

00323

52



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

PRODUCCION DE DEFECTOS EN COBRE MONOCRISTALINO DEBIDOS A LA IRRADIACION CON IONES PESADOS A TEMPERATURA AMBIENTE.

TESIS CON FALTA DE ORIGEN

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
F I S I C O
P R E S E N T A:
JULIO ORTEGA SEGURA



DIRECTOR DE TESIS: DR. ALEJANDRO CRESPO SOSA



2004
FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR

A



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL
AVENIDA 14
ALZADOS

DRA. MARÍA DE LOURDES ESTEVA PERALTA
Jefa de la División de Estudios Profesionales de la
Facultad de Ciencias
Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo escrito:
 "Producción de Defectos en Cobre Monocristalino debidos a Irradiación con
 Iones Pesados a Temperatura Ambiente"

realizado por Ortega Segura Julio

con número de cuenta 08412210-8 , quien cubrió los créditos de la carrera de: Física.

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

A t e n t a m e n t e

Director de Tesis
 Propietario

Dr. Alejandro Crespo Sosa

Propietario

M. en C. Augusto Cabrera Manuel

Propietario

Dr. Juan Carlos Alonso Huitrón

Suplente

Dr. Juan Carlos Cheang Wong

Suplente

Fís. Marcelo Lugo Licona

Alfredo Lugo

Augusto Cabrera

Juan Carlos Alonso

Juan Carlos Cheang Wong

Consejo Departamental de Física

Patricia Golstein Menache

DRA. PATRICIA GOLSTEIN MENACHE
 Coordinadora de Licenciatura

3

Agradezco:

A DIOS, quien me dio: la vida para conservarla y aprender de ella, fortaleza en los momentos difíciles y de decisión, esperanza en lo que se puede mejorar pero sin delegar en los demás lo que me corresponde. Y por añadidura, que en cada instante está conmigo.

¡Gracias!

A mis padres por todo el apoyo que me han brindado a lo largo de mi vida, aprendiendo de su ejemplo que la honradez, tenacidad y trabajo son las herramientas básicas para alcanzar nuestros objetivos. Pero sobre todo, por su amor y paciencia.

A la Universidad Autónoma de México por darme la oportunidad de pertenecer a su comunidad para mi formación académica, la cual nos inculca la adquisición y realización del compromiso de servir a la población de México.

A mi hermano David, por su ejemplo y apoyo moral, como por su ayuda incondicional en la realización de este trabajo. A mi sobrina Berenice, quien ha sido la motivación y alegría de mi vida, y que me ha enseñado que se puede amar, aprender y conocer jugando.

A mi abuelita Agustina por su ejemplo de sinceridad y firmeza, y a mis abuelitos Natividad y Juvenico por su cariño y buen humor. A mi primo Juan Carlos quien siempre fue solidario y buen amigo. A mi gran amigo Jaime Méndez Carrillo.

A mi asesor y crítico, Dr. Alejandro Crespo Sosa, que gracias a su exigencia y paciencia ha hecho posible que este trabajo sea aceptable. A la Dra. Alicia Oliver Gutiérrez por su apoyo al proporcionarme una beca, así como su constante interés por el término y desarrollo de la tesis.

A mis sinodales: Juan Carlos Cheang Wong, Dr. Juan Carlos Alonso Huitrón, M.C. Augusto Cabrera Manuel y al Fis. Marcelo Lugo Licona.

Al técnico Melitón que me ayudó a preparar la muestra, y a los operadores del acelerador peleton Karim López Guzmán y Francisco Javier Jaimes Berinstain.

A mis amigos de la facultad: al Prof. Darío Moreno por inculcarme el gusto por la física, Manuel Muñoz Orozco, Ezequiel Guevara, David Albarrán, César Badiño y su esposa Arasemi, Mabel Castro Rojas, Francisco, Fabiola Muñoz.

Y en especial por su amistad, compañerismo y nobleza de mi amigo Hercules.

*** **INDICE** ***

INTRODUCCION	3
CAPITULO I	5
CONCEPTOS Y GENERALIDADES DE CRISTALOGRAFIA E INTERACCION DE LOS IONES CON SOLIDOS.	5
1.1 Conceptos Básicos.	5
1.2 Planos Reticulares.	6
1.3 Defectos Puntuales en un Cristal.	8
1.4 Pérdida de Energía y Sección de Frenado.	10
1.5 Sección Eficaz de Dispersión.	12
1.6 Alcance.	14
1.7 Cascadas, Daño y Función de Daño.	16
CAPITULO II	22
CONCEPTOS DE RETRODISPERSION Y SU USO COMO TÉCNICA DE ANÁLISIS (RBS).	22
2.1 Formación de un Espectro de Retrodispersión.	22
2.2 Factor Cinemático.	24
2.3 Escala de Profundidad para una Muestra Elemental.	26
2.4 Factor $[S]$ de Pérdida de Energía y el Factor $[L]$ de Sección de Frenado.	28
2.4.1 Método de Aproximación de $[S]$ y $[L]$ por la Energía Media.	30
2.5 Altura de un Espectro de Energía para una Muestra Elemental.	31
CAPITULO III	33
CANALIZACIÓN.	33
3.1 Introducción al Efecto de Canalización.	33
3.2 Alineación de un Cristal.	35
3.3 Semángulo Axial $\left(\psi_{\frac{1}{2}}\right)$ y el Mínimo del Número de Retrodispersión (χ_{\min}) .	38
3.4 Descanalización.	45
3.5 Concentración de Desorden en un Cristal.	49
CAPITULO IV	52
DISPOSITIVO EXPERIMENTAL.	52
4.1 Preparación de la Muestra.	52
4.2 Acelerador Peleton.	54
CAPITULO V	59
RESULTADOS Y ANÁLISIS.	59
5.1 Alineación del Monocristal de Cobre.	59
5.2 Determinación de los Valores de $\psi_{\frac{1}{2}}$ y χ_{\min} .	62

5.3 Resultados de la Irradiación con Iones de Cu.	65
5.4 Resultados de la Irradiación con Iones de Au.	70
5.5 Discusión y conclusiones.	74

REFERENCIAS.	77
---------------------	-----------

INTRODUCCION

Desde las más antiguas culturas hasta la actualidad el hombre ha manifestado numerosas interrogantes y un creciente interés sobre la composición y diversidad de todo aquello que lo rodea, siendo el átomo (piedra angular de la física contemporánea) el fundamento esencial sobre el cual descansa el comportamiento de la materia a cierta escala. A finales del siglo XIX, se realizan diversos experimentos mediante los cuales se tratan de determinar los componentes del átomo, medida, distribución de masa y carga eléctrica; así como su interacción con las diferentes formas de energía. En 1911, Rutherford depura el modelo del átomo al determinar su distribución de carga y masa por medio de su famoso experimento de la retrodispersión de partículas alfa (provenientes de una fuente radioactiva) por una lámina delgada de oro. El principio físico sobre el cual se basa este experimento es el mismo que sustenta la técnica de análisis Espectrometría por Retrodispersión de Rutherford (RBS), técnica útil para el conocimiento de la composición, concentración y localización de átomos en una muestra por medio del análisis de espectros de retrodispersión. Frecuentemente es utilizada para el estudio de materiales conductores, semiconductores, películas delgadas en monocapas y multicapas; así como composición y tipos de estructura atómica en cristales, policristales y materiales con diferente grado de amorfización.

El desarrollo de la Física (Física de Materiales) durante las últimas décadas del siglo XX, ha hecho posible la modificación de la estructura y propiedades de diversos materiales (en particular de superficies y películas delgadas), así como la elaboración de nuevos materiales por el método de irradiación con iones, obteniéndose por este método materiales metálicos con mayor resistencia, dureza, conductancia, resistencia eléctrica, con menor índice de corrosión y oxidación, etcétera; lo que ha permitido un notable desarrollo científico y tecnológico de las civilizaciones contemporáneas. Dentro de las ventajas que ofrece este método, las principales consisten en: el control de parámetros y procesos fuera del equilibrio termodinámico que afectan la optimización de las propiedades (o estructura) inducidas en el material y el control del número de impurezas no deseadas en la muestra (limpieza).

El objetivo de este trabajo de tesis es cuantificar el daño inducido en un monocristal de cobre debido a la incidencia de iones de Au y Cu, por medio de la técnica de análisis RBS en geometría de canalización, para lo cual, primero se alinea el eje (110) del monocristal de cobre con la dirección de incidencia del haz analizador (haz de partículas alfa) mediante el método de canalización. Posteriormente, por medio del análisis de los espectros alineados virgen y con daño, y el espectro correspondiente al monocristal desalineado con el haz (random), se conforman los respectivos perfiles de concentración de daño en el

monocristal que ha sido irradiado a diferentes afluencias de iones de Au y Cu. Observándose en la serie de perfiles obtenidos el desarrollo de la concentración de daño en diferentes regiones del monocristal.

La introducción de daño en el monocristal de Cu (o algún otro elemento metálico) por la irradiación de iones de Au y Cu es un caso de interés, pues la naturaleza aleatoria de la irradiación con iones sugiere que los átomos del monocristal sean desplazados y ocupen lugares aleatorios. No obstante, el enlace metálico y el fenómeno de recristalización reestablecen hasta cierto grado el orden de la estructura (en este caso fcc) del monocristal, de tal forma que en general los metales no presentan fases amorfas estables a temperatura ambiente, como si lo hacen los semiconductores (como el Si) [1], y por ello una "fase desordenada" correspondería a una fase policristalina con cada grano orientado al azar [2]. En otras palabras, hay dos factores involucrados que compiten: la naturaleza azarosa y destructiva de la irradiación y la naturaleza ordenada de la muestra monocristalina.

Por lo anterior, es inevitable cuestionarse ¿Qué le sucederá al monocristal después de ser irradiado con iones de Au y Cu? ¿Qué tipo de daño y cuánto, se induce en la muestra irradiada? Tanto las respuestas como un desarrollo más explícito del tema se encuentran dentro de los cinco capítulos que conforman este trabajo de tesis, cuyo contenido se describe a continuación:

CAPITULO I. Fundamentos de cristalografía y consecuencias en un blanco por la irradiación de iones.

CAPITULO II. Obtención de los parámetros (por la técnica de análisis RBS): Profundidad de los elementos de una muestra, pérdida de energía del haz analizador a lo largo de su trayecto en el interior de la muestra y factor cinemático.

CAPITULO III. Descripción de los métodos: Alineación de un cristal con la dirección de incidencia del haz analizador (utilizando el efecto de canalización) y método iterativo para la conformación de los perfiles de concentración de daño por la irradiación de iones a una afluencia determinada.

CAPITULO IV. Descripción del dispositivo experimental utilizado para la preparación y análisis del monocristal de Cu.

CAPITULO V. Resultados obtenidos durante la fase experimental y su respectivo análisis.

CAPITULO I

CONCEPTOS Y GENERALIDADES DE CRISTALOGRAFIA E INTERACCION DE LOS IONES CON SOLIDOS.

Puesto que el presente trabajo se desarrolla sobre una muestra de estructura cristalina (monocristal de cobre) será necesario considerar algunos elementos de cristalografía, así como conceptos de interacción de radiación con la materia.

1.1 Conceptos Básicos.

Un cristal posee, como característica fundamental, la disposición ordenada de los átomos, iones o moléculas que lo componen; por lo que la utilización de un conjunto de ejes cristalográficos permite establecer la ubicación de los componentes del cristal, los ejes cristalográficos de un cristal se definen como un conjunto de tres ejes con un ángulo arbitrario entre cada par de ellos, ver fig. 1.1 [3,4].

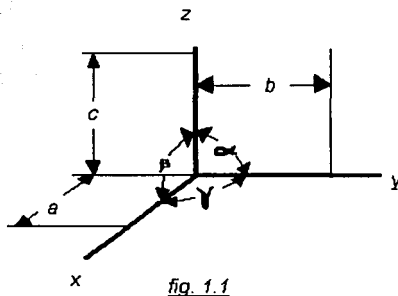


Fig. 1.1 Ejes cristalográficos.

Si estos ejes cristalográficos coinciden con los bordes de las caras del cristal (por lo regular se considera este caso aunque bien puede guardar alguna relación de otro tipo), entonces la proyección de la posición de cada uno de los elementos del cristal sobre los ejes establecerá una periodicidad particular sobre cada eje cristalográfico. Esta división del espacio, produce un conjunto de celdas idénticas (en tamaño, forma y orientación) con la propiedad de que a cada punto de la red lo debe rodear exactamente el mismo entorno que a cualquier otro punto que represente a otro átomo de la misma especie. A los

paralelepípedos de la red espacial se les da el nombre de celdas unitarias a partir de las cuales es posible construir la geometría del cristal mediante su desplazamiento a lo largo de cualquier eje. Las intersecciones de los lados de la celda unitaria (con un vértice en el origen) con los ejes "x", "y" y "z" se denotan con "a", "b" y "c" respectivamente; el ángulo entre los ejes "y" y "z" se denota por α , el ángulo entre los ejes "x" y "z" con β y el ángulo entre "x" y "y" con γ .

Por esta razón, se puede decir que la geometría del cristal es el resultado del acomodamiento periódico de los elementos que lo componen con respecto a los ejes cristalográficos o bien por el desplazamiento de la celda unitaria a lo largo de cualquier eje; de esta forma, los ejes cristalográficos dan origen (en forma imaginaria) a una red espacial o "esqueleto" sobre el que se construyen los cristales.

Para un sistema cúbico, pues el monocristal de cobre tiene una disposición cúbica con $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ y $a=b=c$, sus correspondientes celdas unitarias pueden tener diferentes disposiciones de los componentes del cristal (redes espaciales de Bravais) [4, 3], siendo las más usuales:

- En cada vértice del cubo hay una componente del cristal. Fig. 1.2-a.
- En cada vértice como en el centro de cada cara del cubo hay un componente del cristal. Fig. 1.2-b.
- En cada vértice como en el centro del cubo hay un componente del cristal. Fig. 1.2-c.



Cúbico Simple



Cúbico centrado en la cara



Cúbico centrado en el cuerpo

fig. 1.2 Celdas unitarias para el sistema cúbico.

1.2 Planos Reticulares.

Una vez que la red espacial establece el ordenamiento estructural de un cristal es posible considerar diferentes planos que contengan a los átomos, estos planos llamados reticulares basarán su trascendencia en el número de átomos que abarquen. Aquellos planos equidistantes y paralelos entre sí pueden ser

agrupados e identificados en un conjunto con ayuda de los índices de Miller [3], los cuales se obtienen de la siguiente forma:

- Se toma el recíproco de las intersecciones del plano reticular con los ejes cristalográficos. Si el plano reticular es paralelo a un eje, se considera que dicho plano lo intersecta en el infinito, y el recíproco del infinito es cero.
- Eliminando la forma fraccional de los recíprocos al multiplicarlos por el mínimo factor común entero que se obtiene de los valores de las intersecciones del plano reticular con los ejes cristalográficos.

En la siguiente figura se muestran los planos reticulares para la red cúbica:

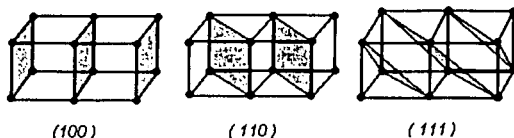


fig. 1.3

Fig.1.3 Planos en la red cúbica.

A partir de consideraciones geométricas, es posible deducir la distancia entre los elementos de cada conjunto de planos, por lo regular estas distancias se obtienen por medio del patrón de difracción de rayos X que inciden sobre una muestra cristalina. En la tabla 1.1 [3,4] se dan los factores de "a" para obtener la distancia entre los planos reticulares de las redes siguientes:

TABLA 1.1 Relaciones de los valores d_{hkl} para cada estructura cúbica.

Cúbica simple	$d_{100} : d_{110} : d_{111} = 1 : \frac{1}{\sqrt{2}} : \frac{1}{\sqrt{3}}$
Cúbica centrada en las caras	$d_{200} : d_{220} : d_{111} = \frac{1}{2} : \frac{1}{2\sqrt{2}} : \frac{1}{\sqrt{3}}$
Cúbica centrada en el cuerpo	$d_{200} : d_{110} : d_{222} = \frac{1}{2} : \frac{1}{\sqrt{2}} : \frac{1}{2\sqrt{3}}$

Un estudio más profundo de los espaciamentos entre los planos nos lleva a obtener la fórmula general para dichos espaciamentos en el sistema cúbico. Así, para los planos con índice de Miller (hkl) se tiene:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1.1)$$

1.3 Defectos Puntuales en un Cristal.

Las imperfecciones puntuales más comunes en los cristales son las impurezas químicas, sitios vacantes en la red y átomos adicionales en posiciones no regulares en la red. Algunas propiedades importantes de los cristales pueden ser controladas ya sea por la creación de imperfecciones como por la naturaleza de los átomos alojados en el cristal (el cristal asume el papel de vehículo o solvente de imperfecciones). Ejemplos de esto son la dependencia total de la conductividad de algunos semiconductores con el número de impurezas químicas alojadas. Así como el color y luminiscencia de muchos cristales que tienen su origen en el tipo de impurezas e imperfecciones en su estructura atómica.

Dentro de la variedad de imperfecciones, la imperfección más simple consiste en una vacancia en la red cristalina que corresponde a un ion o átomo perdido. Pues aún en el caso ideal, un cristal perfecto en equilibrio térmico siempre presentará vacantes en la red, ya que como sistema termodinámico el incremento de la entropía asociada al sistema está relacionada a la presencia de desorden en su estructura. Por lo regular en esquemas y ecuaciones químicas un vacío en la red se indica con un cuadro vacío, como se muestra en la fig. 1.4. En los metales con estructuras densas la proporción de sitios vacantes en la red a temperaturas por debajo de su punto de fusión es del orden de 10^{-3} a 10^{-4} . Pero en algunas aleaciones, en particular en metales carburados de difícil transición como el TiC, la proporción de sitios vacantes de un componente puede elevarse hasta un 50 % [4].

Las imperfecciones simples tienen un diverso origen. La creación de un defecto de Schottky en un cristal perfecto se lleva a cabo por la transferencia de un átomo en un sitio interno de la red a un sitio de la red sobre la superficie del cristal. La probabilidad de que un sitio dado en la red esté vacante porque el átomo que lo ocupaba ha pasado a la superficie es proporcional al factor de Boltzmann para un cristal en equilibrio térmico, esto es, $P \propto \exp(-E_v / K_B T)$, donde E_v es la energía requerida para trasladar un átomo de un sitio interno de la red a un sitio de la red sobre la superficie y T es la temperatura del cristal. Si hay N átomos, el número n de vacantes está dado por el factor de Boltzmann:

$$\frac{n}{N-n} = \exp\left(\frac{-E_v}{K_B T}\right) \quad (1.2)$$

de la cual si $n \ll N$, entonces:

$$\frac{n}{N} \cong \exp\left(\frac{-E_v}{K_B T}\right) \quad (1.3)$$

de esta ecuación se deduce que la concentración de vacantes en equilibrio decrece conforme la temperatura decrece, en tanto si el cristal es calentado la concentración de vacantes aumentará.

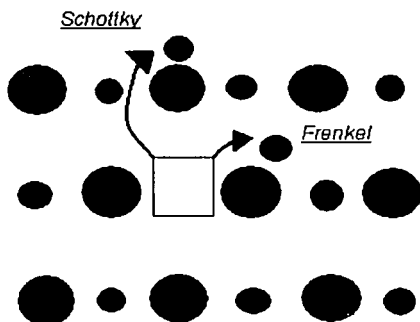


fig. 1.4

Fig.1.4 Defectos de Schottky y Frenkel en un cristal iónico. Las flechas nos indican el desplazamiento de los iones. En un defecto de Schottky el ión llega a la superficie del cristal; en un defecto Frenkel el ión es removido a una posición intersticial.

Otro tipo de imperfección simple es llamado defecto Frenkel, el cual se origina por la transferencia de un átomo de un sitio interno en la red a una posición intersticial (posición no regular en la red), ver fig.1.4. Si el número n de defectos de Frenkel es más pequeño que el número N de sitios en la red y que el número N' de sitios intersticiales, se tiene:

$$n \cong (NN')^{1/2} \exp\left(\frac{-E_f}{2K_B T}\right) \quad (1.4)$$

donde E_f es la energía necesaria para remover un átomo de un sitio interno en la red a una posición intersticial.

Por último, un proceso importante que tiene lugar en un cristal con intersticiales, es la migración de éstos en el cristal al ser bombardeado con un haz de proyectiles. Si P es la frecuencia a la cual salta un átomo de un sitio intersticial a una vacancia intersticial y ν es la frecuencia de vibración característica del cristal, ambas están relacionadas por:

$$P = \nu \exp\left(-\frac{E_a}{K_B T}\right) \quad (1.5)$$

E_a es la energía de activación para la migración de intersticiales, la cual tiene valores en el intervalo $[0.08eV, 0.30eV]$.

1.4 Pérdida de Energía y Sección de Frenado.

Cuando una partícula cargada incide y continúa su movimiento hacia el interior del blanco la partícula sufre un proceso de pérdida de energía a lo largo de su trayectoria, lo cual se debe a que experimenta encuentros independientes de tipo aleatorio con los átomos del blanco, ya sea porque el proyectil interactúa con las nubes electrónicas de los átomos (pérdida electrónica de energía) o bien porque interactúa con los núcleos de los átomos del blanco por medio de colisiones de ángulo pequeño de dispersión (pérdida nuclear de energía) [5], disminuyendo de esta forma su energía cinética a lo largo de su trayectoria. La cantidad de energía perdida ΔE a lo largo de una distancia de recorrido Δx depende tanto del tipo y velocidad de incidencia del proyectil utilizado, así como de la densidad y composición del blanco. En la fig. 1.5 se muestra el esquema de un experimento de transmisión que se utiliza para determinar la cantidad de energía perdida por la partícula al atravesar un blanco muy delgado (de composición conocida) de grosor Δx . Si medimos la diferencia de energía ΔE de las partículas antes y después de su transmisión en el blanco, la pérdida de energía por unidad de longitud (dE/dx) para un proyectil con una energía de incidencia E_0 , estará definida como:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta E}{\Delta x} = \left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0} \quad (1.6)$$

para un tipo de partícula incidente y medio específicos.

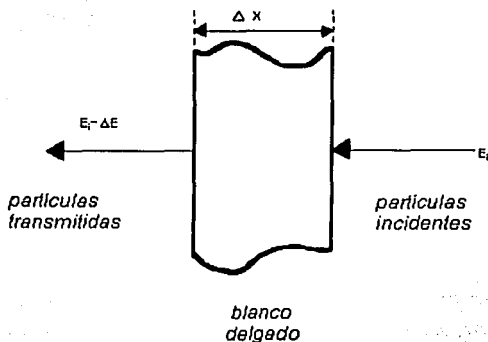


Fig. 1.5 Esquema de un experimento de transmisión para medir la pérdida $\frac{\Delta E}{\Delta x}$ de una partícula que se mueve en un medio denso.

Por lo anterior, el valor $\frac{dE}{dx}$ se considera como un promedio de todos los procesos posibles de pérdida de energía del proyectil a lo largo de su trayectoria entre los átomos que componen el blanco. El número promedio de tales eventos que contribuyen a la pérdida de energía será $NS\Delta x$, donde Δx es el grosor del blanco, S el área del blanco iluminada por el haz y N es la densidad atómica del blanco. Al considerar que la dirección de incidencia de las partículas coincide con la normal a la superficie del blanco, la proyección de $NS\Delta x$ átomos sobre el área S , produce una densidad atómica de área $\rho_s = \frac{NS\Delta x}{S} = N\Delta x$. Por lo que al integrar la ecuación (1.6), suponiendo que en el proceso de pérdida de energía $\left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0} = \text{Cte.}$, se obtiene:

$$\Delta E = \left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0} \Delta x = \left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0} \left(\frac{\rho_s}{N} \right) \quad (1.7)$$

note que $\Delta E \propto \rho_s$, donde factor de proporcionalidad que las relaciona es conocido como la sección de frenado:

$$\text{Sección de Frenado} \equiv \epsilon = \frac{1}{N} \left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0} = \frac{1}{N} \frac{dE}{dx} \quad (1.8)$$

posteriormente se dará por entendido que $\left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_e} = \frac{dE}{dx}$.

Al utilizar un proyectil ligero con una energía dentro del intervalo de interés para espectrometría de retrodispersión, se tiene que los dos procesos dominantes en la pérdida de energía son las interacciones del ion (partículas alfa) con la vecindad de los electrones correspondientes a los átomos del blanco y las interacciones del ion en movimiento con el potencial de apantallamiento de los núcleos atómicos. Lo que implica que la sección de frenado del proyectil estará dado por:

$$\epsilon = \epsilon_e + \epsilon_n \quad (1.9)$$

donde ϵ_e es la sección de frenamiento electrónico y ϵ_n es la sección de frenamiento nuclear, en la fig. 1.6 se muestra esquemáticamente cómo ambas contribuciones dependen de la energía del proyectil.

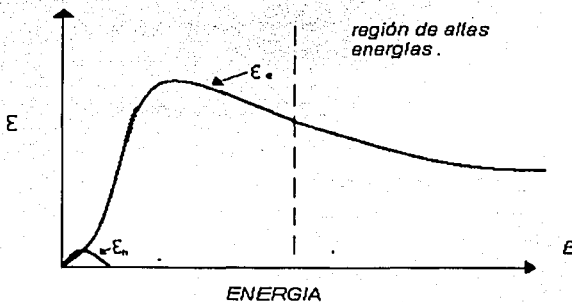


Fig 1.6 Dependencia típica de las contribuciones electrónica (ϵ_e) y nuclear (ϵ_n) de la sección de frenado como función de la energía E de la partícula incidente.

1.5 Sección Eficaz de Dispersión.

Considerando el dispositivo mostrado en la fig. 1.7, en el cual un detector es colocado a un ángulo θ de la dirección de incidencia, detectando cada partícula que sea dispersada dentro de un ángulo sólido diferencial $d\Omega$ [6]. Sea Q el número total de partículas que son dirigidas al blanco, dQ es el número de partículas captadas por el detector, N el número de átomos por unidad de volumen en el blanco, A el área

de incidencia del haz sobre el blanco, " t " el grosor del blanco y $d\sigma$ es el área dispuesta por cada átomo del blanco para el proceso de dispersión; estas cantidades se relacionan de la siguiente forma:

$$\frac{dQ}{Q} = \frac{tANd\sigma}{A} \quad (1.10)$$

por lo que:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{Nt} \frac{dQ/d\Omega}{Q} \quad (1.11)$$

donde la ecuación (1.11) nos da la relación de sección eficaz diferencial de dispersión, las cuales se expresan por lo regular en barns ($1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ m}^2$). La sección eficaz diferencial de dispersión ($d\sigma/d\Omega$) tiene un significado común que es el de la probabilidad que ocurra el evento de dispersión que provoque una señal en el detector. Por tener dimensiones de área, otra interpretación alterna consiste en pensar que cada núcleo de un átomo presenta un área $d\sigma/d\Omega$ de dispersión para el haz incidente de partículas, considerando que esta área es pequeña y que los átomos en el blanco están distribuidos en forma aleatoria se afirma que las secciones eficaces diferenciales $d\sigma/d\Omega$ de los núcleos no se traslapan.

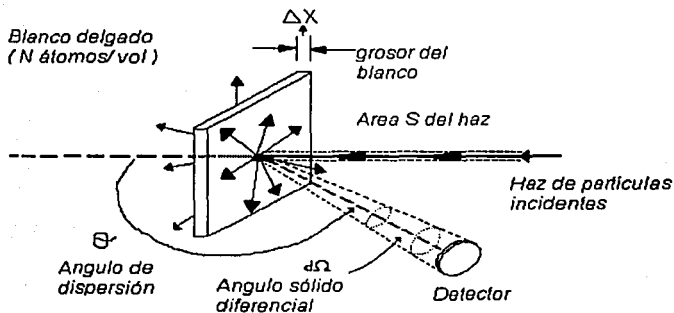


Fig. 1.7 Disposición simplificada de un experimento de dispersión para mostrar el concepto de la sección diferencial de dispersión. Solamente serán contadas por el detector aquellas partículas dispersadas dentro del ángulo sólido $d\Omega$.

Si uno quisiera conocer la probabilidad de dispersión en un ángulo sólido Ω y no en un ángulo diferencial $d\Omega$, la probabilidad de tal evento estaría descrito por la integral de sección eficaz σ :

$$\sigma = \int_{\Omega} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (1.12)$$

el ángulo sólido Ω de un detector común es pequeño, del orden de 10^{-3} steradian. Muchas veces también es conveniente introducir la sección eficaz de dispersión diferencial media $\bar{\sigma}$:

$$\bar{\sigma} \equiv \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad \text{Sección Eficaz Media} \quad (1.13)$$

Para calcular la sección eficaz diferencial de una colisión elástica, es necesario que los principios de conservación del momentum y energía se complementen por un modelo específico de la fuerza que actúa durante la colisión entre las masas del proyectil y del átomo del blanco. En muchos casos, esta fuerza está bien descrita por la repulsión columbiana de dos núcleos a una distancia dada y que en última instancia se aproximan a una distancia mínima que es mucho mayor que las dimensiones de sus núcleos, pero pequeña comparada con el radio de Bohr ($a_0 = \frac{h}{m_e v} = 0.53 \text{ \AA}$). Cuando tales condiciones se satisfacen, la sección eficaz diferencial de dispersión estará dada por la fórmula de Rutherford, ecuación (1.14), la cual corresponde al sistema de referencia del laboratorio:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right)^2 \frac{4}{\sin^4 \theta} \frac{\left[\left(1 - \left\{ \left(\frac{M_1}{M_2} \right) \sin \theta \right\}^2 \right)^{1/2} + \cos \theta \right]^2}{\left[1 - \left\{ \left(\frac{M_1}{M_2} \right) \sin \theta \right\}^2 \right]^{1/2}} \quad (1.14)$$

donde Z_1 es el número atómico del proyectil con masa M_1 , Z_2 es el número atómico del átomo en el blanco con masa M_2 , "e" es la carga del electrón y E es la energía del proyectil inmediatamente antes de la dispersión.

1.6 Alcance.

Cuando se utiliza un ion como proyectil sobre un material dado, con una energía de incidencia E_0 , y se introduce en la muestra, el proyectil se irá frenando gradualmente hasta detenerse (debido a los procesos

electrónico y nuclear ya descritos) para así quedar implantado dentro del material [5]. Llamamos alcance lineal (R_L) a la distancia total recorrida sobre la trayectoria desde el punto de incidencia hasta el punto en que se detiene. Tal alcance depende de E_0 , de tal forma que a mayor energía inicial mayor alcance lineal, el alcance se relaciona con el poder de frenado:

$$R_L(E_0) = \int_{E_0}^0 \left(-\frac{dE'}{dx} \right)^{-1} dE' \quad (1.15)$$

En la fig. 1.8 se muestran las proyecciones del alcance lineal sobre la dirección de incidencia del ion (R_p) y sobre la dirección perpendicular a ésta (R_t). Siendo R_p la profundidad a la cual se detiene el ion dentro del material, este parámetro es importante para el proceso de implantación de iones.

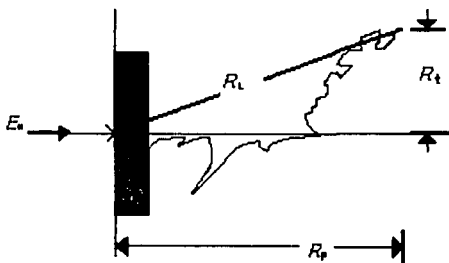


Fig. 1.8 Proyección sobre un plano de la trayectoria típica de un ion pesado en un material.

Para un experimento que involucre un gran número de proyectiles (con una misma dirección y energía E_0) el frenado de los proyectiles tendrá un carácter aleatorio debido a que cada proyectil tiene un diferente número de colisiones, por lo que las profundidades R_p presentarán una distribución $W(R_p)$ (que en su manejo se supone gaussiana) alrededor de la profundidad promedio $\langle R_p \rangle$ (fig. 1.9). Cuya desviación estándar es conocida como esparcimiento (straggling), cc. (1.16). Lo anterior es análogo para R_L .

$$s = \sqrt{S^2} = \langle (\Delta R_p)^2 \rangle^{1/2} = \left\langle \sum_i \langle (R_{p_i} - R_p)^2 \rangle \right\rangle^{1/2} \quad (1.16)$$

TEXIS CON
FALLA DE ORIGEN

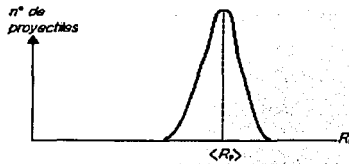


Fig. 1.9 Distribución $W(R_p)$ para N proyectiles.

Cuando se hace incidir un haz colimado de iones sobre un absorbedor de espesor x y detrás de la muestra se coloca un detector, sea N_0 el número de iones incidentes en un tiempo dado, y N el número que llega al detector en el mismo tiempo. Al experimentar con absorbedores de diferentes espesores se tiene que: para x pequeño $N \approx N_0$ (se frenan pero pasan todos), pero cuando x se aproxima al alcance proyectado R_p , el número N cae rápidamente a cero debido a la distribución de los alcances. Para el caso de iones pesados de baja energía se tiene que su gráfica N contra la profundidad en la muestra tendrá un mayor esparcimiento que en el caso de iones ligeros de alta energía, además de un decaimiento más gradual en torno a su correspondiente $\langle R_p \rangle$.

1.7 Cascadas, Daño y Función de Daño.

Como se discutió en la sección anterior, un ion energético sufre tanto un frenado electrónico como desviaciones en su trayectoria por su interacción de tipo nuclear al penetrar un material dado. Cuando los iones son altamente energéticos predomina el frenado electrónico, provocando la emisión de electrones a lo largo de la trayectoria del ion. Algunos de estos electrones adquieren suficiente energía para convertirse en proyectiles y causar nuevas ionizaciones (si individualmente son distinguibles se les llama rayos delta). El desplazamiento radial con respecto a la trayectoria del ion es realmente notable, por lo que se infiere que parte de la energía del ion se deposita en el material de esta forma. La energía absorbida por unidad de masa (dosis) depositada por los electrones disminuye al aumentar la distancia radial de la trayectoria del ion, esto por supuesto dependerá del tipo de ion, de su energía y del material absorbedor (típicamente a un radio de 10 nm cae aproximadamente dos órdenes de magnitud). Como consecuencia, la energía depositada implicará cambios químicos del material absorbedor, distribuyéndose en volúmenes cilíndricos concéntricos alrededor de la trayectoria original del ion-proyectil [5].

A lo largo de la trayectoria de los iones existen zonas donde es significativo el frenado nuclear, por lo que en estas regiones se presentan colisiones en las que el proyectil choca con la "totalidad" del átomo que compone el blanco. Cada uno de los átomos golpeados adquieren la energía cinética suficiente (suponiendo que las colisiones son elásticas) para convertirse a la vez en un nuevo proyectil que chocará con más átomos del material, de acuerdo con la descripción clásica de la dispersión. De esta forma es generada una cascada conformada en su totalidad por átomos del absorbedor. Los átomos desplazados por el proyectil original son llamados pka (en inglés *primary knock-on atom*), donde cada uno es generador de una cascada. La cascada se detiene cuando los átomos participantes han perdido tanta energía que no pueden provocar nuevos desplazamientos. El proceso simplificado de una cascada formada por un ion incidente se muestra en la fig. 1.10.

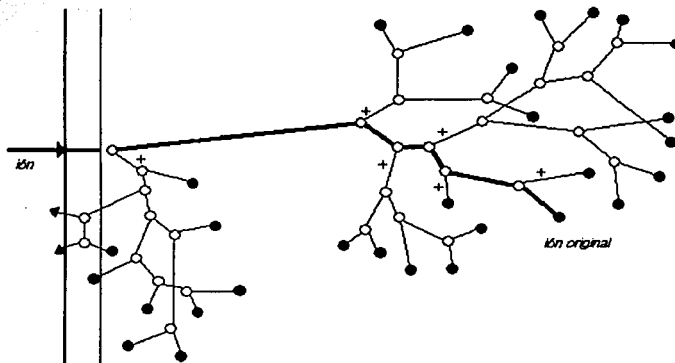


Fig.1.10 Forma de una cascada de desplazamientos. La trayectoria del ion original se indica por una línea gruesa. Todas las demás trayectorias corresponden a los átomos del material. Los círculos abiertos son posiciones que quedan vacías de átomos; los círculos negros son las posiciones finales de los átomos. Las cruces indican las trayectorias de los pka. Cuando la cascada sucede cerca de la superficie, algunos átomos pueden ser expulsados del material. Nótese que la cascada constituye una región rica en vacancias rodeada de una zona rica en intersticiales.

Según la teoría de Cheng utilizando fractales [7, 8], mediante los cuales se modelan las formas de las cascadas en un material irradiado, un material con número atómico promedio $\bar{Z} > 20$ cumple la condición necesaria para la formación de un spike térmico (puzón térmico), los cuales son originados por los componentes de las cascadas que imposibilitados para el desplazamiento de más átomos del sólido

emiten una fracción de su energía en forma vibracional (calor) [9]. En este tipo de materiales las ramificaciones de las cascadas están confinadas en volúmenes de radio extremadamente pequeño alrededor de la trayectoria del ion, dando así lugar a la conformación de spikes globales cilíndricos.

El desplazamiento que sufren la mayoría de los átomos del sólido que conforman una cascada es de tipo permanente, es decir, si se define a E_d como la energía necesaria para transferir un átomo del sólido de modo que su desplazamiento sea permanente (sin posibilidad de que haya recombinación) y $T \geq E_d$, donde T es la energía transferida del ion al átomo del blanco por medio de una colisión, implica que el átomo del sólido que ha colisionado con el ion irradiado ha sido desplazado de forma permanente dentro del sólido. La energía de desplazamiento de los sólidos depende del elemento del cual se compone, por lo general no tiene un valor preciso pues también suele ser función tanto de la dirección de incidencia del ion como de la temperatura del sólido. Por esta razón, es útil definir una función de desplazamiento $P_d(T)$ como la probabilidad de generar un desplazamiento por la transferencia de una energía T . Una forma posible de esta función se muestra en la fig. 1.11.

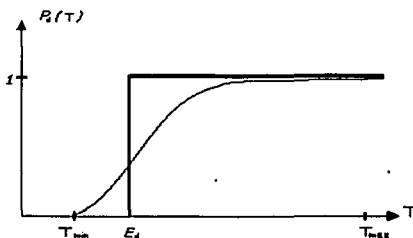


Fig. 1.11 Una forma posible para la función de desplazamiento, y una función de escalón con valor E_d .

De acuerdo con la fig. 1.11, si $T < T_{min}$ no puede haber desplazamiento; si $T > T_{max}$ seguramente hay desplazamiento, los valores de E_d están en el intervalo [10 eV, 50 eV]. Cuando una muestra es bombardeada con proyectiles con energía de incidencia $E_0 > E_d$, es de esperar la formación de un número de desplazamientos permanentes ó defectos Frenkel, $n_d(E_0)$. Donde número de defectos Frenkel está relacionado con la sección de desplazamiento $\sigma_d(E_0)$:

$$n_d(E_0) = \Phi_n \sigma_d(E_0) \quad (1.17)$$

donde Φ_n es la densidad de flujo de los proyectiles.

Por otra parte, si consideramos que los potenciales individuales de los átomos que componen la muestra son esferas rígidas, el número de desplazamientos $n_d(E_0)$ producidos en una cascada tiene los siguientes valores (la gráfica correspondiente se muestra en la fig.1.12) [5]:

$$\begin{array}{ll} \text{Si } E_0 < E_d & n_d(E_0) = 0 \\ \text{si } E_d \leq E_0 \leq 2E_d & n_d(E_0) = 1 \\ \text{si } 2E_d \leq E_0 \leq E_c & n_d(E_0) = \frac{E_0}{2E_d} \\ \text{si } E_0 > E_c & n_d(E_0) = \frac{E_c}{2E_d} \end{array}$$

donde $n_d(E_0)$ es una cantidad de interés en el estudio de daños producidos por la irradiación de los materiales.

El primer valor de los $n_d(E_0)$ corresponde al caso en el que la energía inicial del proyectil es insuficiente para producir desplazamientos en la muestra. En el segundo caso, el proyectil tiene la energía necesaria para producir solo un desplazamiento. Para el tercer caso, se tiene que $n_d(E_0)$ crece en forma lineal con E_0 , e igual al promedio de la energía transferida $E_0/2$ dividido entre la energía de desplazamiento. Finalmente, a partir de cierta energía crítica E_c , se ha observado que $n_d(E_0)$ es constante. Cuando se consideran potenciales distintos a la esfera rígida, los dos últimos valores de E_d se corrigen multiplicándolos por un factor < 1 y por otro factor que toma en cuenta que no toda la energía se emplea en desplazamientos tomando en cuenta el frenado electrónico, por lo general a este último factor se le da un valor cercano a 0.8. Otra forma alterna, consiste en estimar el valor de $n_d(E_0)$ por simulaciones numéricas de tipo Monte Carlo [11].

En los metales, buena parte de la pérdida de energía de los proyectiles irradiados es transmitida a los electrones de la banda de conducción por medio de los procesos de ionización y excitación. Dado que la banda está parcialmente ocupada, con una multitud de electrones de conducción, los electrones producidos

por la ionización y excitación regresan rápidamente a sus estados normales. Es por esto, que la estructura y las propiedades de los metales se ven poco afectadas cuando son irradiados con fotones o electrones.



Fig. 1.12 Propuesta de Kinchin y Pense sobre el número de desplazamientos producidos en una cascada de iones.

En cambio, la irradiación con iones o neutrones puede inducir en los metales a la formación de defectos puntuales debidos a las colisiones de los iones primarios o secundarios con los átomos del metal. En un bombardeo largo los desplazamientos producidos por las cascadas se van sumando hasta que, en promedio, todos los átomos del material han sido desplazados, incluso varias veces. Al promedio del número de desplazamientos que ha sufrido cada átomo del blanco en un bombardeo se le llama dpa (desplazamientos por átomo); donde este promedio depende de la densidad de flujo de los proyectiles, de la energía disponible para colisiones y del número de desplazamientos $n_d(E_0)$ producidos en cada cascada. Por lo que es natural inferir que un valor alto de dpa significa que la estructura inicial del material bombardeado ha sido modificada considerablemente.

Los defectos puntuales producidos por las cascadas pueden emigrar dentro del material hasta encontrar un obstáculo que los detiene. Por ejemplo, un intersticial puede experimentar alguno de los siguientes procesos: puede encontrarse con una vacancia dentro del mismo material, en cuyo caso se recombinan y aniquilan mutuamente, por lo que finalmente no se produce daño y no cambian las propiedades del metal. En forma alterna puede encontrarse con una dislocación, que constituye una trampa para intersticiales móviles, quedando detenido junto con otros intersticiales. Puesto que las dislocaciones son lugares de acumulación de intersticiales y vacancias, en estas trampas se lleva a cabo la aniquilación de intersticiales y vacancias. Finalmente, existe la posibilidad de que varios intersticiales se acumulen en

alguna dislocación, iniciando un defecto extendido que crece conforme es alimentado con nuevos intersticiales. La creación de defectos extendidos o su crecimiento modifica las propiedades macroscópicas del metal [5].

En forma equivalente, las vacancias creadas por la radiación pueden ser aniquiladas por intersticiales en las dislocaciones o fallas en el metal. También pueden llegar a trampas como defectos extendidos, en donde se acumulan vacancias o son aniquiladas por intersticiales previamente acumulados. Finalmente, pueden acumularse vacancias para formar defectos extendidos, que en este caso pueden dar lugar a regiones huecas o burbujas. Estos daños también afectan las propiedades de los metales. La energía de activación para la migración de vacancias se encuentra en el intervalo [0.5, 1.6 eV].

Las impurezas existentes en el metal o implantadas por el bombardeo también son móviles, durante el bombardeo (o después del bombardeo) suelen acumularse en trampas o aglomerarse para formar agregados, constituyendo así la inclusión de material extraño en estos sitios. O bien pueden quedar dispersadas en el material bombardeado de tal forma que al final del proceso éste puede considerarse una solución sólida.

Al acumularse el daño estructural incorporado a un sólido cristalino por medio de la irradiación, su estructura básica puede ser modificada. El número de dpa en primera instancia es una medida de la posibilidad de que sucedan cambios estructurales. Cuando los dpa rebasan la unidad, la situación de la estructura del material en muchos casos puede encontrarse en un estado amorfizado. O bien, en un caso de reconstrucción, la estructura básica del material es reconstruida gracias a los procesos que favorecen el reestablecimiento de la estructura tal como las colisiones de reemplazo, aniquilación de defectos puntuales y la temperatura. Por lo anterior, en algunos materiales es posible el proceso de reconstrucción aún después de haber recibido un daño considerable por irradiación. En el proceso de reconstrucción también es factible la formación de fases sólidas intermedias con estructuras distintas a la original, donde algunas de estas fases intermedias dentro del metal pueden ser inducidas por procesos térmicos convencionales.

CAPITULO II

CONCEPTOS DE RETRODISPERSION Y SU USO COMO TÉCNICA DE ANÁLISIS (RBS).

2.1 Formación de un Espectro de Retrodispersión.

La espectrometría por retrodispersión está basada en la clasificación y cuantificación de partículas alfa (He^4) captadas por un detector, las cuales fueron retrodispersadas después de incidir sobre los átomos que componen una muestra utilizada como blanco [6]. Como se muestra en la fig. 2.1:

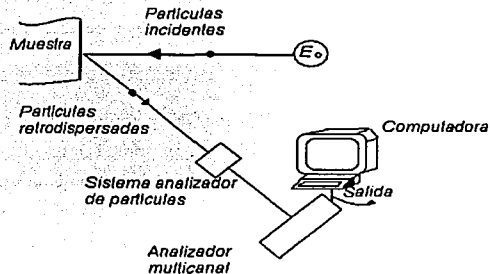


Fig. 2.1 Disposición conceptual de un sistema de espectrometría por retrodispersión.

Este esquema nos muestra el proceso del fenómeno de retrodispersión, donde la fuente genera un haz colimado de partículas monoenergéticas con una corriente de 10 a 100 nA de iones He^4 con 2 MeV de energía, concentrado generalmente en un área de 1 mm² (área mucho menor que el área total de la superficie de la muestra). Estas partículas alfa inciden sobre un blanco-muestra que se desea analizar. La mayoría de las partículas incidentes se alojan en la muestra retrodispersándose aproximadamente 1 de cada 10⁴, el detector capta las partículas retrodispersadas por los átomos del blanco que se encuentran tanto en la superficie de la muestra como por átomos que se encuentran a varias micras de profundidad.

El fenómeno de retrodispersión se debe a que las partículas del haz al incidir con los átomos del blanco interaccionan entre sí por medio de una colisión elástica, dando como consecuencia la retrodispersión de partículas a diversos ángulos θ con respecto a la dirección de incidencia del haz. Este proceso se lleva a cabo en una cámara al vacío (vacío del orden de 10^{-6} torr) con el fin de evitar tanto la desviación del haz incidente como la pérdida de energía de sus componentes por la interacción con las partículas de aire durante su trayecto a la muestra.

Las partículas que inciden sobre el detector (de tipo semiconductor) generan en él una señal eléctrica (cuya magnitud es proporcional al parámetro de interés: momentum, energía, carga, velocidad, etc.) la cual es amplificada y procesada por un analizador multicanal que clasifica las señales en series de intervalos equivalentes de acuerdo a la magnitud de la señal. En general, un analizador multicanal es capaz de establecer una correspondencia uno a uno entre el número de canal y la magnitud del parámetro (energía) de la partícula retrodispersada. Lo más óptimo es que tal correspondencia sea de tipo lineal (que es nuestro caso), por lo que al determinarse experimentalmente se le asocia a cada canal un intervalo de energía ξ , cuyo valor especifica la resolución de nuestro sistema analizador.

Puesto que cada intervalo de energía ξ es referido como un canal i , un evento favorable para dicho canal durante la retrodispersión de partículas alfa será registrado como una cuenta. Al final del experimento de retrodispersión se contará con un registro de los canales i (o de la energía con la cual llegaron al detector) y su respectivo número de cuentas H_i , el cual es graficado con la ayuda de un sistema de cómputo conectado a la salida de nuestro sistema analizador, este gráfico es comúnmente llamado Espectro de Retrodispersión. En la fig. 2.2 se muestra el espectro de retrodispersión más simple correspondiente a un blanco monoisotópico (compuesto por un solo tipo de átomos), donde se considera que E_0 es la energía de incidencia de las partículas alfa, y K es el factor (factor cinemático) al cual disminuyen su energía por interactuar con los átomos del blanco. De acuerdo a la forma del espectro es posible afirmar que: si la interacción de las partículas alfa con los átomos del blanco ocurre en la superficie entonces las partículas alfa llegarán al detector con una energía KE_0 . Mientras que las partículas alfa que interactuaron con los átomos del blanco a una profundidad x , llegarán al detector con una energía menor a KE_0 .

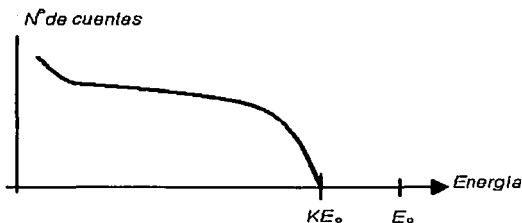


Fig. 2.2 Espectro de retrodispersión para una muestra compuesta por un tipo de átomos.

2.2 Factor Cinemático.

Cuando una partícula de masa M_1 en movimiento colisiona elásticamente con una partícula de masa M_2 en estado estacionario, se produce una transferencia de energía de la partícula de masa M_1 a la partícula de masa M_2 . De tal forma, que parte de la energía cinética que pierde la partícula incidente se transforma en energía cinética y movimiento vibratorio de la partícula con la que interactuó. Bajo las siguientes condiciones, se afirma que el mecanismo de interacción entre un haz de partículas incidentes con los átomos de un blanco es por medio de colisiones elásticas:

- 1) La energía E_0 del proyectil debe ser mucho mayor que la energía de enlace químico (que es del orden de 10 eV) de los átomos que componen el blanco.
- 2) La energía E_0 del proyectil tendrá un límite E_n , de tal forma que si $E_0 < E_n$ entonces la interacción entre las partículas incidentes y los átomos del blanco dará lugar a procesos nucleares dentro del blanco, la presencia de este tipo de procesos también depende del tipo de átomos utilizados como blanco y proyectil. Por lo que para evitar la posibilidad de procesos nucleares en la conformación del espectro de retrodispersión se debe satisfacer que: $10 \text{ eV} \ll E_0 < 3 \text{ MeV}$.

Una vez satisfechas las condiciones anteriores, es posible cuantificar el factor cinemático (razón de las energías cinéticas de la partícula incidente antes y después de la colisión) mediante el análisis de la colisión elástica entre los átomos que componen haz y los átomos del blanco. Sea V_0 la velocidad inicial

de la partícula incidente, V_1 y V_2 las velocidades finales correspondientes del proyectil y átomo del blanco después de la colisión; ϕ el ángulo de desviación del proyectil con respecto a la dirección de incidencia y θ el ángulo de desviación del átomo del blanco. Estas cantidades están referidas en un sistema coordenado del laboratorio. La notación y geometría del proceso de dispersión se muestran en la fig. 2.3.

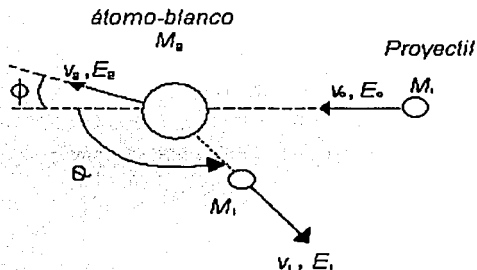


Fig. 2.3 Representación esquemática de una colisión elástica entre un proyectil de masa M_1 con velocidad v_0 , una energía E_0 y una masa M_2 para el blanco que inicialmente está en reposo. Después de la colisión, el proyectil y el blanco tienen velocidades y energías v_1, E_1 y v_2, E_2 , respectivamente. Los ángulos θ y ϕ son positivos de acuerdo con la figura. Todas las cantidades están referidas con respecto al sistema de referencia del laboratorio.

Considerando la conservación del momentum en las direcciones paralela y perpendicular con respecto a la dirección de incidencia, así como la conservación de la energía cinética se tiene:

$$\begin{aligned}
 1/2 M_1 V_0^2 &= 1/2 M_1 V_1^2 + 1/2 M_2 V_2^2 \\
 M_1 V_0 &= M_1 V_1 \cos \phi + M_2 V_2 \cos \theta \\
 0 &= M_1 V_1 \sin \phi - M_2 V_2 \sin \theta
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

de las cuales se deduce (considerando $M_1 \leq M_2$):

$$K = 1/2 M_1 V^2_1 / 1/2 M_1 V^2_0 = [(M^2_2 - M^2_1 \sin^2 \theta)^{1/2} + M_1 \cos \theta / (M_2 + M_1)]^2 \quad (2.2)$$

esta última relación da la posibilidad de determinar la masa de los átomos que componen la muestra si se conocen la energía de incidencia E_0 , la masa M_1 del proyectil y el ángulo θ de retrodispersión de la partícula incidente; además del valor de la energía E_1 medida por el detector.

2.3 Escala de Profundidad para una Muestra Elemental.

A continuación se describe cómo una partícula retrodispersada alcanza una energía E_1 (medida por el detector). De acuerdo con la fig. 2.4-a, se considera a E_0 como la energía de las partículas incidentes, E es la energía de la partícula incidente antes de ser retrodispersada a una profundidad x y E_1 es la energía de la partícula al llegar al detector.

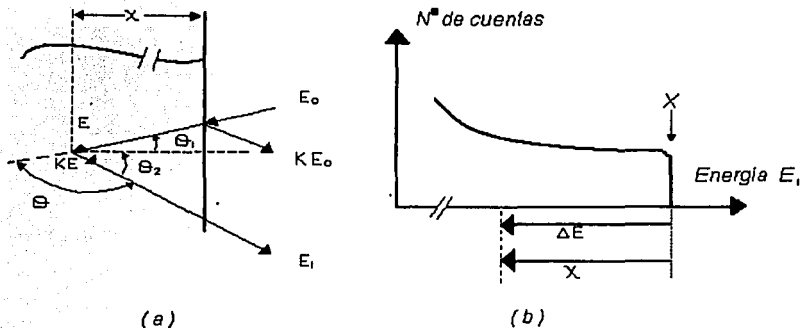


Fig. 2.4. (a) Eventos retrodispersivos por una muestra que consiste de un elemento monoisotópico. Los ángulos θ_1 y θ_2 , formados con respecto a la normal de la muestra, son positivos. El haz incidente, la dirección de detección, y la normal a la muestra son coplanares. (b) Cuando suponemos que la pérdida de energía es constante a lo largo de las trayectorias de penetración y emergente, entonces la energía ΔE puede ser linealmente relacionada con la profundidad x por medio de $\Delta E = [S]x$ como está indicado en la abscisa del espectro de retrodispersión.

Como el proceso de la partícula que incide a un ángulo θ_1 y es retrodispersada a un ángulo θ_2 está contenido en un plano, donde los ángulos son medidos con respecto a la normal de la superficie del blanco.

El ángulo de dispersión θ en el sistema de referencia del laboratorio estará dado por $\theta = \pi - \theta_1 - \theta_2$, note que tanto θ_1 como θ_2 están definidos como números positivos si se localizan en uno u otro lado de la normal a la superficie del blanco. De acuerdo con la ecuación (1.6), es posible relacionar la energía E con la longitud de camino recorrido $\left(\frac{x}{\cos\theta_1}\right)$ en el trayecto de penetración de las partículas incidentes por medio de la ecuación:

$$\frac{x}{\cos\theta_1} = - \int_{E_0}^E \frac{dE}{(dE/dx)} \quad (2.3)$$

el signo menos se debe a que E es menor que E_0 , mientras que $\frac{dE}{dx}$ es positiva y evaluada entre los valores E_0 y E . En forma análoga, en el trayecto de salida del haz éste recorre una distancia $\frac{x}{\cos\theta_2}$; por lo que KE (energía de las partículas inmediatamente después de la retrodispersión a una profundidad x) se relaciona con la energía E_I por la siguiente ecuación:

$$\frac{x}{\cos\theta_2} = - \int_{KE}^{E_I} \frac{dE}{dE/dx} \quad (2.4)$$

en este caso $\frac{dE}{dx}$ es evaluada entre los valores KE y E_I . En la fig. 2.5-a, se muestra a $\frac{dE}{dx}$ como una función de la energía por medio de una línea de trazo fino. Los segmentos de trazo grueso nos dan los valores de $\frac{dE}{dx}$ para una trayectoria hacia el interior de la muestra donde las partículas del haz pasan de una energía E_0 a E ; mientras en el trayecto en el que las partículas después de ser retrodispersadas emergen de la muestra y llegan al detector, éstas pasan de una energía KE a E_I . La diferencia $E_0 - E = \Delta E_{in}$, es la pérdida de energía de las partículas al llegar a una profundidad x ; en forma similar, $KE - E_I = \Delta E_{out}$ es la pérdida de energía de las partículas que han sido retrodispersadas, emergen de la muestra y llegan al detector. De acuerdo a las ecuaciones (2.3) y (2.4), y con la gráfica 2.5-b en la cual se indican los valores de $\frac{1}{dE/dx}$ en los trayectos antes mencionados, es posible establecer una escala de profundidad en función del valor de las integrales.

TECIS CON
FALLA LE OR.GEN

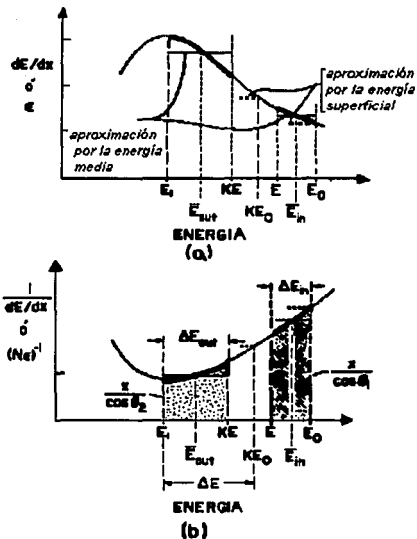


Fig. 2.5 Representación gráfica de la pérdida de energía de las partículas a lo largo de sus trayectorias (líneas gruesas) emergente y de penetración a través de una muestra conformada de un elemento monoatómico. La línea delgada representa la forma funcional de dE/dx contra E en (a) y de $(dE/dx)^{-1}$ contra E en (b). Ya que $dE/dx = N\epsilon$, la gráfica en (a) también es equivalente para ϵ contra E .

2.4 Factor $[S]$ de Pérdida de Energía y el Factor $[\epsilon]$ de Sección de Frenado.

Cuando se desea establecer una relación entre la diferencia de energías (de las partículas retrodispersadas en la superficie y a una profundidad x) con la profundidad x , estas cantidades están relacionadas en forma lineal por medio de un factor de proporcionalidad $[S]$ o $[\epsilon]$ equivalentes entre sí. Si consideramos que el valor de dE/dx es constante a lo largo de los trayectos de penetración y emergente en la muestra, en cada caso con un valor específico, entonces las ecuaciones (2.3) y (2.4) se reducen a:

$$E = E_0 - \frac{x}{\cos\theta_1} \frac{dE}{dx} \Big|_{in} \quad (2.5)$$

$$E_1 = KE - \frac{x}{\cos\theta_2} \frac{dE}{dx} \Big|_{out} \quad (2.6)$$

por lo que la diferencia de energía de las partículas retrodispersadas en la superficie y a una profundidad x será:

$$\Delta E = KE_0 - E_1 = \left[\frac{K}{\cos\theta_1} \frac{dE}{dx} \Big|_{in} + \frac{1}{\cos\theta_2} \frac{dE}{dx} \Big|_{out} \right] x = [S]x \quad (2.7)$$

[S] es llamado el factor de pérdida de energía. En forma equivalente, esta relación puede ser escrita en términos de las secciones de frenado. De acuerdo con la ecuación (2.7):

$$\Delta E = \left[\left(\frac{K}{\cos\theta_1} \right) \left(\frac{1}{N} \frac{dE}{dx} \Big|_{in} \right) + \left(\frac{1}{\cos\theta_2} \right) \left(\frac{1}{N} \frac{dE}{dx} \Big|_{out} \right) \right] Nx \quad (2.8)$$

entonces:

$$\Delta E = KE_0 - E_1 = \left(\frac{K\varepsilon_{in}}{\cos\theta_1} + \frac{\varepsilon_{out}}{\cos\theta_2} \right) Nx = [\varepsilon]Nx \quad (2.9)$$

donde $[\varepsilon]$ es llamado el factor de la sección de frenado. Si suponemos que se conocen los valores de $\frac{dE}{dx}$ o ε a lo largo de cada trayecto y se utilizan en las ecuaciones (2.7) y (2.9), estaremos estableciendo una escala lineal entre la profundidad y la energía como se muestra en la fig. 2.4-b.

En la fig. 2.6, se describe gráficamente la conexión entre el factor de pérdida de energía [S] y la profundidad x en la cual ocurrió la retrodispersión para una pérdida de energía ΔE . La relación exacta entre ΔE y x que se deriva de las ecuaciones (2.3) y (2.4), no es lineal. La gráfica de $[S_0]x$, considerando la evaluación de $\frac{dE}{dx} \Big|_{in}$ en E_0 y $\frac{dE}{dx} \Big|_{out}$ en KE_0 , es una aproximación válida para la pérdida de energía cuando el fenómeno de retrodispersión se lleva a cabo en regiones cercanas a la superficie de la muestra.

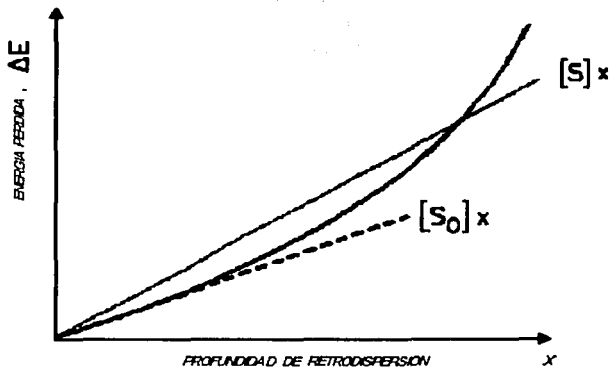


Fig. 2.6 La curva sólida muestra la relación entre la energía perdida ΔE y la profundidad x a la cual ocurre la retrodispersión. La relación lineal $\Delta E = [S]x$ es exacta a una profundidad. El símbolo $[S_0]$ se refiere a la aproximación superficial de la energía, en la figura es representada $[S_0]x$ por una línea punteada. La energía de incidencia es E_0 .

2.4.1 Método de Aproximación de $[S]$ y $[\epsilon]$ por la Energía Media.

Cuando la distancia recorrida por el haz incidente es significativa, la aproximación superficial empieza a fallar, ver fig. 2.6. Por lo que de acuerdo a la fig. 2.5, es posible obtener una mejor aproximación evaluando el valor de dE/dx (o ϵ) a una energía intermedia \bar{E} que alcanza la partícula entre los extremos de cada trayecto. Por lo que se definen:

$$\left[\bar{S} \right] \equiv \left[\frac{K}{\cos\theta_1} \frac{dE}{dx} (\bar{E}_{in}) + \frac{1}{\cos\theta_2} \frac{dE}{dx} (\bar{E}_{out}) \right] \quad (2.10)$$

$$\left[\bar{\epsilon} \right] \equiv \left[\frac{K}{\cos\theta_1} \epsilon (\bar{E}_{in}) + \frac{1}{\cos\theta_2} \epsilon (\bar{E}_{out}) \right] \quad (2.11)$$

En esta aproximación se consideran:

$$\bar{E}_{in} = 1/2 (E + E_0) \quad (2.12)$$

$$\bar{E}_{out} = 1/2 (E_1 + KE) \quad (2.13)$$

en las cuales se desconoce el valor de E . El valor de E es estimado de diversas maneras, no obstante, todas las estimaciones parten de considerar tanto la diferencia de energía $\Delta E = KE_0 - E_1$, así como el que esta cantidad de energía es depositada en forma uniforme a lo largo de los trayectos ya mencionados. Bajo estas consideraciones E es aproximadamente $E_0 - 1/2 \Delta E$ y $E_1 = KE - 1/2 \Delta E$. Lo que implica que los valores de \bar{E}_{in} y \bar{E}_{out} esten dados como:

$$\bar{E}_{in} = 1/2 (E_0 + E) = 1/2 (E_0 + E_0 - 1/2 \Delta E) = E_0 - 1/4 \Delta E \quad (2.14)$$

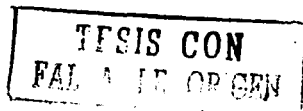
$$\bar{E}_{out} = 1/2 (KE + E_1) = 1/2 (E_1 + 1/2 \Delta E + E_1) = E_1 + 1/4 \Delta E \quad (2.15)$$

Cuando estos valores son utilizados en las ecuaciones (2.10) y (2.11), el método es conocido como la Aproximación Simétrica por la Energía Media. Esta aproximación es particularmente buena cuando $K \approx 1$ y $G_1 \approx G_2$.

La estimación del valor de E también es útil para evaluar $\sigma(E)$, pues en este caso se requieren buenas aproximaciones de E , recordando que las secciones de dispersión varían inversamente con el cuadrado de la energía E . Otros métodos para la aproximación de la energía E pueden ser consultados en textos de Espectrometría por Retrodispersión [6, 10].

2.5 Altura de un Espectro de Energía para una Muestra Elemental.

Cuando el haz incide en forma normal a la superficie de la muestra, como se muestra en la fig 2.1. El número de cuentas H_i , de acuerdo con las ecs. (1.10) y (1.13), estará dado por:



$$H = \int_{\Omega} dQ = \sigma \Omega N Q t \quad (2.16)$$

donde H es el número de partículas dispersadas en un ángulo Ω y t es el grosor de la muestra. Si esto lo consideramos para un bloque de grosor τ_i , a una profundidad x_i , que presenta un número de átomos dispersores por unidad de área $N\tau_i$, y que le corresponde un intervalo de energía ξ ; entonces el número de partículas que llegan al detector y que son clasificadas en el canal i (por llegar con una energía $E_{i,1}$), es:

$$H_i(E_{i,1}) = \sigma(E_i) \Omega Q N \tau_i \quad (2.17)$$

donde $\sigma(E_i)$ es la sección eficaz diferencial evaluada a una energía E_i (energía de la partícula antes de ser retrodispersada por el bloque i). Ver fig. 2.7.

Para un haz con ángulo de incidencia ($\theta_i > 0$), su trayectoria a través del bloque i tiene una longitud $\tau_i / \cos\theta_i$. En este caso más general de incidencia se tiene:

$$H_i = \sigma(E_i) \Omega Q N \tau_i / \cos\theta_i \quad (2.18)$$

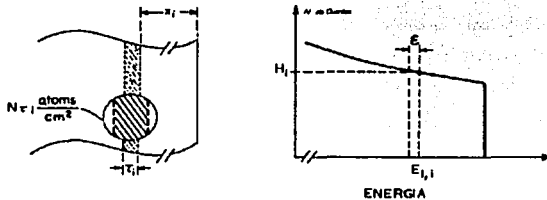


Fig.2.7 La figura nos muestra la correspondencia entre (a) el bloque i a una profundidad x_i en una muestra monoisotópica y (b) el canal i para una energía $E_{i,1}$. La anchura ξ de cualquier canal es el mismo, pero no así para la anchura τ_i de los bloques.

CAPITULO III

CANALIZACIÓN.

3.1 Introducción al Efecto de Canalización.

Hasta ahora se ha tratado y aplicado el análisis de retrodispersión a blancos amorfos cuyos constituyentes están orientados al azar. Pero existe otro caso en el cual las partículas incidentes dan la posibilidad de percibir la estructura y orden cristalino del blanco por medio del efecto de canalización. El efecto de canalización es la conducción de iones energéticos a través de filas o planos de átomos del blanco por medio de colisiones suaves de ángulo pequeño de dispersión [6, 10]. En términos de la Espectrometría de Retrodispersión, el efecto de canalización produce un notable cambio en el número de cuentas conforme cambia la orientación del monocristal respecto a la dirección de incidencia del haz analizador. Las medidas obtenidas del efecto de canalización tienen tres importantes aplicaciones:

- a) Cantidad y distribución de desorden en la red.
- b) Localización de impurezas atómicas en los sitios de la red cristalina.
- c) Composición y grosor de la capa superficial amorfa.

En la fig. 3.1, se muestran algunas de las disposiciones atómicas que presenta la red tipo diamante de un cristal al cambiar su orientación. Este efecto, nos ilustra la posibilidad de efectos notables en el número de retrodispersión cuando el cristal sea rotado respecto al haz incidente de iones energéticos.

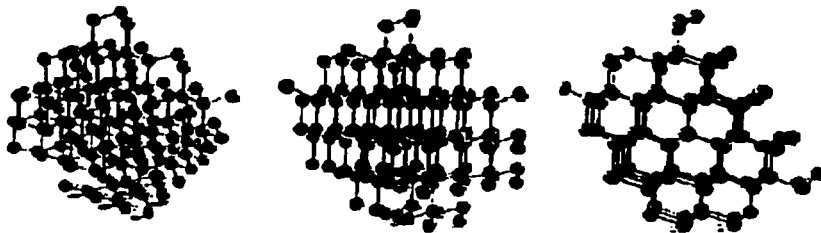


Fig. 3.1 Modelo de una red de átomos que muestra la configuración atómica en la red tipo diamante vista a lo largo de las direcciones (a) random, (b) planar y (c) axial.

En la práctica, cuando un cristal es rotado respecto a la dirección de incidencia del haz y en algún momento el haz coincide con alguna de las direcciones axiales del cristal, el número de retrodispersión es notablemente menor (hasta dos órdenes de magnitud) que el número de retrodispersión correspondiente al caso en el que el haz incidente "ve" al cristal como una colección al azar de átomos, disposición random. Aunque de manera menos notoria, la alineación del haz con las direcciones planares también produce la disminución del número de retrodispersión. En ambos casos, las partículas incidentes son conducidas a lo largo de "canales" en el cristal, de tal forma que no se aproximan lo suficiente a la red de átomos (filas axiales o planos) como para sufrir procesos elásticos de dispersión de ángulo amplio.

Como herramienta de análisis de muestras, la componente del haz que ha canalizado actúa como una prueba en la detección de átomos (o impurezas) que han sido desplazados de sus sitios en la red por distancias que exceden aproximadamente de 0.1 a 0.2 Å. Usando los mismos conceptos analíticos desarrollados en el capítulo II, es posible determinar el número de átomos desplazados (cantidad de desorden), el número de impurezas atómicas no sustitucionales, así como su respectiva distribución de profundidad.

Diversos efectos pueden complicar el análisis de una muestra obtenido por medio del efecto de canalización. Por lo que se ha supuesto implícitamente que:

- 1.-Los átomos tienen una localización en sitios bien definidos de la red o se encuentran desplazados lejos de tales sitios. No obstante, en un buen número de casos, los átomos están desplazados sólo por pequeñas distancias de sus sitios en la red.
- 2.-El haz canalizado es distribuido uniformemente a través de los canales entre los planos o filas axiales. Sin embargo, esto no ocurre necesariamente, pues se ha mostrado que el haz puede ser concentrado o enfocado cerca del centro de los canales.
- 3.-Por último, hemos supuesto que el daño debido a la irradiación del haz analizador no afecta la ubicación de los átomos alojados o impurezas en la red del blanco. Suposición que no necesariamente se cumple.

A pesar de estas posibles complicaciones, el efecto de canalización es una técnica analítica muy poderosa. La cual provee de valores simples y directos para cuantificar el desorden en la red, así como del número de átomos no sustitucionales en diversas situaciones. Existen métodos convencionales que permiten determinar si cualquiera de las dificultades previamente listadas influyen en el análisis.

3.2 Alineación de un Cristal.

La canalización es un método simple para orientar los ejes o planos de un cristal en la dirección de incidencia del haz. El procedimiento de alineamiento es el primer paso en experimentos diseñados para determinar la localización de impurezas o cantidad de desorden en la red. Para desarrollar el concepto, se usarán los modelos de las redes cristalinas que se muestran en la fig. 3.2, en donde se muestra:

- a) Un arreglo al azar de átomos (sólido amorfo). Random.
- b) Un cristal compuesto de un conjunto de planos paralelos entre sí, ocupados por átomos al azar. Muestra planar.
- c) Un cristal compuesto de dos conjuntos de planos ortogonales entre sí, con filas de átomos a lo largo de las líneas de intersección entre los planos. Muestra axial.

Como se puede ver en la fig.3.2-a, si el haz de iones energéticos incide sobre una muestra amorfa, el número de partículas retrodispersadas permanecerá constante conforme la orientación de la muestra es inclinada y rodada con respecto al haz. En esta figura se muestra esquemáticamente el número de partículas retrodispersadas por las capas superficiales de la muestra.

Para un cristal que presenta una conformación planar el número de partículas retrodispersadas decrece en forma notoria cuando el haz está alineado con los planos (fig. 3.2-b), esto ocurre a determinada inclinación de la muestra durante el proceso de rotación con respecto al haz. Esto puede notarse en el correspondiente perfil angular del número de retrodispersión por un canal que es paralelo a la intersección de los planos con la superficie de la muestra, lo que pone en evidencia la canalización planar.

Cuando la muestra está conformada por dos conjuntos de planos perpendiculares entre sí, su correspondiente perfil angular del número de retrodispersión exhibe dos canales perpendiculares entre sí (fig.3.2-c). Si además, el haz es alineado con el cristal de tal forma que coincide con la dirección de la intersección de los dos canales, el número de retrodispersión alcanzará un valor mínimo. Pues el cristal en esta orientación parecerá conformado por filas de átomos, siendo visibles para el haz los átomos más externos de cada fila. Este alineamiento da lugar a la canalización axial.

TELIS CON
FALLA DE ORIGEN

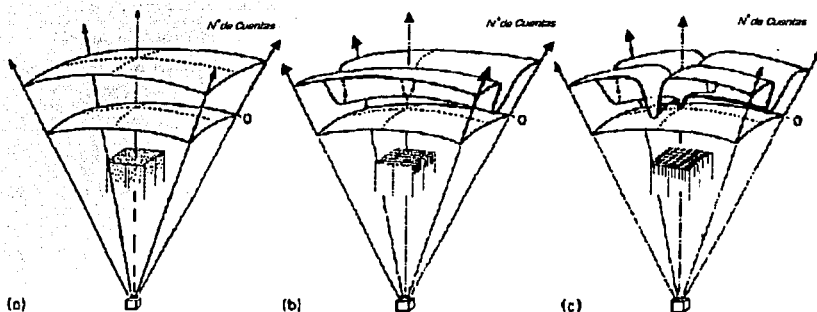


Fig. 3.2 Número de retrodispersión para capas cercanas a la superficie de cristales (a) amorfos, (b) planares y (c) cúbicos en función de la orientación de la muestra con respecto a un haz colimado de iones ${}^4\text{He}$ con una energía de un megaelectrón volt. La elaboración de perfiles angulares del número de cuentas nos proporciona una excelente visión de la estructura del cristal.

El alineamiento de un cristal con respecto al haz, se fundamenta en la existencia de mínimos bien definidos en el perfil angular del número de retrodispersión, donde cada mínimo identifica a determinada familia de los planos en el cristal [10]. El método de alineamiento consiste en realizar barridos en el ángulo φ , rotación de la muestra alrededor de la normal a la superficie, a un ángulo θ de inclinación respecto a la dirección de incidencia del haz. Durante el proceso de rotación de la muestra, la componente del haz que es retrodispersada hacia el detector será la que conforme el correspondiente perfil angular del número de retrodispersión.

Como un ejemplo del párrafo anterior, en la fig. 3.3 el haz incide sobre un cristal cuyo eje está inclinado θ grados con respecto a la dirección de incidencia del haz. Puesto que el cristal rota alrededor de su eje cristalográfico, se observa del perfil angular del número de retrodispersión la existencia de mínimos en las posiciones angulares de rotación que corresponden al alineamiento del haz con las conformaciones planares del cristal. Si el cristal cuenta con dos tipos de planos (fig. 3.3), existirán 4 mínimos planares en 360° de rotación en φ . Para orientar el eje del cristal paralelamente a la dirección del haz es necesario graficar los mínimos, con coordenadas θ (inclinación) y φ (rotación), en papel polar. Como a cada ángulo

θ de inclinación de la muestra le corresponde una secuencia de mínimos en el ángulo ϕ , al determinar y graficar la secuencia de mínimos para diferentes ángulos θ de inclinación, se contará con diversos conjuntos de puntos apostados sobre una familia de rectas que representan las disposiciones planares del cristal. La intersección (θ_0, ϕ_0) en el gráfico polar, corresponde a la orientación del eje cristalográfico con respecto a la dirección de incidencia del haz. La aplicación de este procedimiento se detalla en la sección 5.1 del capítulo V.

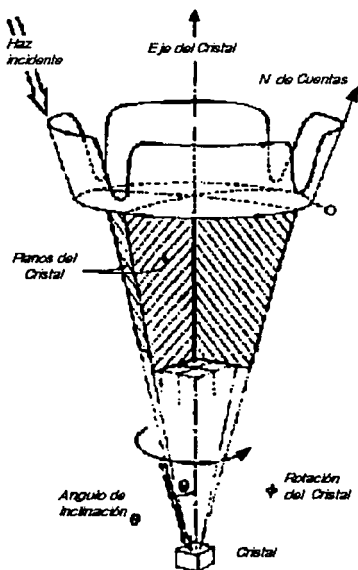


Fig. 3.3 El número de retrodispersión como función del ángulo de rotación para un cristal cuyo eje está inclinado θ grados con respecto al haz incidente de iones He con un megaelectrón volt de energía. El mínimo en el número de retrodispersión ocurre en ángulos de rotación ϕ cuando el haz está alineado con las direcciones planares del cristal.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

3.3 Semiángulo Axial ($\psi_{\frac{1}{2}}$) y el Mínimo del Número de Retrodispersión (χ_{\min}).

Puesto que los espectros y perfiles angulares de retrodispersión que corresponden a una muestra son la base para el análisis de su estructura, es necesaria la normalización de los espectros y perfiles con el propósito de facilitar la extracción y manejo de datos experimentales que se deducen de ellos. La normalización de un espectro de retrodispersión se obtiene al multiplicar el número de retrodispersión (χ) por el factor $1/H$, donde H es el número de retrodispersión medio para una orientación random. De esto, definimos a χ_{\min} (mínimo número de retrodispersión) como la razón de las alturas H_A/H donde H_A es el número de retrodispersión mínimo de un espectro que corresponde a un alineamiento del eje del cristal con la dirección de incidencia del haz, para una región cercana a la superficie. En la fig. 3.4-a, se muestra el esquema del número de retrodispersión en función del ángulo de inclinación para la incidencia de iones ^4He con un megaelectronvolt de energía sobre un monocristal. Mientras en la fig. 3.4-b, se muestran los espectros de retrodispersión en el caso de un haz incidente a lo largo de uno de los ejes cristalográficos (espectro alineado) y a lo largo de una dirección de no-canalización (espectro random).

Ya que los perfiles angulares del número de retrodispersión se normalizan de igual forma por el factor $1/H$. El valor de χ_{\min} es medido directamente del perfil angular del número de retrodispersión (que incluye la dirección del eje del cristal evitando cuidadosamente inclinaciones de canalización planar) en una región que corresponde a una energía $E_{(1)}$ por debajo de la energía correspondiente al frente del espectro random, fig. 3.4-c. Para una región cercana a la superficie de un cristal perfecto, los valores del mínimo del número retrodispersión (χ_{\min}) en las direcciones axiales se encuentran en el intervalo de $[1 \times 10^{-2}, 3 \times 10^{-2}]$.

Por debajo de la superficie, el número de retrodispersión para un cristal alineado (línea punteada, fig. 3.4-b) crece conforme aumenta la profundidad en el cristal, lo cual implica un aumento de la componente random del haz, haciéndose presente a estas profundidades el fenómeno de descanalización (efecto que se discutirá más adelante).

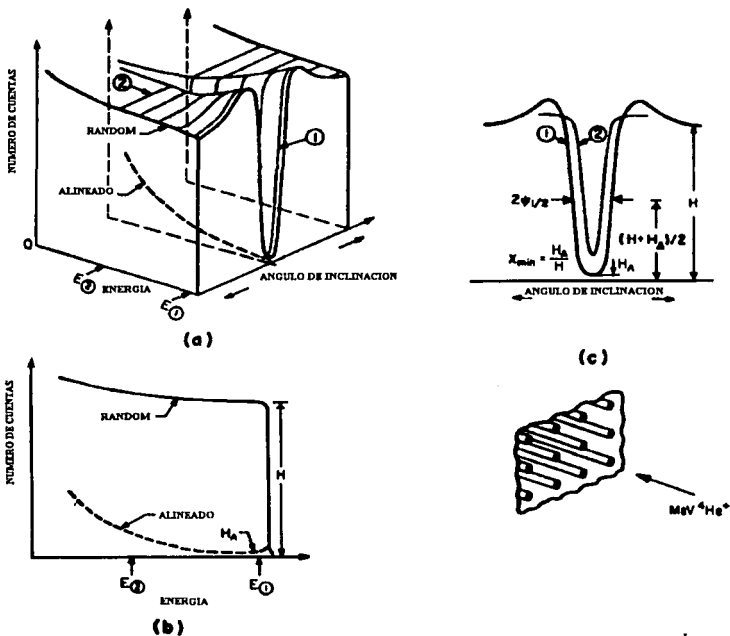


Fig. 3.4 Mediciones de canalización de iones incidentes ${}^4\text{He}$ con un megaelectronvolt de energía sobre un cristal a lo largo de la dirección axial de un eje cristalográfico principal: (a) Representación esquemática del espectro de retrodispersión como una función del ángulo de inclinación, (b) espectro random y alineado, y (c) perfiles angulares del número de cuentas medidos en regiones y profundidades cercanas a la superficie.

Otro parámetro que puede ser medido directamente del perfil angular del número de retrodispersión, es el semiángulo de canalización $\psi_{1/2}$. El semiángulo de canalización $\psi_{1/2}$ se define como la semianchura angular descrita por los valores angulares correspondientes al valor $1/2(H+H_0)$. En la fig. 3.4-c, se consideran los perfiles angulares del número de retrodispersión correspondientes a las energías $E_{(1)}$ y $E_{(2)}$,

HEBIS CON
FALLA DE ORIGEN

(cercanas al borde random), mediante los cuales es posible comprobar la dependencia del semiángulo $\psi_{1/2}$ con H_A . Siendo necesario especificar la energía a la cual se ha conformado el perfil angular, comúnmente se determina para energías que corresponden a regiones cercanas a la superficie, ver las figs. 3.4-b y 3.4-c. Para la incidencia de iones ^4He con un megaelectrón volt de energía a lo largo de las direcciones cristalográficas, los valores del semiángulo axial están en el intervalo $[0.4^\circ, 1.2^\circ]$. En la fig. 3.4-c, se observa que conforme la orientación del cristal es inclinada hacia el alineamiento axial, el número retrodispersión aumenta a un valor máximo y después decrece a su valor mínimo. El valor máximo del perfil angular del número retrodispersión (en cualquiera de las "jorobas") se produce cuando el haz está orientado a un ángulo ligeramente mayor que el requerido para "conducir" o canalizar las partículas incidentes en la muestra. Esto significa, que en tal orientación el cristal exhibe al haz una densidad máxima (en una disposición random) que incrementa la posibilidad de las partículas incidentes a sufrir colisiones de ángulo amplio con los átomos de la red.

El valor del semiángulo axial puede ser calculado directamente por el procedimiento de Barret por Monte Carlo [11] o estimarse en una forma más precisa por medio del modelo continuo de Lindhard [10]. Este último, se fundamenta en un concepto básico que consiste en considerar que el ángulo de incidencia de una partícula energética con una fila axial de átomos no puede exceder un cierto ángulo crítico, pues de lo contrario, la partícula no podrá ser conducida a través de una serie de colisiones correlacionadas, sino que "ve" a la red de átomos como centros individuales de dispersión. Por esta razón, Lindhard introduce el ángulo característico ψ_1 , dirección de la partícula incidente (con energía E) bajo la cual se considera que la partícula canalizada interactúa con un potencial promedio de Lindhard y cuya distancia de acercamiento con el centro de una fila de átomos (con espaciamento " d " a lo largo de la dirección axial) es aproximadamente la distancia " a " de apantallamiento de Thomas-Fermi, ecuación (3.7) [10]. Cuya expresión para ψ_1 esta dada como:

$$\psi_1 = \left(2Z_1 Z_2 e^2 / Ed \right)^{1/2} = 0.307 \left(\frac{Z_1 Z_2}{Ed} \right)^{1/2} \text{ grados} \quad (3.1)$$

donde E es la energía de la partícula incidente en megaelectronvolts, d es el espaciamento atómico a lo largo de la dirección axial dado en angstroms, mientras que Z_1 y Z_2 son los números atómicos del proyectil y átomos que componen el blanco respectivamente.

Para las diferentes direcciones axiales de una muestra cristalina monoatómica, las filas de átomos tienen un particular ángulo crítico $\psi_{\frac{1}{2}}$ de canalización. Donde el ángulo crítico $\psi_{\frac{1}{2}}$ para la canalización está relacionado al ángulo característico ψ_1 por:

$$\psi_{\frac{1}{2}} = \alpha \psi_1 \quad (3.2)$$

donde los valores de α están generalmente entre [0.8, 1.2], dependiendo de la amplitud variacional de la red de átomos. En trabajos experimentales, el ángulo crítico $\psi_{\frac{1}{2}}$ es también referido como semiángulo axial o la semi-anchura $\psi_{\frac{1}{2}}$.

Una de las consideraciones dentro de los cálculos (por computadora) de Barret [barret], consiste en estimar el potencial interatómico promedio $V_{RS}(\rho)$ con el que interacciona un ion que se mueve a una distancia ρ en una trayectoria con ángulo ψ_0 con respecto a una fila atómica. Conforme aumenta el valor ψ_0 la distancia de aproximación decrece, pero no más de un cierto valor ψ_c (o ψ_1) al cual le corresponde una distancia crítica ρ_c de aproximación con las filas de átomos para mantener una trayectoria estable de canalización, esto es:

$$E\psi_c^2 = V_{RS}(\rho_c) \quad (3.3)$$

En el tratamiento de Barret [11], el semiángulo $\psi_{\frac{1}{2}}$ está dado en radianes por:

$$\psi_{\frac{1}{2}} = 0.80 \left[\frac{V_{RS}(1.2u_1)}{E} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.4)$$

donde la distancia mínima ρ_c o de mayor aproximación para la trayectoria de una partícula canalizada es tomada como $1.2u_1$ y u_1 es la amplitud térmica rms unidimensional. El factor 0.80 es la razón del

semiángulo $\psi_{1/2}$ con el ángulo ψ_c . La expresión del semiángulo que nos da su valor en grados tiene la siguiente forma:

$$\psi_{1/2} = 0.80 F_{RS}(\xi) \psi_1 \quad (3.5)$$

en la gráfica de la fig. 3.5 [11], se muestran los valores de F_{RS} contra ξ , mientras la distancia normalizada ξ de mayor aproximación está dada como:

$$\xi = \frac{1.2u_1}{a} \quad (3.6)$$

donde "a" es el radio de apantallamiento de Thomas-Fermi, y que tiene la siguiente expresión:

$$a = 0.8853 a_0 \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{-2/3} \quad (3.7)$$

para el radio de Bohr $a_0 = 0.528 \text{ \AA}$. Por lo tanto:

$$a = 0.4685 \text{ \AA} / \left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{2/3} \approx \frac{0.47}{Z_2^{1/2}} \text{ \AA} \quad (3.8)$$

típicamente, los valores de "a" se encuentran en el intervalo [0.1, 0.2] \text{ \AA}.

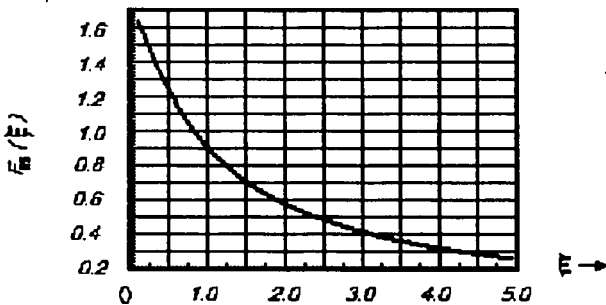


Fig. 3.5 Los valores de F_{RS} como función de ξ , distancia normalizada de mayor aproximación.

El valor rms de la amplitud de vibración térmica unidimensional u_1 , es calculada en la teoría de Debye de vibraciones térmicas como [6, 10]:

$$u_1 = 12.1 \left[\left(\frac{\phi(x)}{x} + \frac{1}{4} \right) / M_2 \theta_D \right]^{1/2} \text{ \AA} \quad (3.9)$$

donde M_2 es el peso en unidades de masa atómica, θ_D es la temperatura Debye (en Kelvin), $x = \frac{\theta_D}{T}$, T es la temperatura del cristal (en Kelvin), y $\phi(x)$ es la función de Debye $x^{-1} \int_0^x t(e^t - 1)^{-1} dt$ la cual es tabulada por Appleton y Foti [12]. Los valores de u_1 generalmente están en el intervalo [0.05, 0.1] \AA.

El valor del mínimo número retrodispersión (χ_{\min}) está determinado por el número de partículas dispersadas a ángulos mayores que $\psi_{1/2}$ por los átomos más externos de las filas atómicas. Lindhard [10] ha estimado el valor del mínimo número retrodispersión como:

$$\chi_{\min} = Nd\pi(2u_1^2 + a^2) \quad (3.10)$$

donde N es el número de átomos por unidad de volumen. Un valor más preciso, obtenido por medio de cálculos por computadora (Barret [11]) nos da su valor correspondiente en términos de la energía:

$$\chi_{\min} = 18.8Nd u_1^2 (1 + \zeta^{-2})^{1/2} \quad (3.11)$$

donde ζ es expresada como:

$$\zeta \approx \frac{126u_1}{\psi_{1/2}d} \quad (3.12)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

y $\psi/2$ es expresado en grados. En la fig. 3.6 se muestra la dependencia de χ_{\min} con la energía de incidencia E_0 , para protones sobre tungsteno obtenida por Barret. Conforme la energía de la partícula se incrementa el mínimo del número retrodispersión decrece. Pues el valor medido de χ_{\min} depende de la preparación de la superficie de la muestra (la variación de χ_{\min} con la energía para una amplia variedad de cristales no ha sido sistemáticamente estudiada).

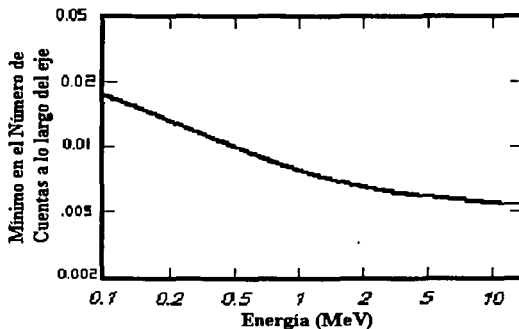


Fig. 3.6 Valor calculado del mínimo del número de cuentas, de acuerdo con la ec. (3.11) para protones en W a una temperatura $T=298$ K.

Si las mediciones de canalización fueran realizadas sobre un cristal perfecto a la temperatura de 0 K, el espectro deberá exhibir un pico a energías que corresponden a la dispersión debida a los átomos que se encuentran en la superficie, como se muestra en la fig. 3.7. Los átomos más externos de la muestra son visibles al haz, por lo que el área del pico es equivalente a Nd átomos/cm² (densidad superficial debida a los átomos más externos de las filas atómicas). Por lo regular en un cristal perfecto a una temperatura mayor a los 0 K, el pico superficial no es solamente el producto de la dispersión de los átomos más externos. Las vibraciones térmicas de los átomos de la red también contribuyen a la dispersión de partículas y en consecuencia al número de retrodispersión, esta contribución puede ser tan grande como la debida a la dispersión por los átomos más externos de la superficie de la muestra.

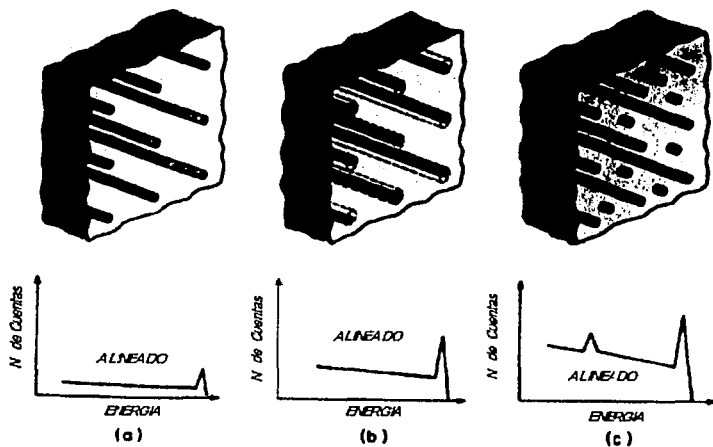


Fig. 3.7 El espectro alineado muestra los picos superficiales para (a) cristales perfectos a 0 K, (b) una temperatura elevada, y (c) con una delgada capa de óxido a 0 K. En (b), cuando se presenta en la red la vibración térmica, el pico superficial es producto de la dispersión de los átomos más externos así como de la contribución de los átomos más cercanos y subyacentes. Los cilindros representan la fila de átomos subyacentes "protegidos" por los átomos de la superficie para retrodispersar los componentes del haz incidente. Los cilindros punteados muestran la amplitud promedio de la vibración térmica individual de los átomos en las filas.

3.4 Descanalización.

Para el estudio de la canalización de un haz de partículas, generalmente se hace la aproximación de dos haces que consiste en considerar que el haz tiene dos componentes: la primera de ellas está alineada en la dirección del eje o del plano y continúa así. La segunda componente no está alineada y por lo tanto interactúa con el cristal de manera normal. La componente del haz alineado puede interactuar con los átomos del cristal tanto por eventos de retrodispersión como por dispersiones de ángulos ligeramente mayores al ángulo crítico de canalización, en cuyo caso pasan a formar parte de la segunda componente. A este efecto se le llama descanalización (ver fig. 3.8). El fenómeno de descanalización se puede deber tanto a la interacción de las partículas incidentes con los átomos de la red y sus desplazamientos térmicos, así como su interacción con defectos de la red. Un tratamiento adecuado del fenómeno de la descanalización es muy complejo [10] y por ello se hacen una serie de aproximaciones como son: (1) El ángulo crítico $\psi_{\frac{1}{2}}$

es invariable ante la introducción de desorden en la muestra; (2) El flujo de partículas canalizadas está distribuido uniformemente en los canales; (3) Todos los átomos desplazados tienen la misma probabilidad de interactuar con las partículas canalizadas; (4) Las partículas descanalizadas no son dispersadas nuevamente a los canales. (5) las vibraciones de la red son independientes de los defectos, etc.

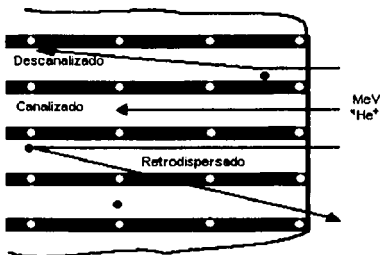


Fig. 3.8 Representación esquemática de la interacción de las partículas que componen el haz con los átomos desplazados tanto por eventos de retrodispersión como por colisiones de ángulo de dispersión superior al ángulo crítico (descanalización).

Un ejemplo útil del efecto de la descanalización consiste en la divergencia angular del haz por la interposición de una película delgada en la trayectoria de un haz bien colimado. La fig. 3.9 muestra el perfil angular del haz después de que atraviesa la película. Para películas de unos pocos miles de angstroms de grosor, la mayoría de las partículas sufre alguna deflexión en su trayectoria, pero esencialmente se mueven a lo largo de trayectorias cercanamente alineadas con su dirección inicial.

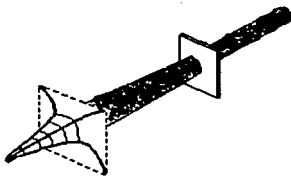


Fig. 3.9 Divergencia angular introducida a un haz colimado por la interposición de una película delgada.

Puesto que el fenómeno de canalización está caracterizado por los ángulos críticos $\psi_{1/2}$, es posible determinar (para una región la sección cercana a la superficie) el valor que χ_{\min} asume cuando se cubre la superficie del monocristal con una película, por lo que será necesario calcular la sección de cruce $\sigma_D(\psi_{1/2})$ para los átomos de la película que deflexionan las partículas a lo largo de trayectorias con ángulos mayores o iguales que el ángulo crítico de canalización. Como primera aproximación se considera una película tan delgada que en promedio las partículas incidentes sufren una colisión de dispersión con los átomos de la película (aproximación unidispersional). Usando la sección diferencial de cruce de dispersión de Rutherford $d\sigma/d\Omega$ e integrando desde $\psi_{1/2}$:

$$\sigma_D(\psi_{1/2}) = \int_{\psi_{1/2}}^{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (3.13)$$

se obtiene:

$$\sigma_D(\psi_{1/2}) = \pi Z_1^2 Z_2^2 e^4 / E^2 \psi_{1/2}^2 \quad (3.14)$$

esta expresión puede relacionarse al ángulo característico de Lindhard ψ_1 como:

$$\sigma_D(\psi_{1/2}) = \frac{1}{4} \pi \left(\frac{\psi_1^4}{\psi_{1/2}^2} \right) d^2 \quad (3.15)$$

siempre y cuando los elementos que componen el cristal y la película sean del mismo tipo.

Puesto que $\psi_{1/2} = 0.8 F_{RS} \psi_1$, la expresión de la ecuación (3.14) puede ser reescrita como:

$$\sigma_D(\psi_{1/2}) = 3.53 \times 10^{-21} \left(\frac{Z_1 Z_2 d}{E F_{RS}^2} \right) \text{cm}^2 \quad (3.16)$$

donde el valor de espaciamiento atómico d a lo largo de la dirección axial está dada en \AA y la energía de incidencia E en MeV.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Una vez determinada $\sigma_D(\psi_{1/2})$, es posible determinar la probabilidad $P(\psi_{1/2})$ de que la partícula incidente sea dispersada por medio de una colisión simple a ángulos mayores que $\psi_{1/2}$ cuando atraviesa una película con Nt átomos/cm², la cual está dada por:

$$P(\psi_{1/2}) = \sigma_D(\psi_{1/2}) Nt \quad (3.17)$$

donde $P(\psi_{1/2})$ es el valor de χ_{\min} para el monocristal-alineado con una película delgada depositada en la superficie.

El considerar películas con un grosor de varios miles de Å sobre un cristal, implica múltiples eventos de dispersión de los iones incidentes al penetrar la muestra. Para este caso, de acuerdo con el método aproximado de Meyer [13], se determinan los valores del grosor reducido de la película "m" y del ángulo crítico reducido $\bar{\theta}_c$. El valor del grosor reducido de la película está dado por:

$$m = \pi a^2 Nt \quad (3.18)$$

donde "a" es el radio de apantallamiento de Thomas-Fermi y Nt es el número de átomos por centímetro cuadrado en la película. Físicamente, "m" es el valor medio del número de colisiones de las partículas con los átomos de una película delgada con una sección de cruce de πa^2 . Si $m < 0.2$, entonces es válida la aproximación de dispersión simple o unidimensional.

En este método se usan los ángulos reducidos $\bar{\theta}$ para el ángulo θ de incidencia de las partículas, estos ángulos se relacionan de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\bar{\theta} = Y\theta \quad (3.19)$$

con valores de θ en grados o radianes. Donde:

$$Y = aE / (2Z_1 Z_2 e^2) \quad (3.20)$$

por lo que el ángulo crítico reducido $\bar{\theta}_c$ equivalente para dispersiones mayores que $\psi_{1/2}$ está dado por:

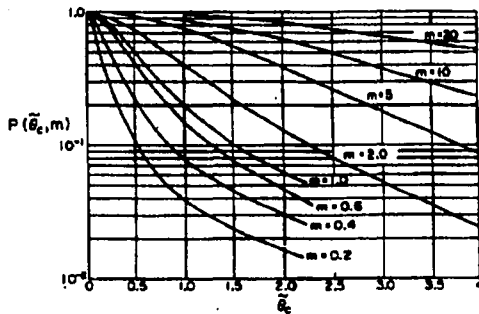
$$\bar{\theta}_c = Y\psi_{1/2} = 1.49 \times 10^2 F_{rs} a (E/Z_1 Z_2 d)^{1/2} \quad (3.21)$$

donde a y d están en Å y E en MeV.

Para determinar el número de partículas dispersadas por encima del valor $\psi_{1/2}$, se usan los datos de Meyer [13] que se muestran en la fig. 3.10. Para un valor determinado de $\bar{\theta}_c$ y m del grosor de la película, el mínimo número de retrodispersión χ está dado por:

$$\chi = P(\bar{\theta}_c, m) \quad (3.22)$$

siendo aceptable esta aproximación para películas con $0.2 < m < 20$.



TESIS CON FALLA DE ORIGEN

Fig. 3.10 La fracción $P(\bar{\theta}_c, m)$ de partículas dispersadas fuera del ángulo crítico reducido $\bar{\theta}_c$ de canalización contra $\bar{\theta}_c$ para diversos valores del grosor reducido de la película, m .

3.5 Concentración de Desorden en un Cristal.

Uno de los usos más comunes de las mediciones basadas en el efecto de canalización es la determinación del número de átomos desplazados de sus sitios en la red cristalina. Se utilizará el término genérico "desorden" para incluir a todos los átomos desplazados así como defectos puntuales en la

muestra, dislocaciones por lazos, amontonamiento de fallas, etc.. Supondremos inicialmente que el desorden se debe a una cantidad dada de átomos desplazados al azar, dando lugar a la creación de zonas de tipo amorfo dentro de un cristal perfecto.

En la fig. 3.11-a se muestra esquemáticamente un cristal que contiene desorden cerca de la región superficial, mientras que en 3.11-b se muestran los espectros axialmente alineados y random. El espectro alineado del cristal sin desorden, frecuentemente es referido como el espectro virgen o perfecto. Se observa que el espectro alineado para el cristal desordenado se encuentra por encima del espectro virgen en profundidades por debajo de la región desordenada. El número de retrodispersión a profundidades por debajo de la región desordenada se incrementa, debido a que algunos iones canalizados han sido descanalizados como resultado de la dispersión de las partículas conforme pasan a través de regiones con desorden. Estas partículas descanalizadas pueden posteriormente interactuar y ser dispersadas por cualquier átomo del cristal en capas subsiguientes.

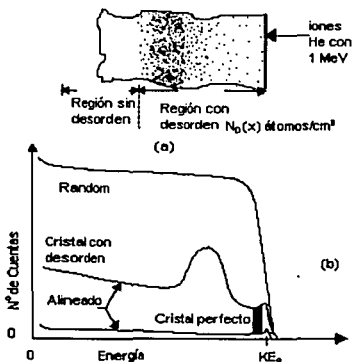


Fig. 3.11 (a) Esquema y (b) Espectros random y alineado para iones incidentes ^4He con 1MeV sobre un cristal que contiene desorden. También se muestra el espectro alineado para un cristal perfecto sin desorden. La diferencia entre los espectros correspondientes al cristal perfecto y desordenado (porción sombreada) puede ser usada para determinar la concentración $N_D(0)$ de los átomos desplazados en la superficie.

Al suponer que la cantidad de iones descanalizados es directamente proporcional al número de átomos desplazados, la contribución a la descanalización para el haz alineado en la región superficial es

mínima. En consecuencia, la concentración de átomos desplazados en la superficie $N_D(0)$ es la diferencia entre los espectros virgen y alineado, esto es:

$$N_D(0) = N \frac{[\chi(0) - \chi_V(0)]}{[1 - \chi_V(0)]} \quad (3.23)$$

donde N es la densidad de volumen (átomos por centímetro cúbico) y χ es el número de retrodispersión normalizado a una energía E donde el desorden es evaluado. Mientras el número de retrodispersión χ_V para el cristal virgen tiene un valor de $\chi_V(0)$ en la superficie. De la ecuación anterior, note que $1 - \chi_V(0)$ es la fracción de iones canalizados del haz incidente..

Para determinar la fracción descanalizada $\chi_R(x)$ como función de la profundidad en un cristal dañado con una distribución de desorden $N_D(x)$, se considera (de acuerdo con Eisen [14]) que el número de retrodispersión normalizado está dado por:

$$\chi(x) = \chi_R(x) + [1 - \chi_R(x)] \left[\frac{N_D(x)}{N} \right] \quad (3.24)$$

donde $\chi_R(x)$ es la fracción de partículas descanalizadas. La fracción descanalizada es usualmente aproximada por (Eisen [14]):

$$\chi_R(x) = \chi_V(x) + [1 - \chi_V(x)] P(x, \bar{\theta}_c) \quad (3.25)$$

donde $P(x, \bar{\theta}_c)$ es la probabilidad de que las partículas canalizadas sean descanalizadas por defectos entre la superficie y la profundidad x . Donde esta última ecuación supone que la descanalización debida al desorden se adiciona linealmente a la descanalización presente en el cristal en ausencia de desorden. El valor de $P(x, \bar{\theta}_c)$ puede encontrarse por la ec.(3.22). Si la cantidad de desorden es pequeño y puesto que $P(x, \bar{\theta}_c)$ es directamente proporcional al número de átomos desplazados que las partículas del haz "ven pasar" en su trayecto, entonces $P(x, \bar{\theta}_c)$ concuerda con el valor de $P(x, \psi_{1/2})$ de la ec.(3.17).

Utilizando las ecuaciones anteriores de manera iterativa, es posible obtener el daño a cualquier profundidad dentro del cristal, como se mostrará mas ampliamente en el capítulo V.

TESIS CON
FALTA DE ORIGEN

CAPITULO IV

DISPOSITIVO EXPERIMENTAL.

4.1 Preparación de la Muestra.

La muestra por analizar es un monocristal de cobre (oblea de 2 mm de grosor) fabricado por ESPI. (California). Esta empresa entrega el monocristal pulido a espejo, condición no óptima que impide su estudio por canalización de iones, ya que durante proceso de pulido se introducen deformaciones en la superficie. Por esta razón, para tener disponible la estructura del monocristal de cobre fue necesaria la preparación de la muestra empezando por el lijado de la superficie, posteriormente se realiza el pulido mecánico con alúmina, y finalmente el electropulido (ataque químico) de la superficie. Todo este proceso estuvo bajo observación de microscopio óptico, electrónico de barrido (SEM) y de fuerza atómica (AFM). A continuación se enumeran los pasos que se siguieron en el proceso de preparación de la muestra:

1.-LIJADO. El lijado de la superficie del monocristal (con dirección axial $\langle 110 \rangle$) se realiza con una lija del # 600.

2.-LIMPIEZA. Este proceso se lleva a cabo depositando la muestra en un vaso de precipitado (100 ml) con 40 ml de alcohol etílico absoluto, que a su vez es colocado en una máquina de ultrasonido por un espacio de 15-20 minutos, con el fin de retirar las sustancias indeseables depositadas en la superficie de la muestra.

3.-PULIDO MECANICO. A continuación, la superficie es pulida mecánicamente con alúmina de $1\mu\text{m}$ hasta la eliminación del rayado dejado por la lija, este proceso tiene un tiempo de duración de 10-14 horas. En este paso es importante aclarar que aún cuando se elimina parte del daño de la muestra por el lijado, no elimina las deformaciones en la superficie. Por último, la muestra se limpia consecutivamente en 3 ocasiones como se especificó en el paso # 2, en cada una se sugiere el cambio de alcohol (virgen).

4.-ELECTROPULIDO. El proceso de electropulido tiene como principio básico el proceso químico de electrólisis, en el cual utilizamos como electrolito la solución agua destilada (175 ml)-ácido fosfórico (825

ml), bajo las siguientes condiciones medidas por la electropulidora (BUEHLER-ELECTRÓMET® 4, Polisher/Etcher, modelo 70-1830-115), fig. 4.1:

temperatura del electrolito (temperatura ambiente 30 C), pump speed 60%, corriente 0.1 amperes. Una vez establecidas estas condiciones, la muestra es electropulida de acuerdo a la siguiente sucesión de tiempos y voltajes: tiempo de 10 minutos para un voltaje de 3 volts, posteriormente un tiempo de 10 minutos con un voltaje de 2 volts y por último un tiempo de 20 minutos con un voltaje de 3 volts.

Una vez terminado el electropulido el proceso de limpieza de la muestra se realiza en 4 ocasiones. Es importante hacer notar que en este último paso son eliminadas de la muestra (monocristal de cobre) tanto las deformaciones como el daño en su estructura debido a los procesos de LIJADO y PULIDO MECANICO.

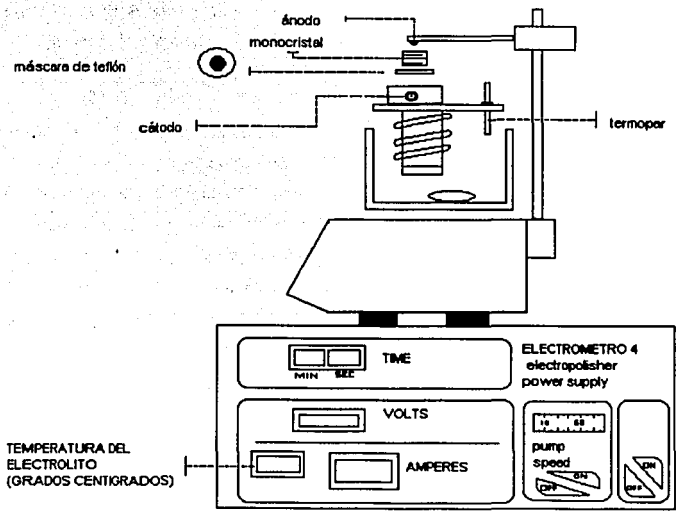


Fig. 4.1 Electropulidora BUEHLER - ELECTRÓMET® 4, Polisher/ Etcher MODELO 70-1830-115.

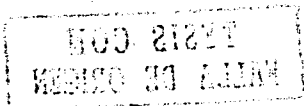
TESIS CON FALLA DE ORIGEN

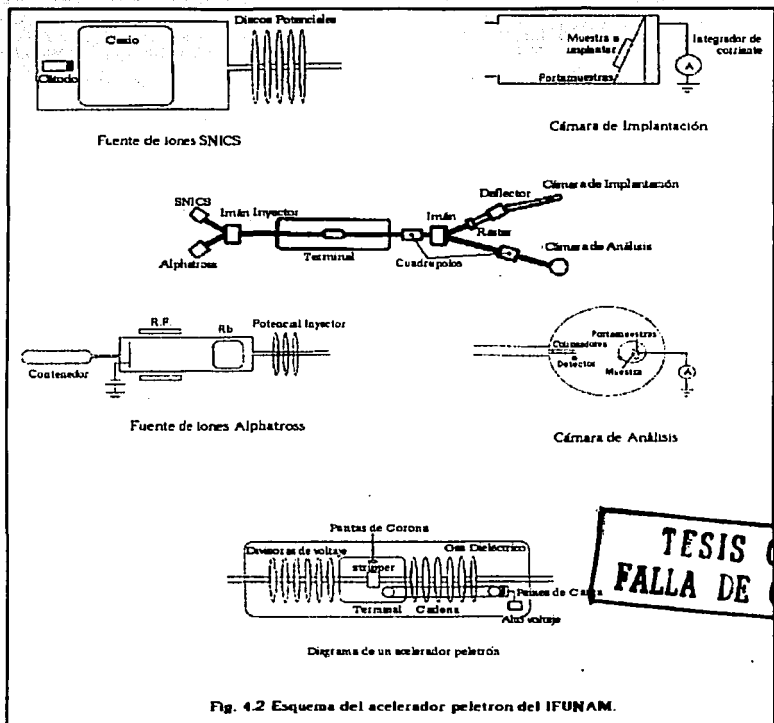
4.2 Acelerador Peleton.

Para análisis RBS e implantación de iones en la muestra, se utilizó el acelerador tipo Tandem del Instituto de Física de la UNAM nombrado peleton (modelo 9SDH-2 National Electrostatic Corporation) [15], fig. 4.2. Este acelerador, en su etapa inicial, cuenta con dos fuentes de iones negativos (SNICS y ALPHATROSS) así como de dos líneas de trabajo (línea de implantación y línea de análisis) donde se utilizan diversos tipos de haces compuestos de iones (producidos por el acelerador) que pueden alcanzar varios MeV de energía.

FUENTE DE IONES ALPHATROSS.- Esta fuente es usada en la obtención de iones de helio, para lo cual se carga el contenedor con gas He, el gas de He se hace pasar por una cámara R.F. (Radio Frecuencia) donde se ioniza por la pérdida de electrones. Los iones He^+ se extraen por medio de un potencial y pasan a una siguiente cámara con una atmósfera de Rubidio a alta temperatura, puesto que en este proceso los iones adquieren los electrones que cede el Rb éstos se transforman en iones He^+ . Los iones He^+ son extraídos por medio de discos potenciales y dirigidos a un imán inyector, para posteriormente deflectarse a la terminal con potencial V donde empezarán a ser acelerados.

FUENTE DE IONES SNICS (Secondary Negative Ions by Cesium Sputtering)- Esta fuente es útil en la obtención de iones pesados de elementos sólidos tales como C, Si, Cu, Ag, Au, etc... El elemento seleccionado se coloca en un tubo al que se le aplica un potencial, asumiendo de esta forma el papel de cátodo. El elemento es inmerso en una atmósfera de vapor de cesio, que al estar en contacto con el cesio y por la influencia del potencial el cátodo se erosiona, los átomos desprendidos del cátodo intercambian carga con el vapor de Cesio transformándose así en iones negativos que son repelidos por el mismo cátodo. Estos iones se extraen por discos potenciales y dirigidos a un imán inyector que selecciona el tipo de ion que posteriormente será acelerado.





TESIS CON FALLA DE ORIGEN

TANQUE.- Los iones negativos seleccionados son atraídos por el potencial de la terminal adquiriendo una energía eV , donde V es el potencial en la terminal y e es la carga del electrón. La terminal adquiere en forma simultánea un potencial V una vez que la terminal de Alto Voltaje es cargada por medio de dos cadenas con eslabones alternados de plástico y metal. En el centro del tanque se localiza un convertidor (stripper) de iones negativos en positivos por su interacción con los átomos de gas nitrógeno a baja presión, produciéndose iones con diversos estados de carga (lo cual depende del tipo de átomos que conformarán el haz, energía inicial, densidad del gas nitrógeno, etc...). Ahora, estos nuevos iones son empujados por el potencial de la terminal, donde adicionan una energía nV (n es el número de electrones perdidos en el convertidor). Por lo que en la vecindad de la terminal tienen una energía neta $E = (n+1) eV$.

Por último, son acelerados por una serie de anillos equipotenciales con una diferencia de potencial creciente entre ellos, hasta llegar al cuadrupolo que se encarga de enfocar el haz de iones. Una vez enfocado el haz, éste es desviado por un imán deflector que además de elegir la línea de implantación selecciona la masa y carga del ión por implantar.

LINEA DE IMPLANTACIÓN.- Esta línea es utilizada en el depósito de iones en los materiales. Una vez enfocado el haz, éste es desviado por un imán deflector que además de elegir la línea de implantación selecciona la masa y carga del ión por implantar. El haz de iones resultante se hace pasar por el campo eléctrico entre un par de placas para cambiar su dirección y eliminar los componentes neutros. Posteriormente el haz pasa por dos pares de placas (raster), dos verticales y dos horizontales que producen un campo eléctrico variable para realizar un barrido superficial sobre la muestra y obtener una implantación homogénea a temperatura ambiente. La muestra a implantar se coloca dentro de la cámara (la cual se encuentra al final de la línea, con un vacío de 1×10^{-6} mbar) sobre un portamuestras con un ángulo de inclinación de 8° con respecto a la normal, con el fin de evitar posibles efectos de canalización en una muestra cristalina que provocaría una implantación inhomogénea. El portamuestras está conectado a un integrador de corriente que mide la carga acumulada o la afluencia de iones implantados.

LINEA Y CÁMARA DE ANÁLISIS.- Esta línea se utiliza en la caracterización de materiales por medio de técnicas nucleares como RBS (Espectrometría por Retrodispersión de Rutherford), PIXE (Emisión de Rayos-X inducidos por Partículas) y NRA (análisis por reacciones nucleares). El haz de iones en esta línea se encuentra con un par de rejillas con una separación de 2mm empezando así la primera etapa de colimación. En medio de las rejillas se encuentra un imán cuadrupolar paralelo a la dirección del haz, que en este caso no se activa para enfocar el haz ya que de hacerlo lo haría nuevamente diverger. Al final de la línea se encuentra la cámara de análisis (con un vacío de 1×10^{-7} torrs) que cuenta con un par de colimadores que dan al haz un diámetro determinado (aproximadamente 1mm), además de un detector con un ángulo sólido de 3.549 msr localizado a un ángulo de 170° con respecto a la dirección de incidencia del haz. El integrador de corriente está conectado al portamuestras que está sujeto al goniómetro cuyas características se describen a continuación.

GONIOMETRO.- El goniómetro es el elemento del dispositivo experimental que permite cambiar la orientación de la muestra con respecto al haz, fig. 4.3. Este consta de un portamuestras que está sujeto a

una superficie móvil accionada mediante un sistema mecánico, por medio del cual es posible rotar (variantes θ y φ) y trasladar (variantes X, Y y Z) la superficie. A continuación se describen las características de las variantes con los que cuenta el goniómetro para su cambio de orientación, y en consecuencia de la muestra:

- a) Angulo θ . Rotación alrededor de un eje perpendicular a la dirección del haz, y paralelo al eje Z . $\theta \in [-90^\circ, 90^\circ]$.
- b) Angulo φ . Rotación alrededor de un eje que es paralelo a la dirección del haz. $\varphi \in [0^\circ, 180^\circ]$.
- c) Desplazamiento horizontal y perpendicular a la dirección del haz. $X \in [-8mm, 8mm]$.
- d) Desplazamiento vertical y perpendicular a la dirección del haz. $Z \in [-25mm, 25mm]$.
- e) Desplazamiento a lo largo de la dirección del haz. $Y \in [-8mm, 8mm]$.

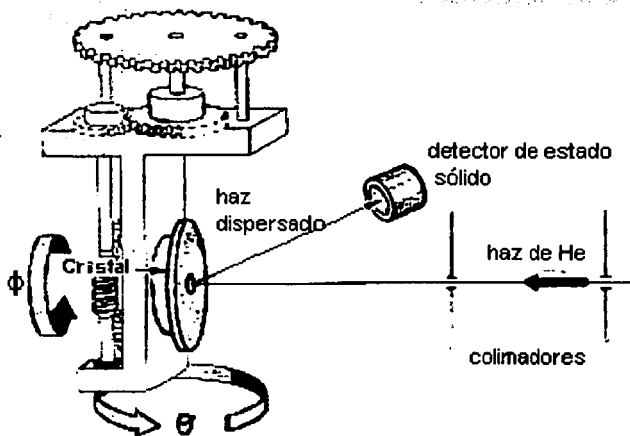


Fig. 4.3 Goniómetro.

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

La adquisición de datos se hizo de manera semiautomática, ya que tanto el goniómetro como el multicanal y el integrador de corriente pueden ser controlados por una computadora. De esta manera, utilizando un programa de cómputo desarrollado anteriormente [16] se establecen los intervalos y tamaño de los incrementos con que va a ser barrida la muestra a lo largo del eje seleccionado. El programa se detiene automáticamente cuando el valor de la integración de corriente alcanza un valor predeterminado para cada incremento, el goniómetro se mueve a lo largo del eje en el incremento seleccionado y se inicia nuevamente la adquisición de datos, Fig. 4.4.

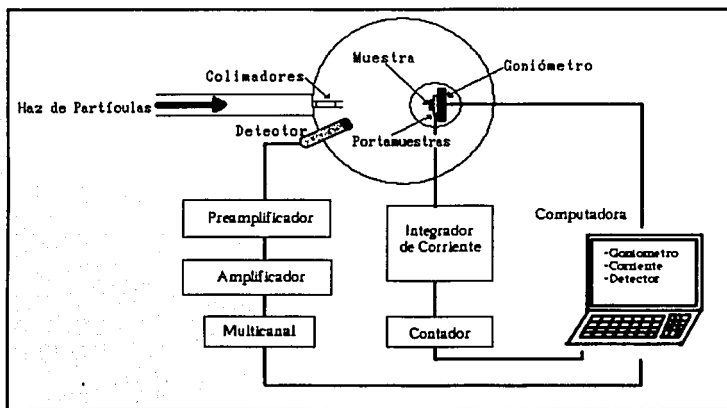


Fig. 4.4 Esquema de la comunicación entre la computadora y los elementos de la cámara de análisis: goniómetro, integrador de corriente y detector.

CAPITULO V

RESULTADOS Y ANÁLISIS.

5.1 Alineación del Monocristal de Cobre.

El proceso de alineamiento del monocristal se realizó en múltiples ocasiones dentro de las sesiones de peletón, para la caracterización de la muestra antes de la introducción de daño por la irradiación de iones de Au y Cu. Para alinear el eje del monocristal de cobre con la dirección de incidencia del haz analizador, se realizaron dos barridos en el ángulo φ a un ángulo θ fijo, donde θ es el ángulo de giro alrededor del eje vertical. El primer barrido en φ se realizó en un intervalo de $[10^\circ, 170^\circ]$ para un ángulo $\theta = 6^\circ$, obteniéndose el perfil angular del número normalizado de partículas retrodispersadas que se muestra en la fig. 5.1.

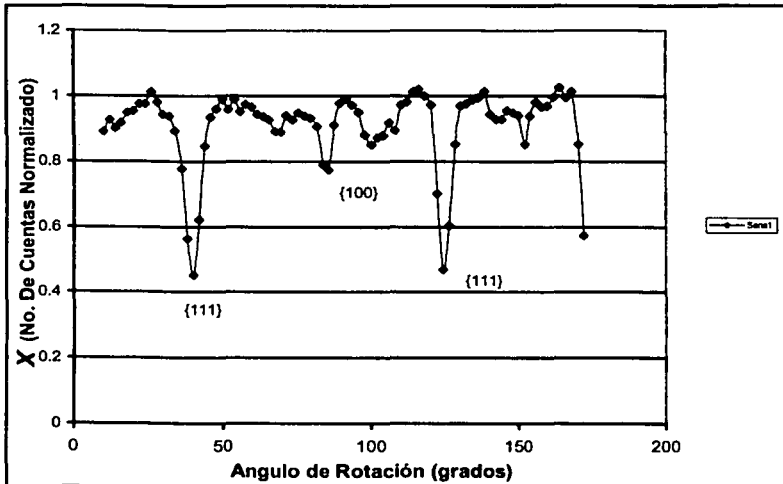


Fig. 5.1 Barrido en $\varphi \in [10^\circ, 170^\circ]$ para un ángulo $\theta = 6^\circ$.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

El segundo barrido se realizó bajo las mismas condiciones que el anterior, excepto que este barrido se llevó a cabo a un ángulo $\theta = 4^\circ$, obteniéndose en forma análoga el perfil angular del número normalizado de partículas retrodispersadas que se muestra en la fig. 5.2.

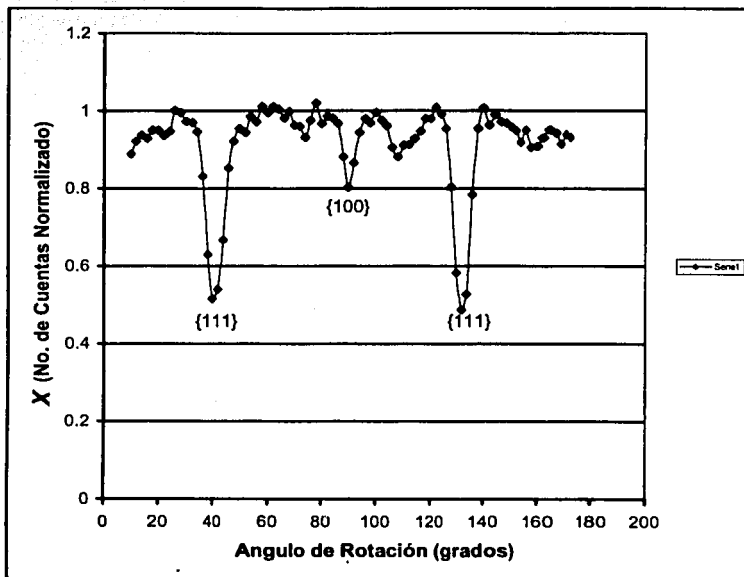


Fig. 5.2 Barrido en $\varphi \in [10^\circ, 170^\circ]$ para un ángulo $\theta = 4^\circ$.

En las figuras 5.1 y 5.2 se observan los mínimos correspondientes a las familias de planos $\{111\}$, $\{100\}$ y $\{111\}$. Donde la magnitud y secuencia de los mínimos corresponde a la realización de un barrido en la proximidad del eje $\langle 110 \rangle$ de un cristal con estructura fcc $[10]$.

Una vez establecidas y graficadas (en papel polar) las coordenadas (θ, φ) de cada uno de los mínimos, por medio de una línea recta se unieron los mínimos correspondientes a cada tipo de conjunto de planos. Como el punto de intersección de estas líneas nos determina la orientación a la que debe dirigirse el

goniómetro para que el eje del monocristal coincida con la dirección del haz, se determinó (por medio de la gráfica de la fig. 5.3) que el punto de intersección de estas líneas es ($\zeta = 1.6^\circ, \varphi = 218^\circ$). De acuerdo con el dispositivo experimental, este par de coordenadas son geoméricamente equivalentes a las coordenadas ($\zeta = -1.6^\circ, \varphi = 38^\circ$).

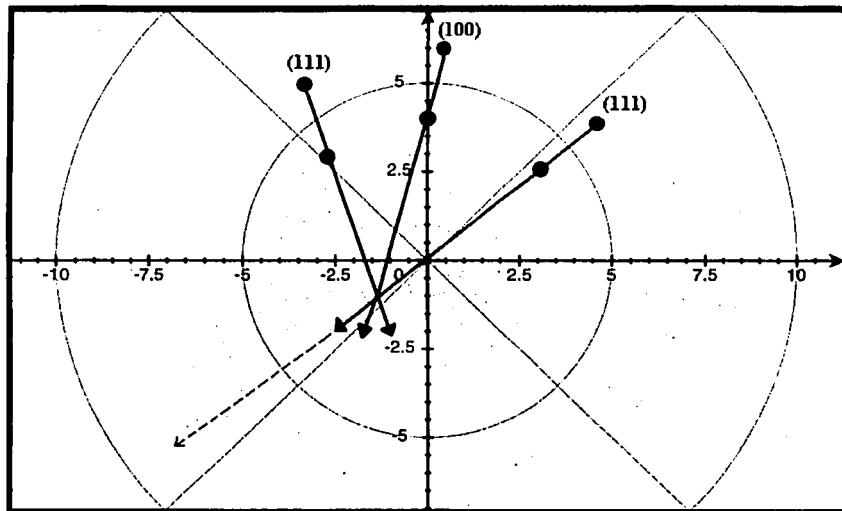


Fig. 5.3 Gráfico de los mínimos planares en papel polar.

Posteriormente, con el fin de determinar con mayor precisión la orientación del eje se hicieron algunos barridos adicionales mas finos, encontrando que la dirección del eje del monocristal tenia la dirección $\zeta = -2.2^\circ$ y $\varphi = 35^\circ$, como puede observarse en la fig. 5.4.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

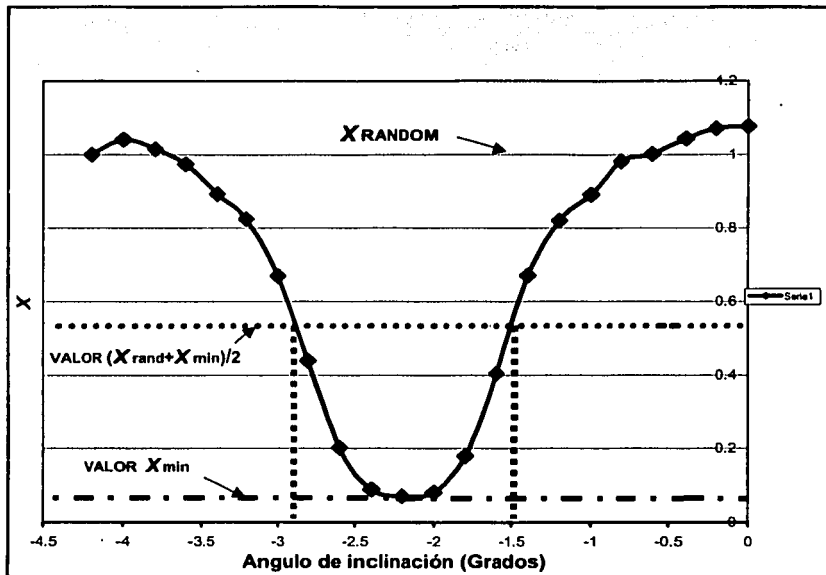


Fig. 5.4 Barrido en $\theta \in [-4.2^\circ, 0^\circ]$ para $\varphi = 35^\circ$.

5.2 Determinación de los Valores de $\psi_{1/2}$ y χ_{\min} .

El valor de $\psi_{1/2}$ se obtuvo a partir del barrido en θ (con $\varphi = 35^\circ$) en un intervalo $\theta \in [-4^\circ, 0^\circ]$, que se muestra en la fig. 5.4, del que se obtuvo el valor:

$$\psi_{1/2} = (0.70 \pm 0.06) \text{ grados} \quad (5.1)$$

Para determinar el valor de χ_{\min} se consideraron los espectros random y virgen que se muestran en la fig. 5.5.

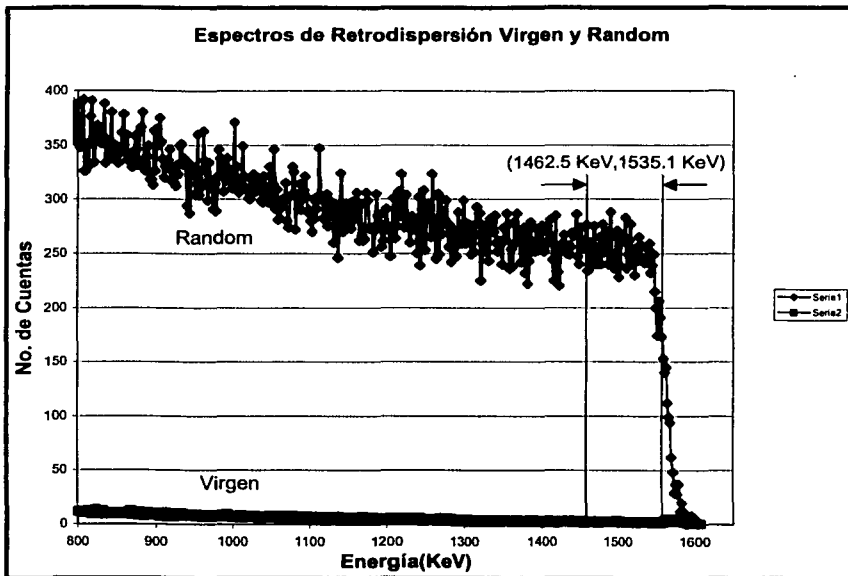


Fig. 5.5 Espectros random y virgen.

Considerando las integrales en una región cercana a la superficie de los espectros random y virgen en el intervalo de energía [1462.5 KeV, 1535.1 KeV] que corresponde al intervalo de profundidad [240 Å, 862 Å], se obtiene el valor experimental de χ_{\min} :

$$\chi_{\min} = 0.025 \pm 0.002 \quad (5.2)$$

Utilizando las relaciones expresadas en el capítulo III, ecs. (3.1), (3.6), (3.7), (3.9), (3.12), (3.5) y (3.11); y considerando los valores de la tabla 5.1. Se obtiene:

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

$$\psi_{\frac{1}{2}} = 0.75 \text{ grados} \quad (5.3)$$

$$\chi_{\min} = 0.029 \quad (5.4)$$

Tabla 51. Valores tomados para los cálculos teóricos.

	valor	Nombre del parámetro
a_0	0.528 Å	radio de Bohr
Z_1	2	número atómico de los átomos que componen el haz, He ⁺
Z_2	29	número atómico de los átomos que componen el blanco, Cu
M_2	63.54 uma	masa atómica de los componentes del blanco
$d_{(110)}$	2.56 Å	distancia interplanar de los planos {110}
T	293 K	Temperatura
θ_D	315 K	Temperatura de Debye del cobre
X	1.075	θ_D/T
E	2 MeV	Energía de incidencia del haz
a	0.131 Å	radio de apantallamiento de Thomas-Fermi
ψ_1	1.034 grados	ángulo crítico de canalización
$\phi(x)$	0.763	aproximación de la función de Debye
u_1	0.084 Å	amplitud térmica rms unidimensional
ξ	0.770	distancia normalizada de mayor aproximación

Comparando los valores teóricos y experimentales de $\psi_{\frac{1}{2}}$ y χ_{\min} se observa que los valores experimentales son ligeramente menores. Tal diferencia se puede atribuir a que las ecuaciones (3.5) y (3.10), del modelo teórico de Lindhard y otros, involucran diversas aproximaciones [10]. No obstante, los datos experimentales coinciden razonablemente bien, pues mientras el valor de teórico de $\psi_{\frac{1}{2}}$ está dentro del intervalo de incertidumbre del valor experimental, la diferencia entre los valores teórico y experimental de χ_{\min} es del 7 % aproximadamente. Lo que significa, que los siguientes factores no son significativos:

- a) La utilización de un monocristal que no es un cristal perfecto, por lo que es de esperar que algunos átomos que lo componen estén fuera de su sitio en la red, daño intrínseco de la muestra.
- b) La presencia de óxido e impurezas en la superficie, así como por los esfuerzos sobre su estructura durante el lijado de su superficie.
- c) La introducción de daño en la muestra por el haz analizador.
- d) El perfil angular del número de átomos retrodispersados se tomó en un amplio intervalo de energía. De acuerdo con la ec. (3.4), el valor de $\psi_{1/2}$ depende de la energía a la cual se toma el perfil angular.

Es importante remarcar que el factor descrito en el inciso d) afecta el valor de χ_{\min} , no así el de $\psi_{1/2}$. Por lo anterior, es razonable considerar que el valor de $\psi_{1/2}$ para el monocristal es invariable a profundidades de varios miles de angstroms en la dirección axial $\langle 110 \rangle$.

5.3 Resultados de la irradiación con Iones de Cu.

El proceso de irradiación con iones sobre el monocristal "virgen" se realizó en una dirección random, una vez inducido el daño en el monocristal al ser expuesto a una afluencia dada de iones de Cu se obtuvo su correspondiente espectro alineado. Las afluencias usadas sobre el monocristal fueron de 5×10^{14} , 9×10^{14} , 4×10^{15} y 10^{16} Cu/cm². En la fig. 5.6, se muestran los espectros alineados correspondientes a cada afluencia, incluyendo los espectros virgen y random como referencia.

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

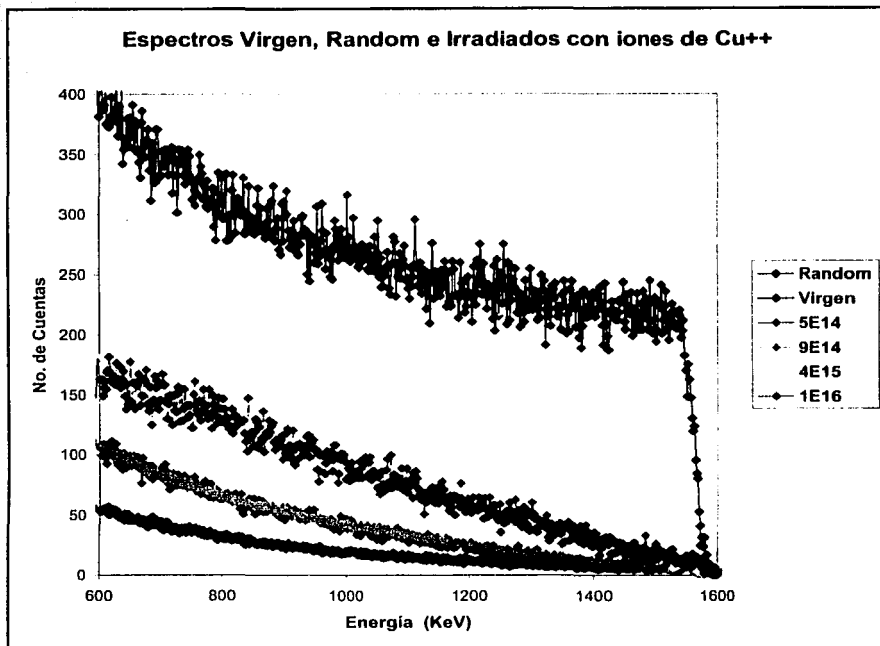


Fig. 5.6 Espectros alineados que corresponden a diferentes fluencias de iones a las que fue expuesto el monocristal.

De acuerdo con los espectros alineados de la fig. 5.6 se observa que para fluencias en el intervalo $[5 \times 10^{14}, 9 \times 10^{14}]$ Cu/cm^2 la muestra presenta aumento en el daño, aumentando aún más para fluencias en el intervalo $[4 \times 10^{15}, 10^{16}]$ Cu/cm^2 . Para estos intervalos de fluencias, el daño en la muestra permanece constante al considerar diferentes fluencias dentro de un mismo intervalo.

Utilizando el método iterativo mencionado en el capítulo III se obtuvieron los correspondientes perfiles de concentración de daño, para ilustrar el procedimiento se da el siguiente ejemplo: en la fig. 5.7 se muestran los espectros random, y los alineados virgen y con daño por una fluencia de 10^{16} Cu/cm^2 ; para

los cuales se consideran rebanadas de la muestra con un grosor de 400 Å a lo largo de la dirección axial $\langle 110 \rangle$ del monocristal, a partir de la superficie y justo atrás del pico de superficie. De acuerdo con la ec.(3.23), para la primer rebanada ($i=0$) se calcula $N_D(0)$ y de ahí, se calcula la probabilidad de descanalización $P(\chi_D)$ que a su vez se sustituye en la ec.(3.25) para obtener el valor de $\chi_R(1)$, por último, sustituyendo $\chi_R(1)$ en la ec.(3.24) se determina el valor de $N_D(x_1)$. Así sucesivamente, se repite este proceso iterativo hasta conformar la función de concentración de daño.

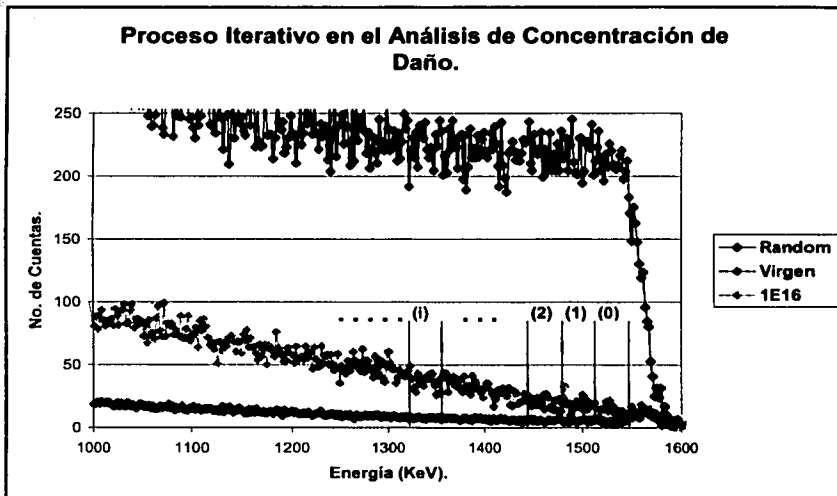


Fig. 5.7 En el proceso iterativo se consideraron rebanadas de la muestra con un grosor de 400 Å .

Como se mencionó anteriormente, existen varias maneras de calcular la probabilidad de descanalización $P(\chi)$ por la presencia de desorden en la muestra. En este trabajo, se utilizó la ecuación (3.22) de la fig. 3.10 que corresponde a la descanalización por colisiones múltiples. Sin embargo, se observó que los resultados no varían más del 2 % si se utiliza la ecuación (3.17) que corresponde a la

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

aproximación de colisión simple. La iteración se llevó a cabo mediante el uso de un programa de cómputo [17].

De la fig. 5.8, donde se muestran los perfiles de concentración de daño en función de la profundidad en el monocristal por la implantación de iones de Cu, se observa que así como cada perfil de concentración de daño presenta un máximo a una profundidad determinada, a partir de una profundidad específica la concentración de daño se hace cero. Para una afluencia de 5×10^{14} Cu/cm² se tiene un máximo de daño del 4.9 ± 0.7 % a una profundidad media de 5050 Å, y a profundidades mayores de 11800 Å el daño es cero; para la afluencia de 9×10^{14} Cu/cm² el daño máximo es del 4.9 ± 1 % a una profundidad media de 3650 Å, y a profundidades mayores de 11800 Å el daño es cero; a una afluencia de 4×10^{15} Cu/cm², el daño máximo es del 13.7 ± 0.9 % a una profundidad media de 5250 Å y a profundidades superiores de 9400 Å el daño es cero; y para una afluencia de 10^{16} Cu/cm², el daño máximo es del 14.9 ± 1.7 % a una profundidad media de 5400 Å, mientras que a profundidades mayores a 9400 Å el daño es cero.

Para tratar de entender los perfiles de concentración de daño de la fig. 5.8, se utilizó el programa de simulación por dinámica molecular MDRANGE [18] para calcular el alcance y la energía depositada. En la fig. 5.9 se muestran los perfiles de los parámetros (alcance, S_e y S_n) como función de la profundidad para iones Cu con una energía de incidencia de 2 MeV, observándose que el alcance es de 6000 Å y para profundidades mayores a 12000 Å el número de iones alojados es casi nulo. Además, mientras que la máxima energía depositada de tipo electrónico es de 160 eV/Å a una profundidad de 300 Å, la máxima energía depositada por interacción nuclear es de 120 eV/Å a una profundidad de 4800 Å. Por último, ambos tipos de energía depositada se hacen cero a una profundidad aproximada de 9000 Å.

De la figura 5.8, donde se muestran los perfiles de concentración de daño, se puede observar que el daño producido cerca de la superficie es pequeño. Además de que el daño inducido en el monocristal tiene un máximo que coincide con el máximo de la energía depositada de los iones por interacción nuclear (fig. 5.9), cuyo valor correspondiente de daño máximo es casi 4 veces mayor que el daño máximo inducido en la superficie. Deduciendo de lo anterior que en el máximo de daño se alcanza un equilibrio entre los procesos de desorden que induce la irradiación, la recrystalización y la temperatura de la muestra. Por último, los perfiles de concentración de daño sugieren la reconstrucción total de la estructura en el intervalo de profundidad [9400, 11800] Å, cuando la muestra es irradiada con las afluencias 4×10^{15} y 1×10^{16} Cu/cm². De la figura 5.9, se observa un alto depósito electrónico de energía en la superficie, lo que

produce el aumento de la temperatura en esa región, dando lugar a una posible recristalización adicional que elimina parcialmente el daño producido por los iones.

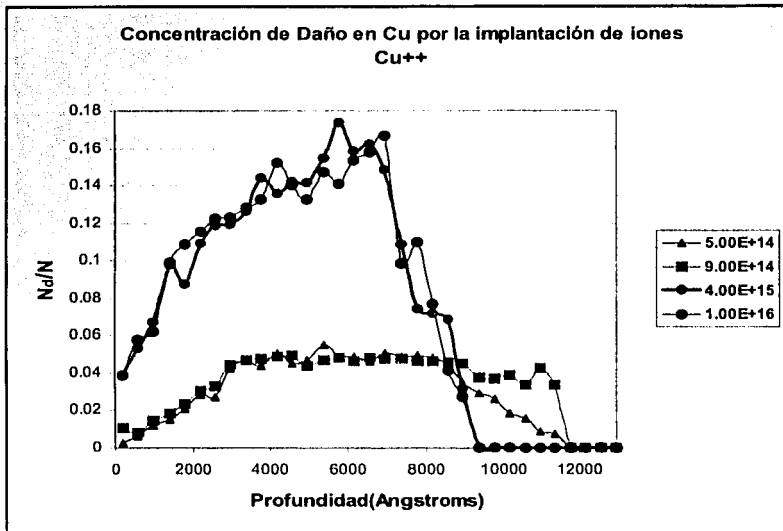


Fig. 5.8 Perfiles de concentración de daño, para una fluencia determinada, en función de la profundidad.

ESTA TESIS NO SALIR
DE LA BIBLIOTECA

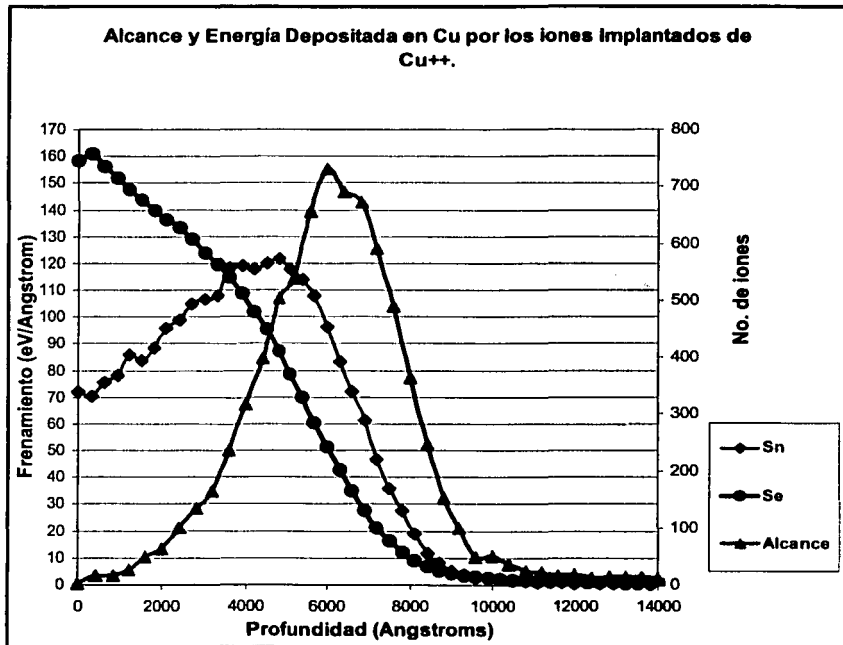


Fig. 5.9 Perfiles del alcance, y de la energía electrónica y nuclear depositada en el monocristal por los iones irradiados de Cu con una energía de incidencia de 2 MeV.

5.4 Resultados de la Irradiación con Iones de Au.

El proceso de irradiación de iones de Au sobre el monocristal "virgen" fue realizado en la dirección random, una vez expuesto el monocristal a una fluencia dada de iones se obtuvo el espectro alineado correspondiente. Las fluencias usadas sobre el monocristal fueron de 1×10^{14} Au/cm² y 5×10^{14} Au/cm². En la fig. 5.10 se muestran los espectros alineados correspondientes a cada fluencia, incluyendo los espectros virgen y random como referencia.

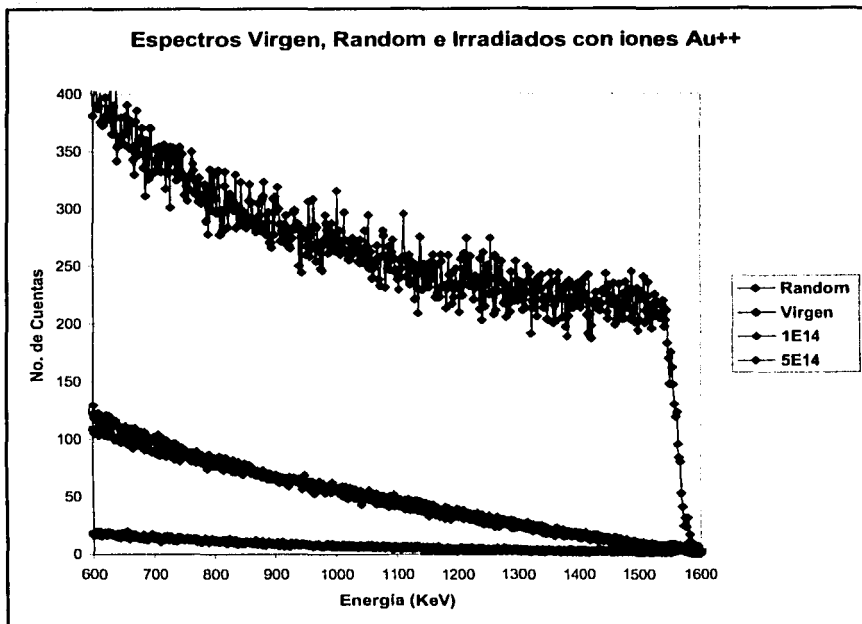


Fig. 5.10 Espectros alineados que corresponden a las diferentes afluencias a las que fue expuesto el monocristal.

De acuerdo con la fig. 5.10, se observa que el daño en el monocristal aumenta y permanece constante para afluencias dentro del intervalo [1×10^{14} , 5×10^{14}] Au/cm². De la misma manera que el caso anterior, se utilizó el mismo método iterativo para la conformación de los perfiles de concentración de daño del monocristal. Los perfiles correspondientes para cada afluencia se muestran en la fig. 5.11.

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

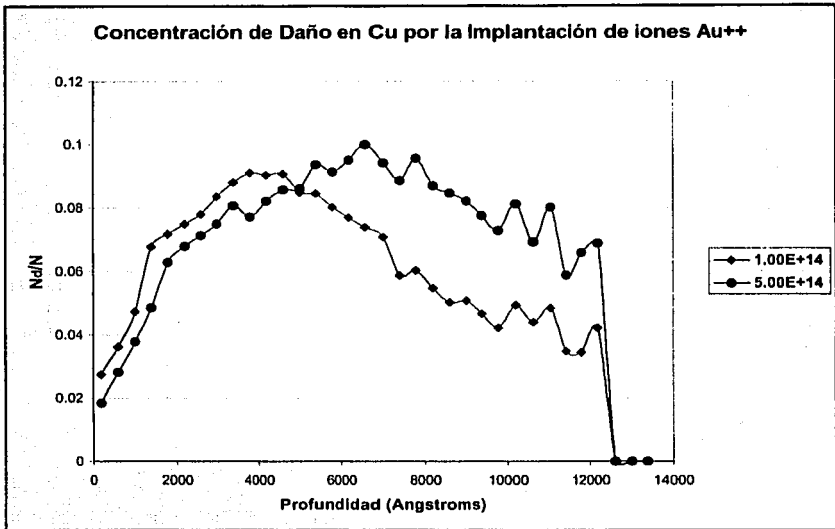


Fig. 5.11 Perfiles de concentración de daño, para una fluencia determinada, en función de la profundidad.

El perfil de concentración de daño para una fluencia de 10^{14} Au/cm² presenta un daño máximo del 7.9 ± 0.7 % para una profundidad media de 3750 Å, y que a profundidades mayores a 12600 Å el daño es cero; mientras que para una fluencia de 5×10^{14} Au/cm² se observa un daño máximo del 8.6 ± 1.4 % a una profundidad media de 5580 Å, y a profundidades mayores a 12600 Å el daño es cero. Note que en este caso el daño máximo correspondiente al máximo de los perfiles de concentración de daño es menor que en el caso de iones de Cu.

En la fig. 5.12 se muestran los perfiles de los parámetros (alcance, S_e y S_n) obtenidos por el programa de simulación MDRANGE [18], considerando iones de Au con una energía de incidencia de 2.5 MeV sobre el monocristal, el alcance resultó ser de 2200 Å; con una máxima energía depositada por

interacción electrónica de 305 eV/Å a una profundidad de 200 Å y por interacción nuclear de 800 eV/Å a una profundidad de 1000 Å. Ambos tipos de energía depositada casi son nulos para profundidades mayores a 6000 Å.

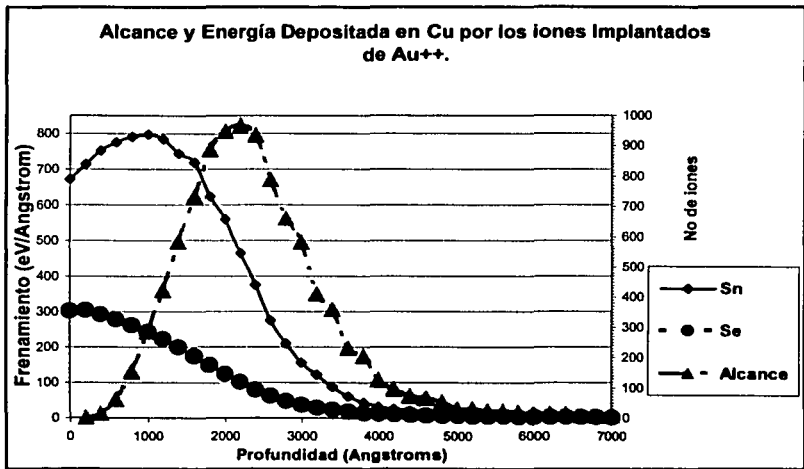


Fig. 5.12 Perfiles del alcance, y de la energía electrónica y nuclear depositada en el monocristal por los iones irradiados de Au con una energía de incidencia de 2.5 MeV.

Comparando los perfiles de concentración de daño por la irradiación de iones de Au y Cu, se puede decir que los perfiles de concentración de daño para las afluencias 1×10^{14} y 5×10^{14} Au/cm² corresponden a los perfiles por irradiación de iones de Cu a una afluencia dentro del intervalo $[9 \times 10^{14}, 4 \times 10^{15}]$ Cu/cm². Es decir, que el daño inducido en la muestra por iones de Au (con 2.5 MeV de energía) para una afluencia dada se puede alcanzar por la irradiación de iones de Cu (con 2 MeV de energía) pero con una afluencia mayor. En otras palabras, el daño inducido por los iones de Au es mayor que el inducido por iones de Cu a una misma afluencia, alcanzándose más rápidamente el perfil supremo de concentración de daño por la irradiación de iones de Au. Esto se entiende en términos de la densidad de energía depositada

(F_D), pues al depositar cada ion de oro mas energia, se necesitan menos iones de Au para producir el mismo daño.

Sin embargo, a diferencia del caso anterior, el máximo de los perfiles de concentración de daño resultó ser mucho mayor que el máximo de la energia depositada por interacción nuclear y que el alcance (fig. 5.12). Este hecho es difícil de explicar, y probablemente se deba un error de tipo experimental, como puede ser una alineación incorrecta o un haz divergente durante su análisis, o bien la formación de una capa gruesa de óxido o una canalización planar accidental durante la irradiación. Por lo que es deseable la repetición de estos experimentos para entender mejor lo que sucedió en este caso.

5.5 Discusión y conclusiones.

Como se mencionó anteriormente, la naturaleza de la irradiación es esencialmente azarosa, como claramente se manifiesta en los semiconductores [1] que al ser irradiados con iones se induce a los átomos que los componen a muchos desplazamientos, rompiendo los enlaces y produciendo finalmente la amorfización total de la zona irradiada. Por otra parte, el enlace metálico y el fenómeno de recristalización que tienen lugar en las estructuras metálicas evitan la existencia de fases amorfas metálicas a temperatura ambiente, e inclusive se ha observado que películas metálicas policristalinas se texturizan al ser irradiadas [2]. En estos casos es claro que después del paso del proyectil que induce un calentamiento local muy alto seguido de un enfriamiento que tiene lugar en unos cuantos nanosegundos, el metal tiene suficiente tiempo para acomodarse en forma de una estructura definida en parte por los alrededores. De aquí la pregunta de cuánto daño va introducir la irradiación y cómo afectará la estructura, cuyo caso extremo sería la formación de una película policristalina, orientada al azar.

Antes de discutir propiamente los resultados, debe tenerse presente que de acuerdo a la teoría de Cheng utilizando fractales [7], mediante la cual se modela el tipo de cascadas originadas en la muestra durante su proceso de irradiación, el desorden inducido en el monocristal por la irradiación de iones es debido tanto a la interacción por colisiones elásticas entre los iones irradiados con los átomos del monocristal (modelo balístico), como por la presencia de spikes térmicos (punzones térmicos) que inducen a los átomos en la red a desplazarse fuera de sus sitios. Según la teoría de fractales de Cheng la condición necesaria para la presencia de spikes térmicos es que la muestra posea un número atómico promedio $\bar{Z} > 20$. En el caso del monocristal esta condición se satisface ya que $Z_{Cu} = 29$.

De las figuras 5.6 y 5.10, donde se muestran los espectros que corresponden a diferentes afluencias por la irradiación de iones de Cu y Au sobre el monocristal de Cu, se puede afirmar que la muestra no presenta la formación de una película policristalina. Los espectros nos dicen que la dirección alineada sigue siendo la original (y no la de irradiación) y que el aumento en el número de iones retrodispersado es relativamente bajo, mucho menor de lo que se esperaría de una película policristalina (aún si estuviera texturizada). Es decir, el daño inducido en la muestra consiste en la formación de vacantes y átomos intersticiales en la red cristalina (formación de defectos Frenkel) por el desplazamiento de los átomos del monocristal a una distancia mayor que el radio mínimo para la formación de defectos Frenkel.

De las figuras 5.8 y 5.11, donde se muestran los perfiles de concentración de daño, se afirma que para el monocristal de Cu con dirección axial $\langle 110 \rangle$ el daño máximo inducido posible es de $(14.9 \pm 1.7)\%$ a una profundidad entre los valores del alcance y máximo del depósito de energía por interacción de los iones irradiados a una afluencia dada. Lo cual es debido al equilibrio entre los procesos de desorden inducidos por la irradiación, la recristalización y la temperatura de la muestra. Siendo posible que nuestro sistema alcance con una mayor prontitud dicho estado por la irradiación de iones de Au, que por la irradiación de iones de Cu. Donde el daño inducido predominante en el monocristal consiste en la formación de vacantes y átomos intersticiales en su estructura (defectos Frenkel), producidos tanto por colisiones elásticas entre los iones y los átomos del monocristal, como por el derretimiento en zonas locales del monocristal por la presencia de spikes térmicos.

Es importante señalar, que el problema del análisis de los espectros alineados no tiene una solución trivial, pues como se mencionó anteriormente existen muchas aproximaciones, en el cálculo de la probabilidad de descanalización, además de que se parte de la suposición de que el haz está formado por dos componentes independientes. En la consideración de "daño" tampoco se ha hecho un análisis riguroso y el concepto genérico puede no ser adecuado. Uno de los aspectos que tampoco se ha tomado en cuenta es la influencia del frenamiento electrónico en la canalización. Se sabe por una parte que éste es aproximadamente de 10 a 50 % menor en los canales $\{10\}$ y por otra parte se sabe que las colisiones con los electrones a profundidades mayores sí son importantes para la descanalización. Aunque la técnica de canalización es utilizada desde hace mucho tiempo, no hay muchos trabajos publicados en daño a profundidades mayores.

Por todo lo anterior, podemos decir que el método de RBS-Channelling es un buen método tanto para determinar la calidad de un cristal como para la obtención de sus correspondientes perfiles de concentración de daño, aunque la utilización del método requiere de cuidado, puesto que no hay muchos trabajos publicados para daño a profundidades de varios miles de angstroms, como en este trabajo. Un mejor método sería una simulación por Monte Carlo, [11, 19].

Por último, de acuerdo al análisis de resultados por la irradiación de iones de Au de la sección 5.4, es deseable realizar en un futuro la repetición del experimento con iones de Au a diferentes temperaturas, pues tanto el proceso de recristalización como el movimiento de defectos depende de la temperatura a la cual se llevó a cabo la irradiación de iones. Además de la simulación de su análisis por Monte Carlo.

REFERENCIAS.

- [1] J. C. Cheang Wong, A. Crespo Sosa, A. Oliver. RBS-channeling studies on damage production by MeV ion implantation in Si (111) wafers. *Materials Science and Engineering* **B84** (2001) 205-210.
- [2] A. Crespo -Sosa, P. Schaaf, W. Bolse, K. P. Lieb, M. Gimbel, U. Geyer and C. Tosello. Irradiation effects in Ag-Fe bilayers: Ion-beam mixing, recrystallization, and surface roughening. *Phys. Rev. B* **53** 14795, (1996).
- [3] Paul Ander y J. Anthony Sonnessa. *Principios de química (Introducción a los conceptos teóricos)*. LIMUSA (1984).
- [4] Charles Kittel. *Introduction to solid state Physics*. Wiley. USA (1986).
- [5] Jorge Rickards Campbell. *La física de las radiaciones en materia*. Dirección General de Divulgación de la Ciencia (2001).
- [6] W. K. Chu, J. M. Mayer y M. A. Nicolet. *Backscattering Spectrometry*. Academic Press, N.Y. (1978).
- [7] Y.T. Cheng, *Mater. Sci. Rep.* **5** (1990) 45.
- [8] Vicente Talanquer. *Fractus, Fracta, Fractal (fractales, de laberintos y espejos)*. Fondo de Cultura Económica (1996).
- [9] Manuel Orozco Muñoz. *Estudio de películas policristalinas de Ag y Cu crecidas sobre películas de Fe y sometidas al bombardeo de iones de Au y Cu: crecimiento del tamaño de grano y mezclado atómico*. Tesis profesional / UNAM (México 2002).
- [10] M. L. Swanson. *Handbook of Modern Ion Beam Materials Analysis*. Ed J. R. Tesmer y M. Nastasi. Materials Research Society. Pittsburg, USA (1995).
- [11] John H. Barret. Monte Carlo Channeling Calculations. *Physical Review* **B3** (1971) 1527-1546.

[12] B. R. Appleton y G. Foti. *Ion Beam Handbook for Material Analysis*. J. W. Mayer and E. Rimini, eds. Academic Press, New York (1977).

[13] Meyer L. *Phys. Status Solidi* 44, 253 (1971).

[14] Eisen, F. H. *Channeling* (D.V. Morgan, ed.), chapter 14. Wiley, New York (1973).

[15] *Manual del Acelerador Peletrón, Modelo 9SD4-2*, NEC, Middleton, Wisconsin, USA (1995).

[16] Ricardo Alcántara Moctezuma. *Canalización de iones de helio en el análisis de monocristales de silicio previamente irradiados con iones pesados utilizando el acelerador peletrón*. Tesis profesional / UNAM (México 1998).

[17] Comunicación personal. Alejandro Crespo Sosa. IFUNAM.

[18] K. Nordlund, *Molecular dynamics simulation of ion ranges in the 1-100 KeV energy range*, *Comput. Mater. Sci.* 3, 448 (1995). Ver también: http://www.acclab.helsinki.fi/~knordlun/mdh/mdh_program.html

[19] E. Albertazzi, M. Bianconi, G. Lulli, R. Nipoti, M. Cantiano. *Different methods for the determination of damage profiles in Si from RBS-channeling spectra: a comparison*. *Nucl. Instr. and Meth.* **B118** (1996) 128.