

Simulaciones de RBS

Damián Gulich*

Enrique Neyra**

Betiana Pianciola***

Martín Falabella****

Experimentos Cuánticos II (2008), Departamento de Física, Universidad Nacional de La Plata

Resumen

En este informe se detalla una serie de simulaciones de Rutherford Backscattering (RBS) sobre películas de diversos materiales. Esta técnica permite caracterizar una muestra en función de su espectro de RBS.¹

1. Introducción

La técnica de Rutherford Backscattering (RBS) se basa en colisiones entre núcleos y sus derivados y debe su nombre a Lord Ernest Rutherford [1], quien en 1911 fue el primero en presentar el concepto de átomos con núcleo. Involucra medir el número y energía de los iones en un haz que se dispersa después de interactuar con átomos de la región cercana a la superficie a la que el haz ha sido apuntado.

Con esta información es posible determinar datos tales como grosores de capas y elementos presentes en la muestra. Cuando una muestra es bombardeada con un haz de partículas de alta energía, la mayoría de las partículas se implantan en el material y no escapan. Esto es debido a que el diámetro de un núcleo atómico es del orden de 10^{-15} m mientras que el espaciado entre núcleos es del orden de $2 \cdot 10^{-10}$ m. Una pequeña fracción de las partículas incidentes experimentan una colisión directa con el

núcleo de uno de los átomos de los primeros micrómetros de la muestra. Esta colisión no involucra un contacto directo entre el proyectil y el blanco. Existe un intercambio de energía debido a las fuerzas coulombianas entre núcleos que se aproximan. Sin embargo, la interacción puede ser modelada satisfactoriamente como una colisión elástica usando física clásica.

La energía medida para una partícula dispersada a un cierto ángulo depende de dos procesos. Las partículas pierden energía a medida que van pasando por la muestra antes y después de una colisión. La cantidad de energía perdida depende del poder de frenado del material. Una partícula también perderá energía como resultado de la colisión en sí. La pérdida por colisión depende de la masa del proyectil y del blanco. Para los proyectiles, el cociente entre las energías antes y después de colisionar se conoce como *factor cinemático* [2]:

$$K = \frac{E_1}{E_0} = \left[\frac{\sqrt{m_2^2 - m_1^2 \sin^2(\theta)} + m_1 \cos(\theta)}{m_1 + m_2} \right]^2 \quad (1)$$

donde E_0 y E_1 son las energías del proyectil antes y después de la colisión; m_1 es la masa del proyectil y m_2 la masa del blanco, y θ es el suplementario del ángulo entre la trayectoria de salida y la trayectoria que el proyectil hubiera tenido si no hubiera interactuado (figura 1).

Otro factor a tener en cuenta es la sección eficaz de dispersión. La sección eficaz diferencial media, que en RBS viene dada por

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{\Omega} \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (2)$$

*d_gulich@yahoo.com

**quique_neyra@hotmail.com

***betianapianciola@gmail.com

****martinfalabella@yahoo.com.ar

¹ Nota: Los cortes de palabras son generados automáticamente por el paquete Babel de L^AT_EX.

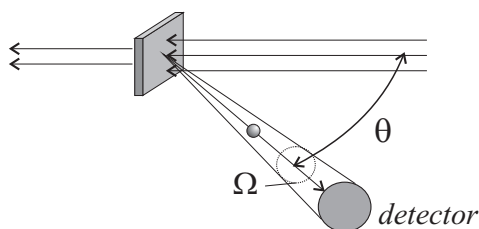


Fig. 1: Esquema del choque en la configuración IBM.

También hay que considerar una pérdida de energía de los proyectiles a medida que penetran en el blanco. La mayor parte de la pérdida de energía es causada por un frenado electrónico que se comporta (en primera aproximación) como una fricción entre los proyectiles y la nube de electrones del blanco. El frenado nuclear aporta grandes pérdidas de energía sólo a bajas energías de proyectiles. El cociente de la pérdida de energía en una densidad atómica bidimensional para un dado material es conocida como la *sección transversal de frenado* ($\varepsilon = dE/dx$), comúnmente medida en eV/cm. Puesto que la mayor parte de la pérdida de energía se debe a la estructura electrónica del blanco, su material tiene un efecto significativo sobre el poder de frenado.

Las predicciones teóricas del poder de frenado pueden ser complicadas y poco precisas. Por ello, se suelen usar valores empíricos de poderes de frenado en cálculos de RBS. Para poder calcular la pérdida de energía por unidad de profundidad de una muestra uno puede multiplicar la sección eficaz de frenado por la densidad del material de la muestra (átomos/cm²). Es necesario conocer la densidad de la muestra para poder calcular el grosor de una capa mediante RBS. La aproximación de Bohr para este caso es:

$$\varepsilon = \frac{dE}{dx} = \frac{2\pi Z_1^2 e^2}{E_c} N Z_2 \frac{m_1}{m} \ln \left(\frac{4E_c}{I} \right) \quad (3)$$

donde E_c es la energía cinética inicial de la partícula incidente, I es el valor promedio de la energía de excitación de los electrones [3, p. 26], m es la masa del electrón, m_1 es la masa del proyectil, Z_1 es el número atómico del proyectil, Z_2 es el número atómico del blanco, y N es la densidad atómica del medio. En el caso de un compuesto mezcla estilo $A_m B_n$,

$$\varepsilon_T = m\varepsilon_A + n\varepsilon_B \quad (4)$$

En una simulación de RBS se observan mesetas de ancho ΔE , que se relacionan con el espesor de la muestra (Δt) según

$$\Delta E = \Delta t \left[K \frac{dE}{dx} \Big|_{E_0} + \frac{1}{\cos(\theta)} \frac{dE}{dx} \Big|_{KE_0} \right] \quad (5)$$

2. Simulaciones

Se utilizó el programa RUMP para realizar las simulaciones de cada caso. La configuración geométrica en todas las oportunidades fue la IBM, con un ángulo $\theta = 10^\circ$ y $\phi = 0^\circ$ (ver figura 1). La composición de las muestras fue la siguiente:

2.1. Muestra 1

Nro. de capa	Composición	Espesor [Angstrom]
1	Al ₂ O ₃	500
2	NiFe	500
3	Al ₂ O ₃	500
4	C	5000

El haz es de $^4\text{He}^+$, $E_0 = 1,9$ MeV, $Q = 31\mu\text{C}$. Ver figura 2.

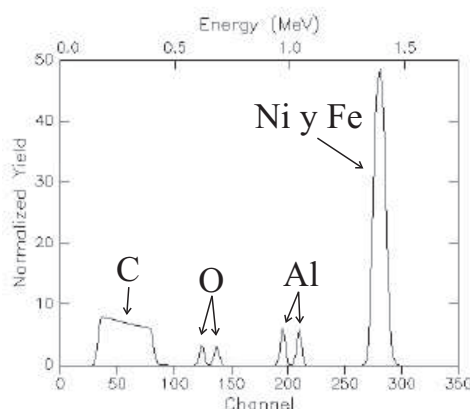


Fig. 2: Simulación RBS de la primera muestra.

2.2. Muestra 2

Nro. de capa	Composición	Espesor [Angstrom]
1	Ge	37
2	Be	260
3	Al ₂ O ₃	5000

El haz es de ${}^4\text{He}^+$, $E_0 = 2,525$ MeV, $Q = 10\mu\text{C}$. Ver figura 3.

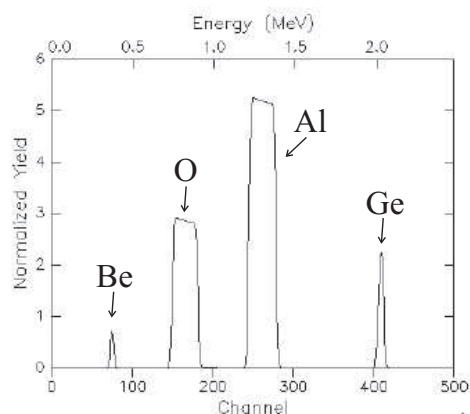


Fig. 3: Simulación RBS de la segunda muestra.

2.3. Muestra 3

Nro. de capa	Composición	Espesor [Angstrom]
1	FeMo	3600
2	Al ₂ O ₃	36000

1. El haz es de ${}^4\text{He}^+$, $E_0 = 1,9$ MeV, $Q = 25\mu\text{C}$. (Figura 4).
2. El haz es de ${}^4\text{He}^+$, $E_0 = 3,8$ MeV, $Q = 50\mu\text{C}$. (Figura 5)

2.4. Muestra 4

El haz es de ${}^4\text{He}^+$, $E_0 = 1,9$ MeV, $Q = 50\mu\text{C}$. La muestra es de $\text{O}_{64}\text{Na}_{11}\text{Si}_{22}\text{K}_2\text{Zn}_2\text{Cd}_{0,04}$, con un grosor de 5000 Angstrom. (Figura 6 en la página siguiente).

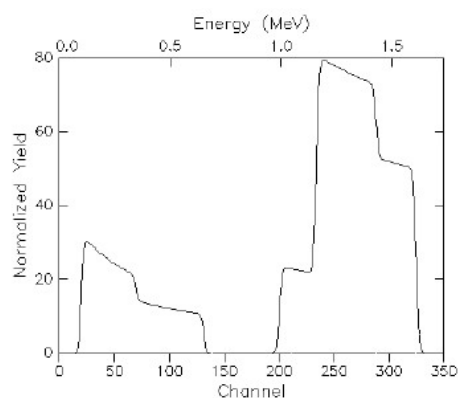


Fig. 4: Simulación RBS de la tercera muestra, primera variante.

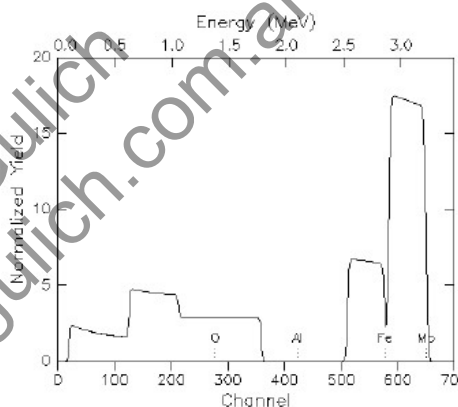


Fig. 5: Simulación RBS de la tercera muestra, segunda variante.

2.5. Muestra para ajustar

Se intenta estimar el grosor de capas para una muestra de Au, Co, Al y SiO₂.

1. Capa de Al sobre sustrato de SiO₂. (Figura 7 en la página siguiente)
2. Capa de Co sobre la variante anterior. (Figura 8 en la página siguiente).
3. Capa de Au sobre la primera variante. (Figura 9 en la página 6).

3. Resultados

3.1. Muestra 1

Para cada elemento se calculó el valor de K según (1) para el borde de los picos y sus anchos con (5).

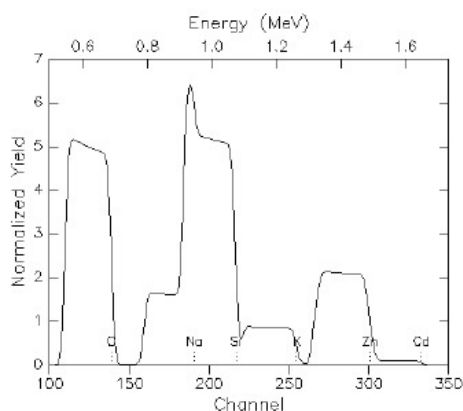


Fig. 6: Simulación RBS de la cuarta muestra.

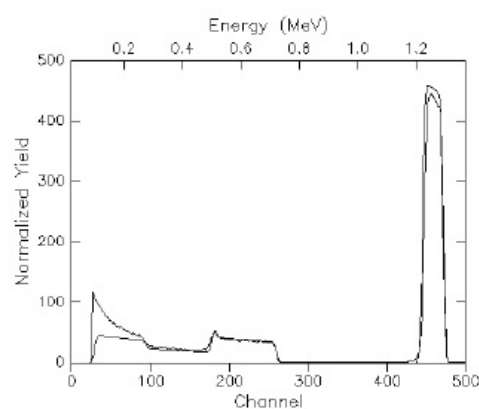


Fig. 8: Muestra para ajustar, segunda variante. La línea con ruido corresponde a los datos experimentales. La línea suave corresponde a la simulación.

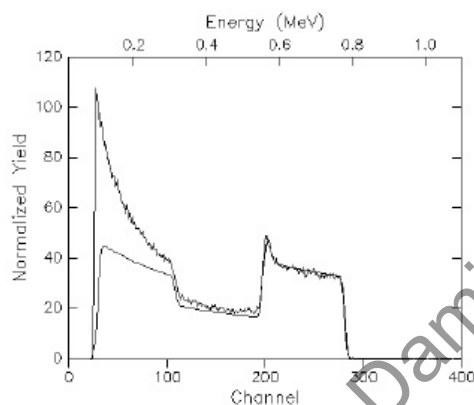


Fig. 7: Muestra para ajustar, primera variante. La línea con ruido corresponde a los datos experimentales. La línea suave corresponde a la simulación.

3.4. Muestra 4

El valor calculado con (1) para el borde de los picos en este caso se muestra en la tabla 4.

Elemento	K	$E_1 = KE_0$ [MeV]
O	0,3625	0,6887
Na	0,4974	0,9451
Si	0,5657	1,075
K	0,6651	1,264
Zn	0,7840	1,490
Cd	0,8681	1,649

Tab. 4: Resultados de la cuarta muestra.

Ver la tabla 1 en la página siguiente.

3.2. Muestra 2

Los valores calculados para el borde de los picos y sus anchos se muestran en la tabla 2 en la página siguiente.

3.3. Muestra 3

Los resultados para las dos variantes se resumen en la tabla 3 en la página siguiente.

3.5. Muestra para ajustar

Se realizaron diversos tanteos de simulación sobre los datos experimentales de las muestras de grosores desconocidos hasta lograr un ajuste aproximado. Los resultados se muestran en la tabla 5 en la página siguiente. Los gráficos de cada ajuste se ven en las figuras 7, 8 y 9.

4. Conclusiones

Los gráficos de RBS permiten inferir características por elemento de la muestra a analizar. Las alturas de cada pico son proporcionales a la abundancia

Elemento	K	$E_1 = KE_0$ [MeV]	ΔE [MeV]	(*1) K	(*2) $E_1 = KE_0$ [MeV]
Fe	0,7504	1,426	0,0575	0,753	1,43
Ni	0,761	1,446	0,0578	0,76	1,444
Al	0,5500	1,045	0,0447	0,56	1,045
O	0,3597	0,6835	0,0400	0,363	0,689
C	0,2501	0,4752	0,2603	0,253	0,48

Tab. 1: Resultados de la primera muestra. (*1) Son valores de [2]. (*2) Valores calculados con (*1).

Elemento	K	$E_1 = KE_0$ [MeV]	ΔE [MeV]	(*1) K	(*2) $E_1 = KE_0$ [MeV]
Ge	0,832	2,028	0,00215	0,802	2,0250
Be	0,1502	0,3792	0,00945	0,1495(**)	0,377
Al	0,5525	1,395	0,0393	0,5525(**)	1,395
O	0,3625	0,9152	0,0371	0,363	0,916

Tab. 2: Resultados de la segunda muestra. (*1) Son valores de [2]. (*2) Valores calculados con (*1). (**)
Extrapolado como semisuma de los vecinos.

Elemento	K (1º variante)	$E_1 = KE_0$ (1º variante) [MeV]	K (2º variante)	$E_1 = KE_0$ (2º variante) [MeV]
Fe	0,252	1,429	0,7520	2,858
Mo	0,8473	1,610	0,8473	3,220
Al	0,5525	1,050	0,5525	2,100
O	0,3625	0,6887	0,3625	1,377

Tab. 3: Resultados de la tercera muestra.

Compuesto	Espesor (1º variante) [Angstrom]	Espesor (2º variante) [Angstrom]	Espesor (3º variante) [Angstrom]
Al	4300	4300	4300
SiO ₂	43000	43000	4300
Au	-	500	-
Co	-	-	500

Tab. 5: Resultados del ajuste de la muestra.

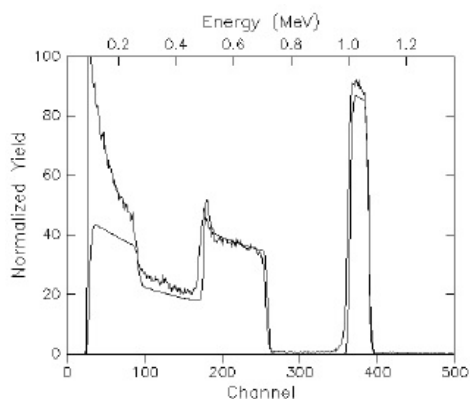


Fig. 9: Muestra para ajustar, tercera variante. La línea con ruido corresponde a los datos experimentales. La línea suave corresponde a la simulación.

del elemento. El ancho de cada pico está relacionado con la pérdida de energía, y directamente con el grosor de la capa de muestra con el elemento en cuestión. La posición del pico está relacionada con el elemento constituyente, y varía con su posición de capa respecto de la superficie de incidencia.

En la figura 2 se ven dos pares de picos iguales identificados como aluminio y oxígeno separados. Los corrimientos a la izquierda de los picos se deben a la presencia de cada elemento en una capa más profunda de la muestra.

En la simulación de la muestra 3, en la figura 4 puede verse un solapamiento de picos como el que se muestra cualitativamente en la figura 10. En la figura 5 vemos que un aumento en la energía incidente permite resolver los picos.

En el caso de ajuste de espectros experimentales, fue posible hallar una configuración geométrica compatible con los datos. Sin embargo, se observó una discrepancia por defecto en la región de bajas energías. Tal discrepancia podría ser atribuida a la curva de sensibilidad del aparato de detección.

Referencias

- [1] RBS Theory Tutorial. Evans Analytical Group. http://www.eaglabs.com/training/tutorials/rbs_theory_tutorial/
- [2] Feldman, Leonard C., Mayer, James W. Funda-

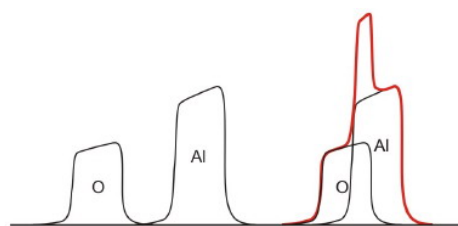


Fig. 10: Solapamiento de picos.

mentals of surface and thin film analysis. North Holland, EEUU, 1986.

- [3] W. R. Leo. Techniques for nuclear and particle physics experiments. Second revised edition. Springer-Verlag, Germany, 1994.
- [4] Particle interactions with matter: The Stopping and Range of Ions in Matter. James F. Ziegler. <http://www.srim.org/>