1 = 30 \text{ nm}$, $\text{NCs}_2 = 50 \text{ nm}$, $\text{NCs}_3 = 70 \text{ nm}$ với mức năng lượng chùm điện tử $E_0 = 5 \text{ keV}$



Hình 3. Sự thay đổi thu nhận hiệu dụng theo kích thước hạt nano tinh thể và đường fitting

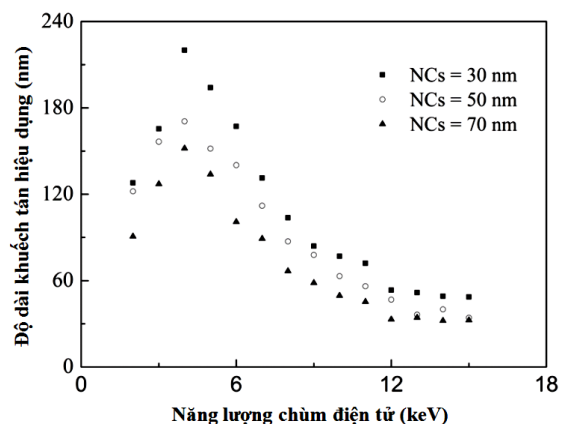
Chúng tôi cũng quan tâm ở đây, sự ảnh hưởng của kích thước hạt nano tinh thể nên độ dài khuếch tán hiệu dụng của hạt tối thiểu trên bề mặt của vật liệu, bên cạnh đó việc xem xét độ dài khuếch tán hạt mang điện tối

thiểu theo mức năng lượng ban đầu cũng nên được xem xét. Từ đường thu nhận hiệu dụng có thể xác định được độ dài khuếch tán hiệu dụng (L_{eff}) qua công thức sau:

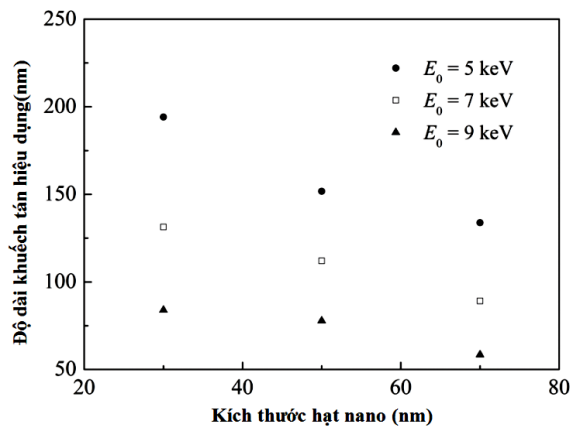
$$(\eta \sim \exp(-x/L_{\text{eff}}))$$

Hình 4 chỉ ra sự thay đổi độ dài khuếch tán hiệu dụng của hạt mang điện tối thiểu theo mức năng lượng ban đầu của chùm điện tử. Có thể nhận thấy độ dài khuếch tán hiệu dụng chia hai phần, ban đầu chúng tăng cùng với sự tăng của năng lượng chùm điện tử ban đầu đến một giá trị cực đại rồi chúng giảm khi mức năng lượng tiếp tục tăng. Sự thay đổi của độ dài khuếch tán hiệu dụng này tương tự với kết quả chúng tôi đã đạt được trong các nghiên cứu trước, điều này cũng đã được chúng tôi giải thích trong nghiên cứu trước [2, 3].

Ảnh hưởng của kích thước hạt nano tinh thể lên độ dài khuếch tán hiệu dụng của hạt mang điện tối thiểu được thể hiện trong hình 5. Có thể nhận thấy rằng, độ dài khuếch tán hiệu dụng này giảm tuyến tính so với sự tăng của kích thước hạt nano tinh thể. Điều này có thể giải thích rằng khi kích thước của hạt nano tinh thể tăng, đồng nghĩa với việc tăng vùng tái tổ hợp trên bề mặt vật liệu. Do đó, khả năng hạt mang điện di chuyển tới bề mặt của vật liệu bị tái tổ hợp bởi nano tinh thể tăng, hay nói cách khác sự di chuyển của chúng trên bề mặt sẽ giảm.



Hình 4. Sự thay đổi của độ dài khuếch tán hiệu dụng theo mức năng lượng chùm điện tử ban đầu với ba kích thước hạt nano tinh thể khác nhau; $\text{NCs}_1 = 30 \text{ nm}$, $\text{NCs}_2 = 50 \text{ nm}$, $\text{NCs}_3 = 70 \text{ nm}$



Hình 5. Quan hệ giữa độ dài khuếch tán hiệu dụng với kích thước hạt nano tinh thể với các mức năng lượng chùm điện tử $E_0 = 5 \text{ keV}$, $E_0 = 7 \text{ keV}$ và $E_0 = 9 \text{ keV}$

3. KẾT LUẬN

Chúng tôi đã thành công trong việc phát triển phương pháp Monte-Carlo nhằm nghiên cứu sự ảnh hưởng của kích thước hạt nano tinh thể lên dòng điện cảm ứng thu

nhận bởi nano contact trên bề mặt vật liệu với một mật độ cố định. Cụ thể là với kích thước càng tăng thì dòng điện cảm ứng càng giảm, sự giảm này theo hàm mũ bậc một. Độ dài khuếch tán của các hạt mang điện tối thiểu theo mức năng lượng ban đầu đều có dạng giống nhau; tăng khi mức năng lượng bắt đầu tăng đến một giá trị cố định rồi giảm dần khi mức năng lượng của chùm điện tử tiếp tục tăng. Chúng tôi cũng đã đưa ra sự ảnh hưởng của kích thước hạt nano lên độ dài khuếch tán hiệu dụng của hạt tối thiểu, cụ thể là độ dài khuếch tán giảm khi kích thước tăng điều này là do sự tăng vùng tái tổ hợp bề mặt do kích thước hạt nano tạo ra.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 103.02-2014.56.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] M. Troyon and K. Smaali, Appl. Phys. Lett. 90, (2007) 212110/1-3.
- [2] Q-T. Doan, A. El Hdiy and M. Troyon, J. Appl. Phys. 110, (2011) 024514/1-5.
- [3] Quang Tri Doan, Abdelillah El Hdiy, Xuan-Nui Duong, Chinh-Cuong Duong, Luong-Thien Nguyen, *Superlattices and Microstructures* xxx(2017), 1-6.
- [4] D.E. Newbury, D.C. Joy, P. Echlin, C.E. Fiori, J.I. Goldstein, *Advanced Scanning Electron Microscopy and X-ray Microanalysis*, edited by Kluwer/Plenum Press (Plenum Press, New York, 1986).
- [5] D.C. Joy, Scan. Electr. Microsc., 5, (1991) 329 - 337.

Thông tin liên hệ: **Đoàn Quảng Trị**

Điện thoại : 0917114878 - Email : dqt711@gmail.com

Viện Tiên tiến Khoa học và Công nghệ (AIST) - Trường Đại học Bách khoa Hà Nội.

