



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARACTERIZACIÓN POR MEDIO DE RBS DE LA DISTRIBUCIÓN DE IONES DE PLATA IMPLANTADOS EN SÍLICE A ENERGÍAS DE MEGAELECTRONVOLTS

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
F Í S I C A
P R E S E N T A

Araceli Aldana Vázquez

DIRECTOR DE TESIS:

DR. LUIS RODRÍGUEZ FERNÁNDEZ



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.

A mis padres, por su infinito amor y cuidados.

A mis hermanos por brindarme su confianza y ánimo
en todo momento.

A Manuel, por su bondad.

A mi asesor Luis, por su profunda dedicación a la Ciencia.

Agradecimientos

A la universidad Nacional Autónoma de México, por ser forjadora del conocimiento y darme la oportunidad de haber estudiado en sus aulas.

A mi director de tesis, el Dr. Luis Rodríguez Fernández por su gran apoyo, paciencia y amistad.

A mis sinodales, el Dr. José Chávez Carvayar, la Dra. Alejandra López Suárez, la M. en C. Mirna Villavicencio Torres y el Fis. Luis Flores Morales por haber leído este trabajo, así como haber contribuido con sus comentarios y sugerencias.

Al Sr. Karim López y al Sr. Francisco Javier Jaimes por su apoyo en la operación del acelerador Pelletron y su asistencia en el montaje de las muestras.

Al Físico Edilberto por su gran apoyo durante la realización de la presente Tesis, con sus comentarios y sugerencias.

Le agradezco profundamente a Manuel Muñoz Orozco por su apoyo en todo momento, paciencia y sabiduría.

A mis Hermanos, por darme ánimo y confianza en todo momento, en especial a mi hermano Ezequiel y Mery.

Al grupo N.O.D. por su alegría y dedicación, con quienes he vivido los momentos más felices.

A mis amigos, Karen Salomé, Mónica y Mike con quienes a lo largo de la carrera compartimos dulces momentos.

Agradezco principalmente a mis Padres por ser la pieza fundamental en mi desarrollo, quienes con su profundo amor y cuidados forjaron las bases de todo éxito.

ÍNDICE

Introducción.	i
Capítulo 1 Conceptos de la implantación de iones.	
1.1. Implantación.	1
1.2 Interacción de iones positivos con la materia	3
1.3 Poder de frenado.	5
1.3.1. Poder de frenamiento electrónico.	5
1.3.2. Poder de frenamiento nuclear	6
1.3.3. Poder de frenado total	6
1.3.4. Poder de frenado másico ε y atómico	7
1.4. Trayectoria y alcance para un proyectil	8
1.5. Defectos en un material	10
1.6. Daño producido por la radiación con iones	12
1.7. Programa TRIM	15
Capítulo 2 Espectroscopia RBS.	
2.1 Aspectos generales	18
2.2 Fundamentos de la retrodispersión de iones	19
2.3 Configuración experimental para RBS.	22
2.4 Espectro RBS para un blanco monoelemental	23

2.5 Espectro RBS de una película delgada	24
2.6 Resolución de espectros de RBS.	26
2.7 Medida del espesor de una película.	27
2.8 Espectro RBS de un elemento atómico implantado en un material.	28
2.9 Programa RUMP.	31
Capítulo 3 Desarrollo Experimental	
3.1 Acelerador de iones positivos Pelletron	33
3.2 Preparación de muestras.	35
3.3 Análisis por espectroscopía de retrodispersión de iones RBS	38
Capítulo 4 Resultados	41
Conclusiones.	55
Apéndice A	57

Introducción

La implantación de iones es un método utilizado para incorporar átomos en un material. Consiste en acelerar iones de un elemento atómico y hacerlos incidir sobre una matriz sólida [1]. Para esto se requiere de una fuente de iones que los produzca, posteriormente un sistema acelerador de partículas cargadas que les proporcione la energía cinética y finalmente un sistema que los dirija hacia el blanco donde van a ser implantados. Los aceleradores empleados son electrostáticos, que van desde los del tipo de placas paralelas que utilizan unos cuantos volts hasta los generadores de carga de varios millones de volts como los del tipo Van de Graaff.

La implantación es un procedimiento fuera del equilibrio termodinámico y por tanto difiere de la difusión térmica de átomos en un material. Esto ofrece algunas ventajas que no es posible con la difusión, como es el caso de obtener concentraciones de átomos más allá del límite de solubilidad permitido por la matriz [2].

En la industria microelectrónica la implantación de iones está ampliamente difundida y utilizan aceleradores con potenciales que van desde unos cientos hasta varios miles de volts. En los últimos quince años cada vez son más empleadas implantaciones del orden de megavolts para la producción de nuevos materiales.

Dentro de algunas ventajas que presenta la implantación a energías del orden de megavolts es que los átomos implantados quedan directamente en el interior de la muestra y protegidos del medio exterior. De esta manera los precipitados o estructuras que se formen en el interior de la matriz pueden ser más duraderos. Además, es un método muy limpio para introducir impurezas, pues por la “óptica de iones” y los imanes selectores utilizados para dirigir el haz hacia el blanco, solamente la especie atómica con la energía deseada es impulsada hacia la muestra que está siendo irradiada.

Un caso donde se está utilizando la implantación de iones a energías del orden de megavolts es en la formación de nanocúmulos de plata en matrices de vidrio [3]. Estos nanocúmulos tienen tamaños del orden de nanómetros y presentan propiedades que los hacen atractivos para aplicaciones en optoelectrónica como es el caso de compuertas ópticas y guías de onda activas [4,5]. Se utiliza el vidrio porque es un material que permite la transmisión de luz a través de su interior, y a su vez, se utiliza la implantación de iones

del orden de megavolts para producir los cúmulos de plata en una región cuyo espesor es lo suficientemente grande como para permitir la formación de las guías de onda sobre la zona donde están las partículas.

Para este tipo de aplicaciones es muy importante poder conocer con exactitud cómo es la forma de la distribución de los iones implantados en el interior del material. Existen programas de cómputo que simulan los efectos que se producen durante la implantación y que permiten poder predecir la forma de la distribución de los iones implantados. Estos programas son bastante precisos cuando la matriz que está siendo irradiada es de tipo conductora o semiconductor. Cuando la matriz es dieléctrica, como el vidrio, ocurren otros efectos debidos a la acumulación de carga eléctrica durante la irradiación que afectan al integrador de corriente con el que se mide la fluencia de iones sobre la muestra. Muchas cámaras de implantación cuentan con sistemas supresores de electrones secundarios generados en el blanco durante la irradiación para evitar pérdidas de carga. Sin embargo, a medida que es más aislante una muestra mayor será la probabilidad de que un electrón secundario abandone la cámara de implantación y por tanto un error más grande en la carga total acumulada. En estos casos la fluencia medida con el integrador de corriente será diferente de la fluencia real. Por este motivo, en las aplicaciones que se realicen utilizando matrices dieléctricas, como la mencionada en el párrafo anterior, es muy importante efectuar un estudio para caracterizar estos efectos.

El objetivo de este trabajo es hacer un estudio de la distribución de iones de plata implantados a 2 MeV sobre matrices de dióxido de silicio amorfo, sílice, de alta pureza utilizando la técnica de análisis de espectrometría de iones retrodispersados o más conocida como RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry). Las muestras analizadas fueron producidas en el Instituto de Física de la UNAM utilizando el sistema implantador del acelerador Pelletron.

Además, en este trabajo se compara la forma de la distribución experimental de átomos de plata implantados con la obtenida mediante la simulación teórica del programa de cómputo SRIM [6,7] que es el más empleado a nivel mundial para estos fines.

La presente tesis se divide en cuatro capítulos. En el primero se muestran algunos aspectos generales de la implantación de iones y los efectos que ocurren al irradiar un material sólido con iones. En el segundo capítulo se explica en qué consiste la técnica de retrodispersión de iones, RBS, y cómo se emplea para determinar distribuciones de

átomos implantados. En el tercero se indica todo lo referente al procedimiento experimental: los métodos y equipos empleados para preparar y analizar las muestras. Finalmente en el capítulo cuarto se muestran los resultados obtenidos y las conclusiones del trabajo.

Referencias

- [1] Michael Nastasi, James W. Mayer y James K. Hirvonen, "Ion-solid interactions: Fundamentals and applications", Cambridge University Press, New York, 1996.
- [2] Jorge Rickards, "La física de las radiaciones en materia", Dirección General de Divulgación de la Ciencia, UNAM, México, 2001.
- [3] J. Roiz, A. Oliver, E. Muñoz, L. Rodríguez-Fernández, J. M. Hernández, J. C. Cheang-Wong., Journal of Applied Physics, **95** (2004) 1783-1791.
- [4] A.L. Stepanov and R.I. Khaibullin, Reviews on Advanced Mater Science, **7** (2004) 108-125.
- [5] Reyes-Esqueda, J.A., Torres-Torres, C., Cheang-Wong, J.C., Crespo-Sosa, A., Rodríguez-Fernández, L., Noguez, C., Oliver, A., Optics Express **16** (2008) 710-717.
- [6] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, M.D. Ziegler, "SRIM: The stopping and range of ions in matter", Lulu Press Co., Morrisville, NC, 2008.
- [7] Página web <http://www.srim.org>

Capítulo 1

Conceptos de la implantación de iones

1.1 Implantación

La implantación de iones es una técnica nuclear utilizada para introducir átomos dentro de un material. Para esto, los iones son acelerados a energías que pueden ir del orden de keV hasta los MeV, y son implantados en una capa delgada de material cerca de la superficie o un poco más profunda. De esta manera, la implantación de iones previamente escogidos puede ser utilizada para modificar, en una forma altamente controlada, las propiedades mecánicas, químicas o eléctricas del material cerca de su superficie. Se puede concluir que la implantación de iones es un método simple para construir una superficie con propiedades particulares en regiones seleccionadas [1].

Cuando se lanzan los iones sobre un material éstos penetran en su interior y comienzan a perder velocidad debido al frenado que sufren por colisiones atómicas y electrónicas hasta quedar en reposo y ser depositados dentro del material. Durante su trayecto de frenado, el ion va produciendo daño y modificando las propiedades originales del material. Estos procesos son estocásticos, por lo que la profundidad que alcancen en el material será diferente para uno y otro. Esto al final produce una distribución estadística en donde a la profundidad promedio a la que llegan los iones se le conoce como alcance.

El equipo necesario para la implantación consiste en una fuente capaz de producir iones del elemento deseado, luego un sistema acelerador que les proporcione energía cinética y una cámara en la que se coloque la muestra donde se hacen incidir los iones. Los aceleradores comúnmente utilizados para la implantación son del tipo electrostático: placas paralelas, Van de Graaff, Pelletron, Tandem, etc.

El arreglo geométrico típico de un experimento de implantación de iones se observa en la figura 1.1. El haz es unidireccional, digamos que viaja en dirección z , y los proyectiles (iones) arriban aleatoriamente a la superficie del blanco (muestra) donde se distribuyen estadísticamente alrededor de su alcance promedio. Puesto que los iones tienen una

carga eléctrica, el haz de iones constituye una corriente eléctrica i , que en la práctica se mide en nanoamperes (nA) o en microampers (μA). Por ejemplo, $1 \mu\text{A}$ de proyectiles de carga $+e$ equivale a 6.242×10^{12} proyectiles/s. La corriente integrada en el tiempo t que dura el bombardeo, es la carga total depositada, que suele medirse en microcoulombs (μC). Por ejemplo, una carga total depositada de $1 \mu\text{C}$ producida por proyectiles de carga $+e$ corresponde a 6.242×10^{12} proyectiles [2]. En caso de proyectiles de carga $+2e$ corresponderá a 3.121×10^{12} proyectiles.

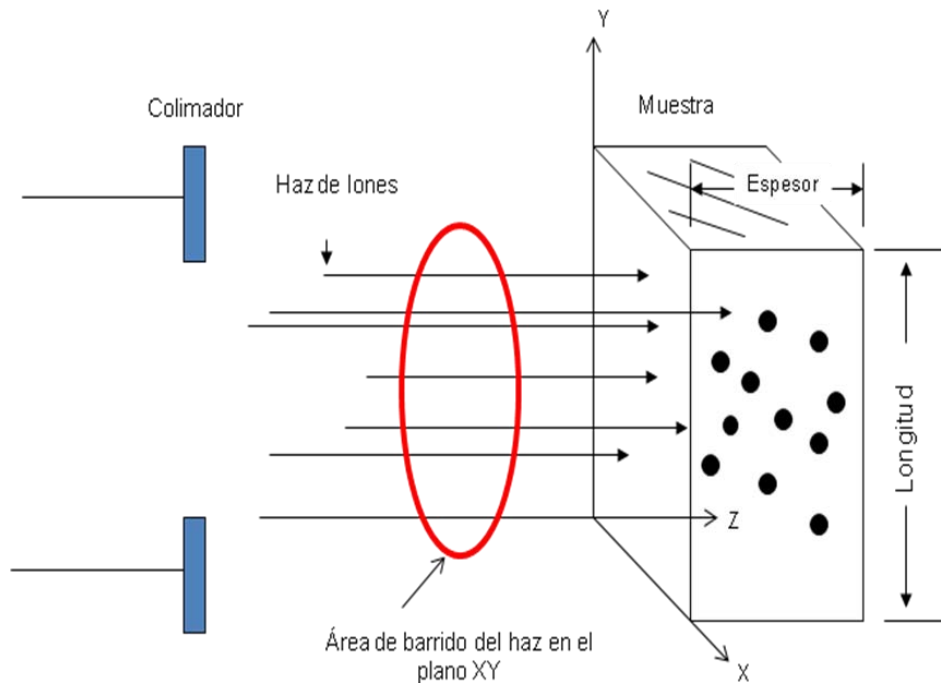


Figura 1.1 Geometría típica de un experimento de implantación de iones. El haz incide sobre la superficie de la muestra bombardeada.

Los implantadores de iones normalmente cuentan con un dispositivo que barre el haz de proyectiles en las direcciones x - y , es decir en una cierta área A de la muestra. La densidad de proyectiles implantados naturalmente dependerá del área seleccionada, que en la figura 1.1 se representa como un círculo en el plano x - y . Se llama fluencia Φ al número total de proyectiles por unidad de área que llega a la muestra en un experimento dado, resultando:

$$\Phi = \frac{it}{QA} \quad (1.1)$$

donde por sencillez se ha supuesto que i es constante durante todo el tiempo t que dura la irradiación y Q es la carga de cada proyectil. Si i está en Amperes, t en segundos, Q en Coulombs y A está en cm^2 , la fluencia Φ queda en proyectiles/ cm^2 o simplemente (cm^{-2}). Naturalmente, si se quiere una fluencia grande, se puede lograr: con una corriente alta, un tiempo largo, o en un área pequeña, o con combinaciones apropiadas de estos parámetros.

Cambiando la energía en el acelerador de partículas, se pueden cambiar las características del haz incidente y de esta forma modificar los cambios “topográficos” producidos por “sputtering” en una superficie. El “sputtering” es un proceso mediante el cual se erosionan las capas de un material mediante un bombardeo con iones pesados. Su principio físico es la transferencia de momento en colisiones binarias secuenciales, mediante un proceso rápido [3]. Modificando el ángulo de incidencia del haz de iones también se puede modificar la generación de daño durante la implantación y el alcance promedio de los proyectiles.

Debido a la diversidad de experimentos que se pueden realizar modificando las variables y condiciones expuestas de corriente, tiempo o área, se tiene que la técnica de implantación es muy versátil y posee un inmenso alcance de aplicaciones por imaginar.

1.2 Interacción de radiación de iones positivos con la materia

Llamemos iones positivos a los átomos que han perdido parte de sus electrones, por lo que poseen carga positiva, como por ejemplo los deuterones, partículas alfa (He^{++}), así como iones pesados (Ag^{++} , Au^{++} , Cu^{++}). Cuando estos penetran en la materia sólida, que en general serán arreglos de átomos provistos de electrones, van a interactuar con éstos últimos de varias maneras, la primera será con los electrones del material provocando ionización o excitaciones atómicas al material debido a que poseen mayor abundancia, en segundo lugar pueden interactuar con los núcleos, provocando un desplazamiento de su posición original y originando un cambio en la estructura del material [2].

A través de estos procesos, las radiaciones generalmente depositan casi la totalidad de su energía en las sustancias con las que chocan. Un alto porcentaje de esta energía acaba como calor, elevando la temperatura del material; sin embargo parte de la energía depositada también puede provocar reacciones químicas, cambios de estructura y otras consecuencias menos importantes. La transferencia de energía al material del blanco que la va absorber es altamente inhomogénea, formándose trazos, cuya forma y densidad depende de la radiación y de su energía inicial. Cuando la radiación incidente consta de iones o núcleos atómicos, éstos se introducen en el material como impurezas, dando lugar a cambios de estructura en el material y a la creación de nuevos materiales de composiciones exóticas. Así la implantación de iones es una técnica muy usada en la creación de nuevas aleaciones y de materiales no convencionales.

Consideremos un ion que incide sobre un material sólido, por lo mencionado anteriormente el ion va a sufrir un conjunto de interacciones siendo la primera de ellas el frenamiento electrónico debido a que como el ion penetra con cierta velocidad va a intercambiar electrones con el medio. Así por ejemplo, un ion de helio de alta velocidad pasa del estado He^{++} al He^+ y luego al He al irse frenando y recogiendo electrones. El intercambio de electrones es más factible cuando la velocidad del ion es del orden de la velocidad de los electrones en el material.

Sin embargo al ir avanzando el ion dentro del material sólido va a ir perdiendo energía cinética gradualmente, debido a la gran cantidad de interacciones con el enorme número de partículas que va encontrando, lo cual va a provocar el frenado gradual del proyectil, hasta ser detenido totalmente. El frenamiento se describe por dos tipos de procesos fundamentales: el frenado electrónico y el nuclear. Más adelante se definirán estos dos tipos de frenamiento.

1.3 Poder de frenado

El poder de frenado se define como la energía perdida por unidad de longitud recorrida:

$-\frac{dE_1}{dx}$, y tiene unidades de energía entre longitud, como por ejemplo [MeV/cm]. Esta

cantidad corresponde a un valor promedio de todos los eventos que ocurren adentro de la

muestra durante el frenado del ion que se deben tratar estadísticamente. Esto se debe a la interacción del ion con el gran número de partículas que va encontrando en su camino: electrones o núcleos atómicos. Esto hace que el frenado se trate en dos partes: el electrónico y el nuclear.

1.3.1 Poder de frenamiento electrónico

El frenado electrónico produce ionización y excitación atómica debido a la interacción del proyectil con los electrones del material. Y como el electrón es muy pequeño en comparación con un núcleo atómico, la trayectoria de los proyectiles durante el frenado es esencialmente recta. En el tratamiento cuántico según Bethe-Bloch, bajo interacción coulombiana y colisiones inelásticas se expresa por la siguiente ecuación, en el intervalo de altas energías (0.5- 5.0 MeV):

$$(dE/dx)_e = NZ_2 \left[4\pi (Z_1 e^2)^2 / m_e v_1^2 \right] \ln(2m_e v_1^2 / I) \quad (1.2)$$

donde Z_1 y Z_2 son los números atómicos del proyectil y del blanco, e es la carga del electrón, m_e es la masa del electrón, v_1 la velocidad del proyectil, N es la densidad atómica del blanco y por último I es la energía de ionización de los electrones en el blanco, cuya aproximación puede ser tomada como: $I = 10Z_2$ en unidades de eV [4].

1.3.2 Poder de frenamiento nuclear

Ahora el poder de frenado nuclear [4], también considerado bajo la interacción coulombiana, pero ahora en colisiones elásticas está expresado en el intervalo de altas energías (0.5- 5.0 MeV), por la ecuación:

$$(dE/dx)_n = \frac{4\pi Z_2^2 Z_1^2 e^4 N}{M_2 v_1^2} \ln \frac{b_{\max}}{b_{\min}} \quad (1.3)$$

donde M_2 es la masa del átomo del blanco, b_{\min} y b_{\max} corresponden a los parámetros de impacto mínimo y máximo que pueden producir transferencia de energía. El b_{\min} es el

parámetro de impacto mínimo con el cual se da la máxima energía transferida a un átomo del blanco en colisión de frente, es decir, se le transfiere una energía cinética:

$$T_{\max} = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \quad (1.4)$$

donde E es la energía del proyectil, y M_1 la masa del átomo del proyectil. Luego para b_{\max} (el parámetro de impacto máximo) involucra a la energía de desplazamiento E_d (definida mas adelante), como:

$$b_{\max} = \frac{2Z_1e^2}{\sqrt{2M_2v_1^2E_d}} \quad (1.5)$$

1.3.3 Poder de frenado total

Es la suma del poder de frenado electrónico y nuclear que de igual forma depende de la energía E_1 del proyectil y de los números atómicos del proyectil y del blanco:

$$\left(-\frac{dE_1}{dx} \right)_t = \left(-\frac{dE_1}{dx} \right)_e + \left(-\frac{dE_1}{dx} \right)_n \quad (1.6)$$

En la figura 1.2 se muestran las formas del frenado. Como puede verse de esta figura el frenamiento nuclear tendrá un comportamiento importante para velocidades bajas, en tanto que el electrónico será dominante para velocidades altas.

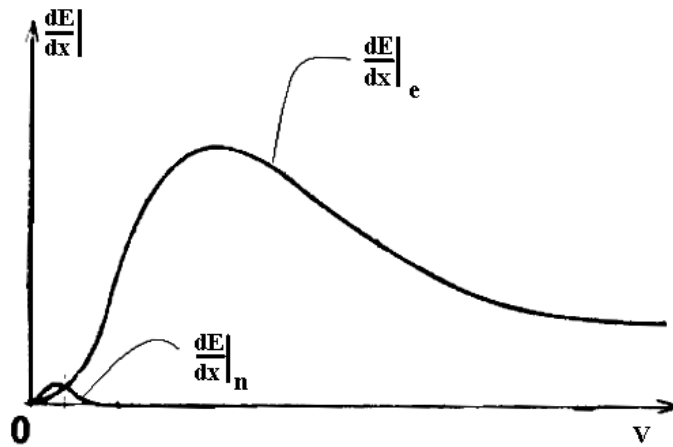


Figura 1.2 Dependencia típica del poder de frenado electrónico dE/dx_e y nuclear dE/dx_n , en función de la velocidad incidente del proyectil v .

1.3.4 Poder de frenado másico ε y atómico

Aquí se toma en cuenta la densidad del material, se utiliza frecuentemente en las tabulaciones del poder de frenado de los libros, por lo que resulta más útil, pues la densidad puede variar aun entre blancos del mismo material. Así el poder de frenado másico se expresa como:

$$\varepsilon = \left(\frac{1}{\rho} \right) \left(- \frac{dE_1}{dx} \right) \quad (1.7)$$

en donde ρ la densidad del material y las unidades de ε son $[\text{MeVcm}^2/\text{g}]$.

La Sección atómica de frenado $S(E_1)$ es el poder de frenado dividido entre la densidad atómica del material. Así

$$S(E_1) = \varepsilon = \left(\frac{1}{n_2} \right) \left(- \frac{dE_1}{dx} \right) \quad (1.8)$$

donde las unidades son de $[\text{MeV cm}^2]$.

1.4 Trayectoria y alcance del proyectil

La trayectoria que describe un haz de iones al penetrar en un material es tridimensional como se observa en la figura 1.3 en donde se muestra la simulación de un conjunto de iones que penetra en un material. Esta simulación se obtuvo utilizando el programa SRIM [5,6]. En este caso un ion con energía inicial E_0 penetra en un material blanco y avanza a través de él interactuando con dos tipos de partículas: electrones y núcleos atómicos.

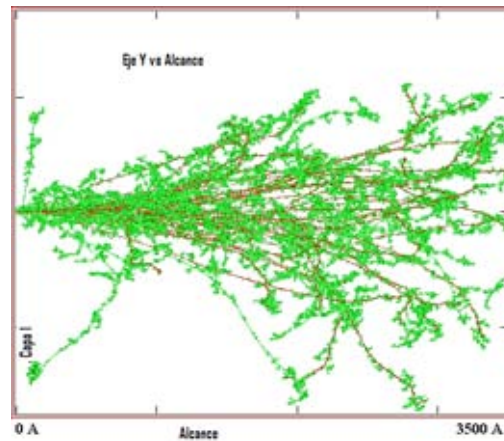


Figura 1.3. Trayectoria tridimensional de un haz de iones implantado en un blanco obtenida utilizando el programa SRIM.

El alcance lineal R_L se define como la distancia total recorrida sobre la trayectoria, desde el punto de incidencia hasta que se detiene. Este alcance es dependiente de E_0 : a mayor energía incidente, mayor distancia lineal recorrida. Su relación con el poder de frenado es la siguiente:

$$R_L(E_0) = \int_{E_0}^0 \left(-\frac{dE_1}{dx} \right)^{-1} dE_1 \quad (1.9)$$

Ahora, mediante la observación de la figura 1.4 en donde se muestra la forma en como puede entrar el ion a la muestra, se describen otras formas de expresar el alcance que suelen ser de utilidad. El primer caso es el alcance proyectado R_p ($\leq R_L$) y que es la proyección de R_L en la dirección del ion incidente. Representa la profundidad a la que el ion se detiene dentro del material y conforma en sí misma la cantidad más relevante y la más fácilmente medible en la implantación de iones. También se puede observar el

alcance transversal R_t es la proyección de R_L en la dirección perpendicular a la del ion incidente. Las relaciones entre las distancias definidas son las siguientes:

$$R_s = \left(y_f^2 + z_f^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.10)$$

$$R_p^t = \left[\left(x_f \text{sen } \alpha - y_f \text{cos } \alpha \right)^2 + z_f^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1.11)$$

$$R_r = \left(x_f^2 + y_f^2 + z_f^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.12)$$

$$R_p = \left[R_r^2 + (R_p^t)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (1.13)$$

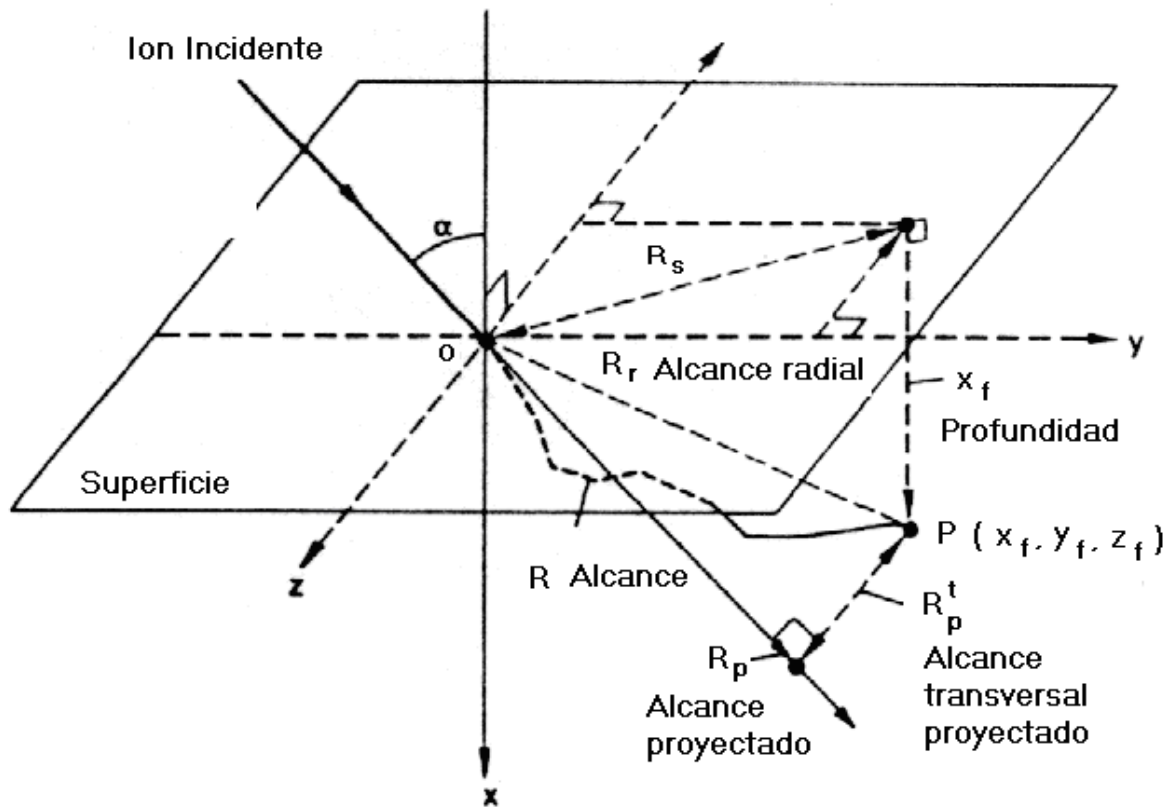


Figura 1.4 Esquema de un ion entrando a un material con energía incidente E_0 .

1.5 Defectos en un material

Los defectos puntuales pueden aparecer en los materiales por calentamiento, irradiación y desviación de la composición química. Estos defectos se esquematizan en dos dimensiones en la figura 1.5. En este trabajo de tesis se estudió el caso por irradiación con iones y se muestran los defectos más comunes que se pueden producir.

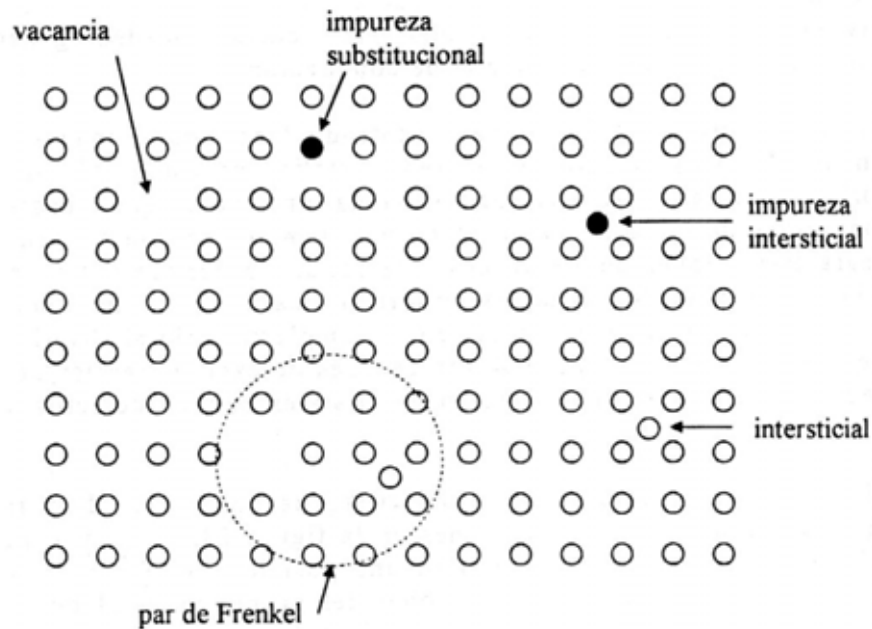


Figura 1.5 Esquema de los defectos producidos por la partícula incidente o PKA en un átomo de la red del material (blanco). Los círculos blancos representan átomos del material y los átomos negros son impurezas, uno intersticial y el otro un átomo de reemplazamiento.

Vacancias

La vacancia (también llamada defecto de Schottky) es una posición de la red en que falta un átomo (figura 1.5) esta se produce cuando $T > E_d$ (definidas más adelante). El átomo

de la red golpeado con esta energía es capaz de moverse de su pozo de potencial que representa su estabilidad en la red como un átomo desplazado, dejando así una vacancia.

Intersticiales

El intersticial puede ser un átomo del propio material o de impurezas que, en lugar de estar en una posición regular en la red, se encuentra en una posición intermedia figura 1.5.

Par de Frenkel

Este defecto vacancia-intersticial se refiere como un *defecto de Frenkel o par de Frenkel*. Por lo que se puede definir un defecto de Frenkel como: una vacancia de la red creado al remover un átomo desde su lugar y colocando a éste en una posición intersticial en la red. Ver figura 1.5.

1.6 Daño producido por la radiación con iones

Las teorías de daños por radiación suponen que para que un átomo de la red golpeado por un ión energético pueda ser desplazado desde su lugar de la red, debe recibir una mínima energía. La energía requerida para desplazar el átomo de la red representa el umbral de desplazamiento y es llamada la *energía de desplazamiento, E_d* .

Si en el proceso de colisión la energía transferida al átomo de la red, T , es menor que E_d , el átomo golpeado sufre vibraciones de gran amplitud sin dejar su posición en la red. La energía vibracional del átomo golpeado es rápidamente compartida con sus vecinos más cercanos y aparece como una fuente localizada de calor. Sin embargo, si $T > E_d$, el átomo golpeado es capaz de moverse de su pozo potencial que representa su estabilidad en la red y salir de la red como un átomo desplazado. Esta T generalmente es diferente a la T_{max} definida anteriormente, por que T_{max} es la colisión de frente.

También tiene lugar la generación de daño por efectos debidos a colisiones secundarias o cascadas que se describen a continuación una por una.

Colisiones PKA

Cuando uno de los átomos del blanco es golpeado por el proyectil energético (ion) adquiere energía cinética, y se convierte en proyectil, que vuelve a chocar con más átomos del material. De ahí se genera una cascada formada totalmente por átomos del blanco. Los átomos desplazados por el proyectil original se llaman *PKA del inglés (Primary Knock-On atom)*, y cada uno genera una cascada. Estos PKA'S se producen en gran parte bajo las siguientes condiciones: choques elásticos de iones muy energéticos (MeV) con los núcleos del material (blanco).

Cuando los átomos PKA'S adquieren energía $E \gg E_d$, éstos vuelven a desplazar a otros átomos del blanco se producen átomos secundarios (Secondary Knock-On atom), terciarios (Tertiary Knock-On atom), etc. Creando así una cascada de colisiones, ver figura 1.6. Las dimensiones y forma de esta cascada dependen de la energía, de la masa y naturaleza del proyectil (ion) y de la masa de los átomos del material (blanco), de su temperatura y estructura del material.

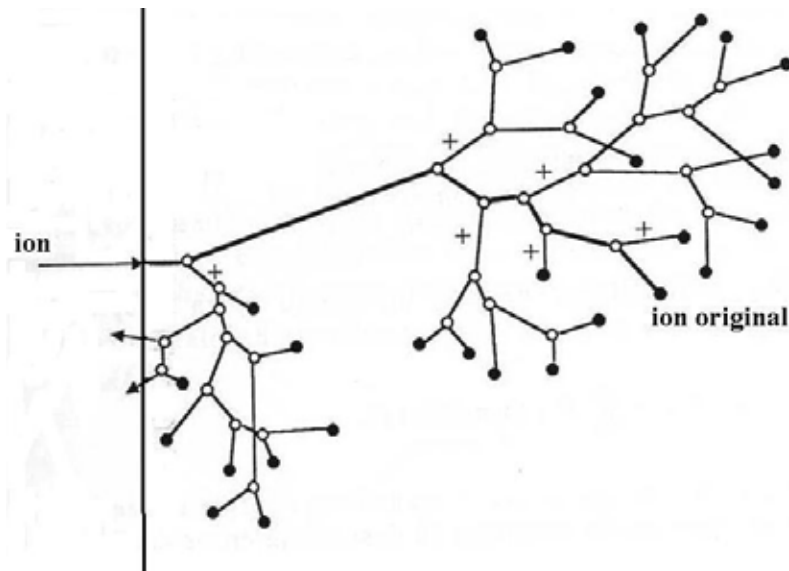


Figura 1.6 Representación de la formación de una cascada de colisión por un PKA, así como la trayectoria del ion original, (línea mas gruesa).

Cascadas binarias

En la figura 1.7 se muestra una colisión binaria entre un PKA de energía E con un átomo de la red. En la colisión, el PKA transfiere energía T al átomo de la red dejando la colisión con energía $E-T$.

Colisiones de desplazamiento

En una *colisión de desplazamiento* con energía E del PKA, el ion energético, debe transferir una energía T tal que sea mayor que la energía de desplazamiento del átomo del material, es decir, $T \geq E_d$, y por lo tanto habrá desplazamiento como se muestra en la figura 1.7 La energía de desplazamiento de los materiales depende del elemento, y en general no tiene un valor preciso, sino que puede ser función de la dirección y de la temperatura. Por lo tanto se define una función del desplazamiento $P_d(T)$, que es la probabilidad de generar un desplazamiento si se transfiere una energía T . Una posible forma de esta función se muestra en la figura 1.8, junto con una función de escalón idealizada para un valor preciso de E_d . Si $T < T_{\min}$ no puede haber desplazamiento; si $T > T_{\max}$ seguramente habrá desplazamiento, donde T_{\max} se definió anteriormente. Los valores típicos de E_d están entre 10 y 50 eV. La secuencia múltiple de desplazamientos de colisiones es comúnmente conocida como una *colisión* o *cascada de desplazamiento*.

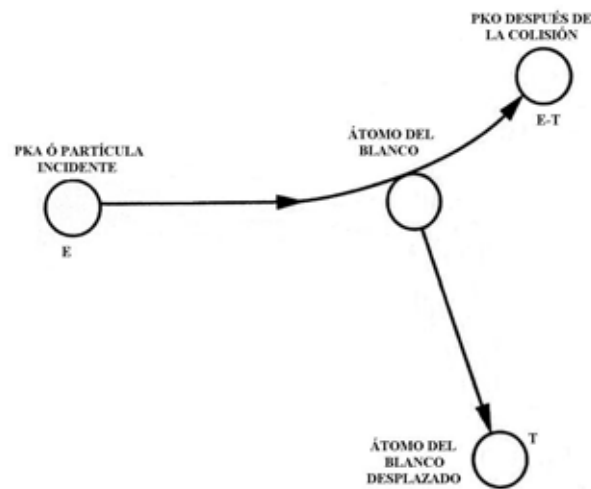


Figura 1.7 Colisión binaria entre un PKA o partícula incidente de energía E y un átomo de la red del blanco, donde se observa el cambio de energía del PKA después de la primera colisión.

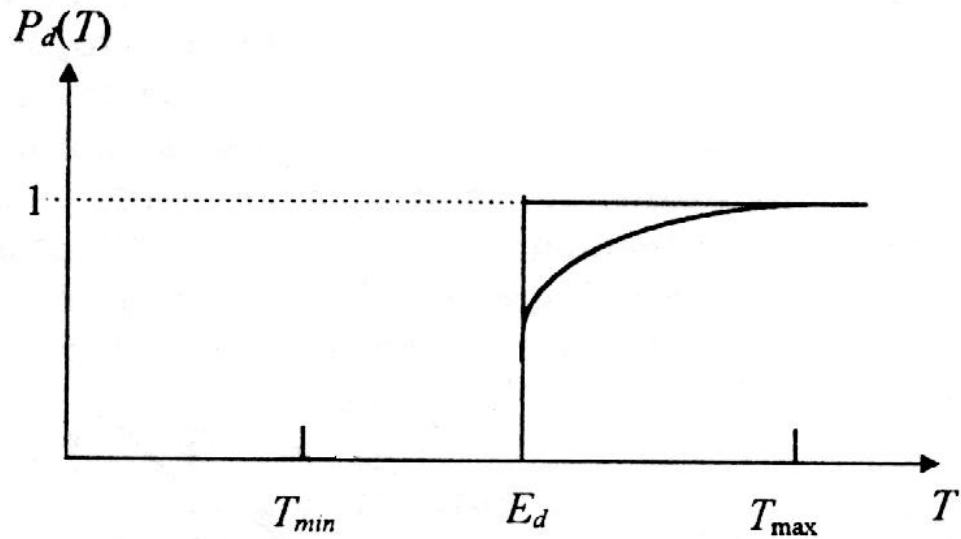


Figura 1.8 Función de probabilidad posible para una función de desplazamiento, y una función de escalón con valor E_d .

Colisiones de reemplazamiento

Si la energía transferida del PKA al átomo de la red excede E_d pero es menor que $2E_d$, el átomo de la red debe ser desplazado, pero el PKA inicial queda con energía menor que E_d . En esta situación el átomo golpeado es movido fuera de su lugar de la red, pero el PKA cae dentro de un lugar vacante, disipando su energía cinética restante como calor. Este proceso representa una *colisión de reemplazamiento*. En seguida se muestra esta situación, en la figura 1.9.

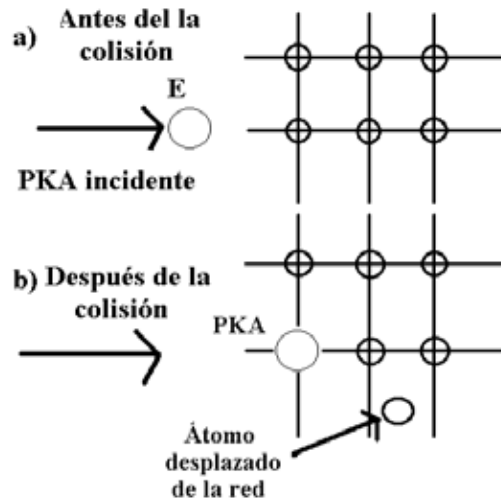


Figura 1.9 Representación de una colisión de reemplazamiento.

1.7 Programa TRIM

El código TRIM del inglés (Transport of Ions in Matter) consiste de una simulación, usando el método de Monte Carlo con números aleatorios, del paso de los iones por materia. Permite efectuar una visualización estadística de las trayectorias individuales de los iones, y va registrando ciertas cantidades como los alcances proyectado y lateral, la ionización producida a lo largo de la trayectoria y el número de desplazamientos atómicos producidos (daño). Al concluir la simulación se pueden tener las curvas de distribución de estas cantidades como función de la profundidad dentro del blanco.

Este código es el empleado en el programa de cómputo SRIM [5,6] que es el más utilizado a nivel mundial para simular los efectos de la irradiación con iones de un material.

El núcleo principal del código TRIM se fundamenta en el Método de Monte Carlo. Este método conforma una serie de procedimientos que analizan distribuciones de variables aleatorias con la cual es posible efectuar una simulación de experimentos con muestreos estadísticos por medio de una computadora. El método es aplicable a cualquier tipo de problema, ya sea estocástico o determinístico. La clave de la simulación Monte Carlo

consiste en asignar una probabilidad a cada proceso o actividad que puede ocurrir durante el fenómeno a describir. Es decir, se identifican aquellas variables cuyo comportamiento aleatorio determina el comportamiento global del sistema y asignarles una probabilidad de ocurrencia.

Una vez identificadas las probabilidades para cada actividad posible en el sistema durante el paso del proyectil (generación de vacantes, cascadas, etc.), se lleva a cabo un "experimento" en la computadora para cada ion que llega al material, consistente en:

- 1) Generar un número aleatorio.
- 2) El valor de este número aleatorio se compara con los intervalos de valores asociados con cada actividad. (Los intervalos de cada actividad no son del mismo tamaño. Entre más grande es la probabilidad de la actividad mayor es su tamaño).
- 3) Una vez determinada la actividad suponemos que ésta actúa sobre el ion y lo deja en una nueva condición. Esto nos genera nuevos valores para las condiciones del ion.
- 4) Con las nuevas condiciones se vuelve a repetir el proceso sucesivamente hasta que el ion queda en reposo.

Esto es, tras repetir n veces este experimento, dispondremos de n observaciones sobre el comportamiento del sistema, lo cual nos será de utilidad para entender el efecto del ion en un material. Obviamente, el análisis será tanto más preciso cuanto mayor sea el número n de experimentos que se lleven a cabo.

Referencias

- [1] J. F. Ziegler, "Ion Implantation Science and Technology" Academic Press, INC. 1984
- [2] Jorge Rickards Campbell, "La física de las radiaciones en materia" Dirección General de Divulgación de la Ciencia. UNAM.
- [3] Curso Regional Sobre Aplicaciones de los Aceleradores de Partículas. Notas , Instituto de Física. Universidad Nacional Autónoma de México. Departamento de Física Experimental, 1993.
- [4] Michael Nastasi, James W. Mayer y James K. Hirvonen, "Ion-solid interactions: Fundamentals and applications", Cambridge University Press, New York, 1996.
- [5] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, and U. Littmark, "The stopping and range of ions in matter", Pergamon Press, New York, 1985.
- [6] Página web del programa: <http://www.srim.org>.

Capítulo 2

Espectroscopía RBS

2.1 Aspectos generales

La técnica de espectroscopía de retrodispersión de iones (Rutherford Backscattering Spectrometry, RBS), cuyo nombre en inglés se debe a que Ernest Rutherford fue el primero en observar este efecto, nos brinda un método de análisis de la materia en donde un haz de partículas monoenergéticas incidente (usualmente ${}^4\text{He}^{++}$, partículas alfas) chocan con átomos de un blanco y que son dispersados de regreso hacia un detector (ver figura 2.1). El detector y su electrónica asociada miden las energías de las partículas dispersadas y cuentan el número de partículas con cada energía.

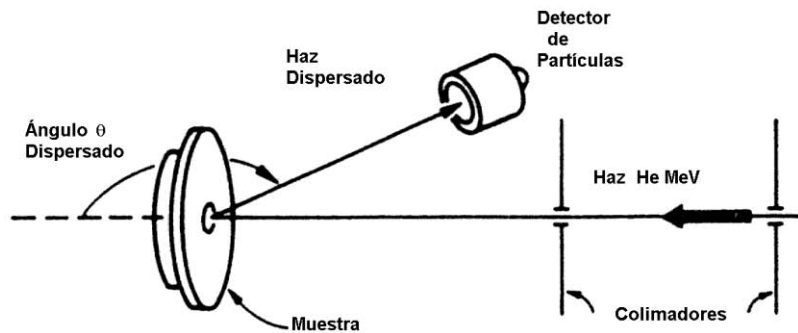


Figura 2.1 Arreglo experimental de Retrodispersión de Rutherford.

En la colisión la energía es transferida desde la partícula en movimiento al átomo del blanco estacionario, generando la reducción en la energía de la partícula dispersada. Esta pérdida de energía depende de la masa de los átomos incidentes y del blanco, de tal

manera que midiendo la energía final del proyectil es posible determinar qué especie atómica existe en el blanco.

La espectroscopía RBS se usa para determinar el espesor de películas delgadas, composición química y la concentración areal, (átomos/cm²). También es posible determinar la distribución de elementos con la profundidad, es decir, perfiles de concentración en función de la profundidad a partir del espectro obtenido [1].

2.2 Fundamentos de la retrodispersión de iones.

Factor cinemático

La energía transferida en colisiones elásticas entre dos partículas aisladas puede obtenerse al aplicar los principios de conservación de energía y momento lineal. Para una partícula energética incidente de masa M_1 tiene los valores de velocidad v y energía E_0 con $E_0 = \frac{1}{2}M_1v^2$, mientras que el átomo del blanco tiene masa M_2 en reposo. Después de la colisión la partícula incidente o el proyectil sale retrodispersado con una velocidad v_1 y energía E_1 , así mismo el átomo del blanco adquiere una velocidad v_2 y energía E_2 . Los valores de estas velocidades y energías, se determinan en función de los ángulos dispersado θ y de retroceso ϕ , como se puede ver en la figura 2.2, donde se tiene la geometría para las coordenadas del sistema de laboratorio.

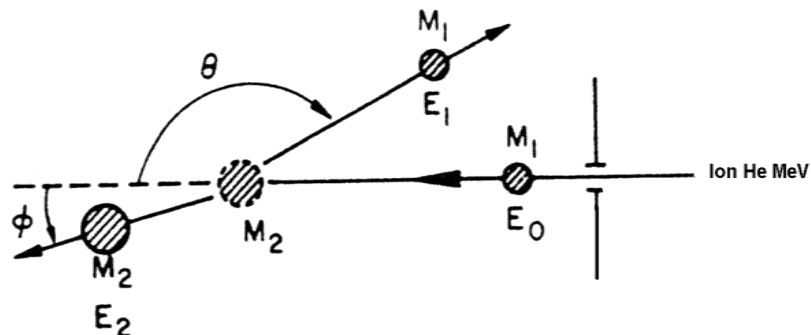


Figura 2.2 Representación de una colisión elástica, entre un proyectil de masa M_1 , velocidad v , y energía E_0 y del átomo del blanco de masa M_2 , inicialmente en reposo.

La conservación de la energía y el momento lineal paralela y perpendicular a la dirección de incidencia están expresadas por las ecuaciones:

$$\frac{1}{2}M_1v^2 = \frac{1}{2}M_1v_1^2 + \frac{1}{2}M_2v_2^2 \quad , \quad (2.1)$$

$$M_1v = M_1v_1 \cos \theta + M_2v_2 \cos \varphi \quad (2.2)$$

y

$$0 = M_1v_1 \sin \theta - M_2v_2 \sin \varphi. \quad (2.3)$$

Haciendo una manipulación algebraica, se encuentra la razón de las energías del proyectil antes y después de la colisión con un átomo para $M_1 < M_2$:

$$K = \frac{E_1}{E_0} = \left[\frac{\left(M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta \right)^{1/2} + M_1 \cos \theta}{M_2 + M_1} \right]^2. \quad (2.4)$$

La razón de energía $K = E_1/E_0$ llamada *factor cinemático* muestra que la energía después de la dispersión está determinada únicamente por la masa del átomo tanto del proyectil y del blanco, así como del ángulo dispersado. Dando con esto la pérdida de energía de la partícula del proyectil al ser dispersado por el ángulo θ con la colisión con el blanco. Comúnmente un subíndice es agregado a K para indicar la masa del átomo del blanco es decir K_{M_2} . Existen tablas de valores de K para valores de M_2 y θ . Este factor K es muy importante porque nos ayuda a determinar la masa atómica de los átomos del blanco.

En la práctica cuando un blanco contiene dos tipos de átomos que difieren en sus masas por una cantidad pequeña ΔM_2 , la geometría experimental se ajusta para que esta diferencia produzca un gran cambio ΔE_1 tanto como sea posible en la medida de la energía E_1 del proyectil después de la colisión. Un cambio ΔM_2 (para fijos M_1 y M_2 , con $M_1 < M_2$) da el cambio más grande de K cuando $\theta = 180^\circ$. De esta manera $\theta = 180^\circ$ es la

localización preferida para el detector (en la práctica $\theta \cong 170^\circ$ debido al tamaño del detector) un arreglo experimental de esta manera recibe el nombre de espectroscopía RBS.

De acuerdo con 2.4 se tiene que la resolución de las masas de los elementos del blanco depende de la masa del proyectil empleado y de la cercanía del ángulo de dispersión a 180° . Al emplear ^1H se resuelven bien las masas menores de 40 uma en el blanco, debido a que el factor cinemático de dispersión comienza a variar muy lentamente para masas mayores. Los ^4He tienen un intervalo mayor de resolución de masas que los ^1H , pero también para elementos muy pesados se va haciendo menor. La mejor resolución de elementos muy masivos se obtienen empleando iones pesados como ^{12}C , ^{20}Ne , ^{40}Ar . En los espectros se desea tener las energías correspondientes a cada elemento en forma separada.

Sección eficaz de retrodispersión

Otro factor muy importante en la espectroscopía RBS es la sección eficaz de retrodispersión. Esta cantidad es proporcional a la probabilidad de que un ion incidente sea retrodispersado a un ángulo θ dentro de un ángulo sólido $d\Omega$. Considerando una colisión elástica e interacción coulombiana entre el ion y el átomo blanco podemos expresar la sección eficaz diferencial $d\sigma/d\Omega$ con respecto al sistema del laboratorio como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_0 \sin^2 \theta} \right]^2 \frac{\left[\left(M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta \right)^{\frac{1}{2}} + M_2 \cos \theta \right]^2}{\left[M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \theta \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (2.5)$$

en donde Z_1 y Z_2 son los números atómicos del proyectil y del blanco, e la carga del electrón y E la energía del ion antes de la colisión. A esta sección eficaz también se le conoce como sección de Rutherford debido a que fue Ernest Rutherford el primero en deducirla [1,2].

Esta cantidad es importante en la espectroscopía RBS porque haciendo uso de ella es posible determinar la concentración de átomos de un elemento dado que componen la muestra blanco.

2.3 Configuración experimental para RBS

Las componentes de un sistema de retrodispersión se muestran en la figura 2.3. La fuente (en este caso un acelerador) genera un haz de partículas colimadas y monoenergéticas de energía E_0 . Los iones inciden sobre la superficie de la muestra, siendo retrodispersados unos y penetrando otros hasta una profundidad donde a su vez son retrodispersados. Se coloca un detector de partículas a un ángulo θ y que subtiende un ángulo sólido $d\Omega$. De esta manera los iones que son retrodispersados en la dirección del detector y adentro de este ángulo sólido pueden ser registrados. El detector genera una señal analógica que es proporcional a la energía del ion cuando llega al detector. Esta señal es amplificada, convertida de señal analógica a digital y enviada a un analizador multicanal, el cual subdivide la magnitud en una serie de incrementos iguales. Cada incremento es numerado y referido como un canal. Existen multicanales modernos que cuentan con miles de canales. Un evento cuya magnitud cae en un canal en particular es registrado como una cuenta. Al término del experimento cada canal ha registrado un cierto número de cuentas. Por lo que la salida del multicanal es una serie de cuentas contenidas en los distintos canales. El histograma obtenido en el multicanal se le conoce como espectro y contiene información cuantitativa sobre la energía de la partícula detectada. La relación entre la energía de una partícula retrodispersada detectada y el número del canal es lineal, donde la pendiente es el intervalo de energía correspondiente a un canal y la ordenada al origen es ajustable a la calibración del sistema electrónico del analizador.

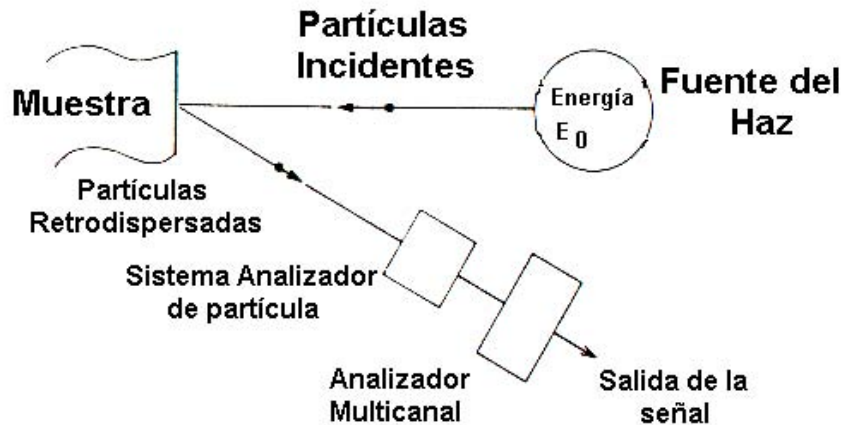


Figura 2.3 Esquema de un sistema de espectroscopía de Retrodispersión (RBS).

2.4 Espectro RBS para un blanco monoelemental

En la figura 2.4 se muestra como sería la forma de un espectro de RBS para un blanco sólido compuesto por un sólo tipo de elemento atómico. Consideramos que los iones inciden con energía E_0 sobre la muestra. Los proyectiles que sean retrodispersados por los átomos de la superficie lo harán con una energía KE_0 . Los demás iones penetrarán en el material por el que viajarán perdiendo energía hasta que sean retrodispersados a una profundidad X y con una energía KE . Posteriormente, este mismo ion irá perdiendo energía en el interior de la muestra hasta salir con una energía E_1 menor a la energía KE_0 . De esta manera, el espectro de RBS de los iones detectados deberá tener registros solamente para energías menores a KE_0 , generando una especie de escalón. Conociendo la masa del ion incidente, la carga, su energía y el ángulo de retrodispersión, tenemos que la posición donde inicia el escalón nos indica con qué elemento atómico del blanco chocó. Los demás registros del espectro nos indican a que profundidad se produce la retrodispersión, así a menor energía registrada mayor la profundidad donde colisionó. Luego, como la sección de retrodispersión, E_c (2.5), aumenta a medida que disminuye la energía del proyectil, tendremos que a menor energía del ion mayor probabilidad de colisionar, y por tanto, un mayor número de registro de estos eventos. Esto es lo que hace que el espectro vaya aumentando para energías menores a KE_0 .

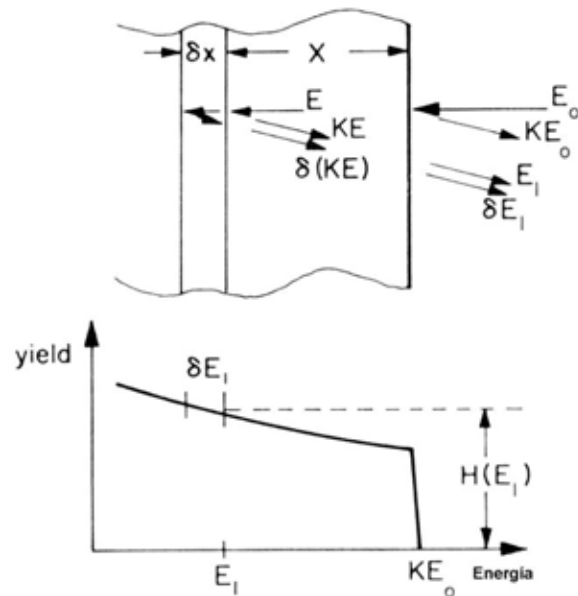


Figura 2.4 Forma del espectro RBS para un blanco sólido monoelemental.

2.5 Espectro RBS de una película delgada

En la figura 2.5 se muestra el caso general de un espectro RBS generado por una película delgada compuesta por elementos A y B sobre un sustrato C. Por simplicidad en este caso vamos a considerar que la masa M_A y número atómico Z_A de A es mayor que la masa M_B y Z_B de B, así como que la masa M_C de C es menor que las dos anteriores. Cuando inciden los iones de energía E_0 sobre la muestra inclinada un ángulo θ_1 pueden ser retrodispersados con energía $E_1^A = K_A E_0$ si chocan con un átomo del elemento A o con energía $E_1^B = K_B E_0$ si lo hacen con un elemento B. A partir de estas dos energías serán registrados los demás iones que sean retrodispersados en el interior de la película. Una vez que los iones atraviesen toda la película ya no habrá registro de cuentas debidas a estos elementos, sino que lo harán ahora con los átomos del sustrato y generará un conteo semejante al señalado en el punto 2.5. Así, en el espectro se generan dos grupos de conteos debidos a los elementos A y B, en forma de “picos” o “dientes” y

posteriormente un escalón debido al sustrato. El número total de cuentas en el “pico” correspondiente al elemento A y B respectivamente es:

$$H_A = Q \sigma_A(E, \theta) \Omega N_A t / \cos \theta_1 \quad (2.6)$$

y

$$H_B = Q \sigma_B(E, \theta) \Omega N_B t / \cos \theta_1 \quad (2.7)$$

en donde H_A y H_B son el número total de cuentas en los respectivos “picos”, Q es el número total de iones incidentes sobre el blanco, Ω es el ángulo sólido del detector, t es el espesor de la película, $\sigma_A(E, \theta)$ y $\sigma_B(E, \theta)$ son las respectivas secciones eficaces de dispersión en función de la energía E del proyectil justo antes de la colisión y θ el ángulo de retrodispersión, que se calculan con ayuda de la ecuación (2.5). Si la película es lo suficientemente delgada se puede aproximar a E como E_0 a lo largo de toda la película. Finalmente N_A y N_B son las densidades atómicas de los elementos A y B en la película delgada con unidades de átomos/cm³.

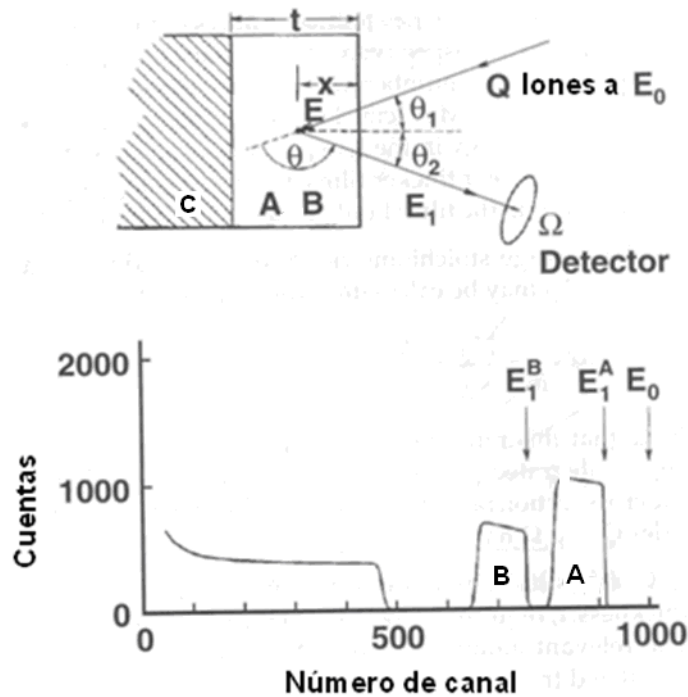


Figura 2.5 Espectro RBS para una película delgada compuesta por dos elementos A y B sobre un sustrato más ligero.

En el espectro tendremos que H_A es mayor que H_B debido a que $\sigma_A > \sigma_B$ y que el ancho de los “picos” es proporcional al espesor t de la película. Con ayuda de las ecuaciones (2.6) y (2.7) es posible obtener la concentración de átomos por unidad de área ($N_A t$) y ($N_B t$) para los elementos A y B.

2.6 Resolución de espectros RBS

En la práctica no es posible tener haces de partículas completamente monoenergéticos. En ellos, la energía de los iones está distribuida en forma gaussiana en torno al valor promedio. A su vez, al pasar el haz por el interior de la muestra, aumenta la dispersión en torno al valor medio (figura 2.6), debido a que los iones sufren diferentes interacciones en la muestra, perdiendo unos más energía que otros. Este fenómeno se denomina en inglés “*straggling*”, que da como resultado fluctuaciones en las energías de los iones que llegan y salen de la muestra. Esto es, el paso de un haz de iones con energía inicial E_0 , por una muestra de espesor t hace que la dispersión en energías en torno a E_0 inicial del haz aumente de tamaño cuando en promedio el haz tiene una energía E . A este también hay que incluir el “*straggling*” que se produce en el mismo detector debido a la interacción de las partículas con el material del que está hecho.

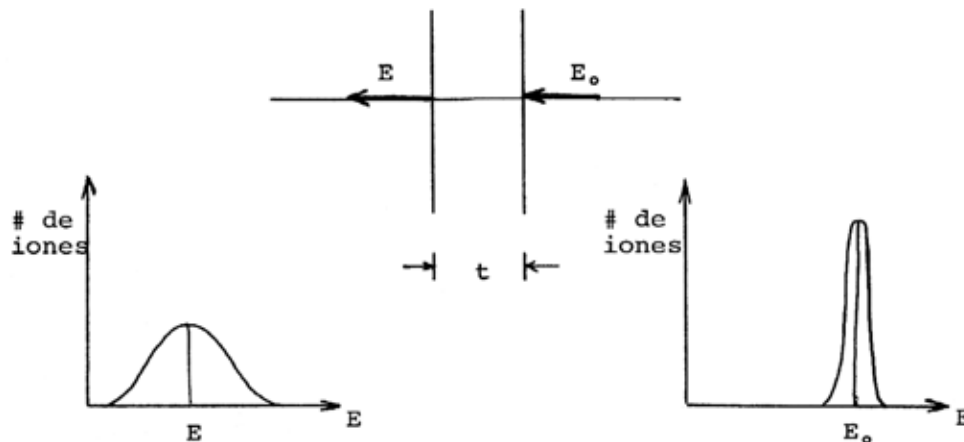


Figura 2.6 Cambio en la distribución en energía de los iones al atravesar un material de espesor t . En la gráfica de la derecha se muestra la distribución en energías del haz incidente inicial con energía E_0 . En la gráfica de la izquierda se muestra la distribución en energías en torno a la energía promedio final E .

2.7 Medida del espesor de una película

Como se menciona en la sección 2.6, el ancho del “pico” correspondiente a los iones retrodispersados por una película nos puede dar el espesor t de una película. En la figura 2.7 se muestra el espectro RBS para una película P sobre un sustrato S y en donde se muestra el cambio en energía $\Delta E = KE_0 - E_1$. Suponiendo que se conoce la expresión para la pérdida de energía del proyectil en la película entonces se tiene que:

$$\Delta E = [\varepsilon(E_0)] Nt \quad (2.8)$$

en donde $[\varepsilon(E_0)]$ es un factor debido al frenamiento y que nos relaciona el ancho de la energía del “pico” con el espesor t .

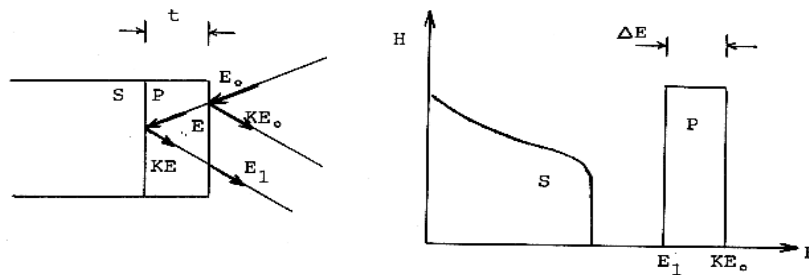


Figura 2.7 Cálculo del ancho del “pico” en términos del ΔE .

Los valores de KE_0 y de E_1 para calcular ΔE se obtienen directamente del espectro. Pero por el “*straggling*” debido a las fluctuaciones en la energía del ion, la resolución del sistema de detección e irregularidades en la película, el espectro tiene caídas no rectangulares ó se asemeja a una gaussiana, como se observa en la figura 2.8, con lo que para determinar ΔE se toman los valores medios en las caídas del espectro.

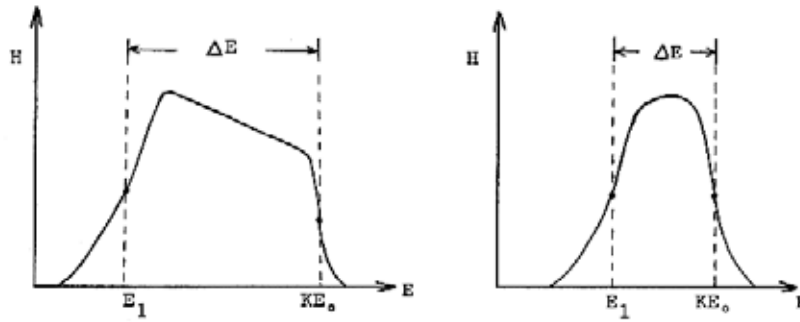


Figura 2.8 Ejemplos de caídas de los espectros RBS correspondientes a “picos” por iones retrodispersados por una película considerando los efectos del “straggling”.

2.8 Espectro RBS de un elemento atómico implantado en un material

Cuando los átomos de un elemento no se encuentran en su superficie, la forma del espectro RBS se puede complicar y la obtención de información es más compleja. En la figura 2.9 se muestra un blanco formado en su totalidad por un elemento A en donde a una cierta profundidad tiene difundidos una serie de átomos del elemento B. Este es un caso semejante al de iones implantados en una matriz. En este caso la energía de los iones retrodispersados por el elemento B en el espectro de RBS no comenzarán a aparecer en la energía KE_0 , sino que lo harán a una energía menor E_1 debido a la pérdida de energía del ion al tener que atravesar parte del material A.

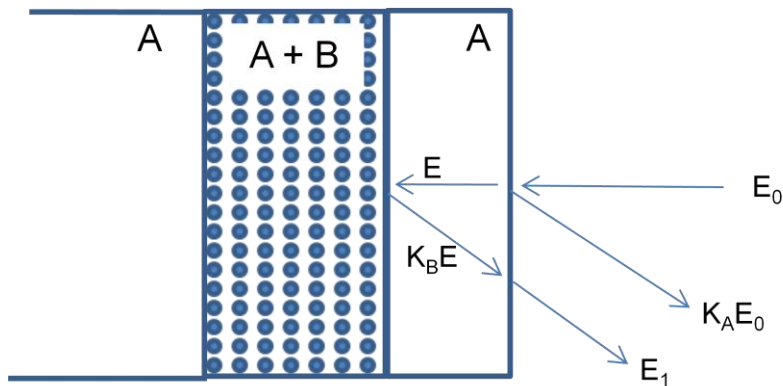


Figura 2.9 corte transversal de una muestra en su mayoría compuesta por el elemento A y que tiene átomos del elemento B difundidos en su interior.

En la figura 2.10 se muestra una serie de simulaciones de espectros RBS correspondientes a una distribución semigaussiana de átomos de plata en el interior de una matriz de SiO_2 utilizando iones de ${}^4\text{He}^{+2}$ (partículas α) para diferentes energías de incidencia. En color negro se muestra el espectro total simulado, mientras que con las líneas de color verde se muestra la contribución correspondiente a la retrodispersión por átomos de oxígeno, en rojo a la del silicio y en líneas verticales a la de los átomos de plata. En la posición donde se indican los símbolos O y Si se indican a los lugares donde corresponden los iones retrodispersados por estos elementos en la superficie. Con una flecha y el símbolo Ag se muestra donde debería de aparecer la señal de la plata si ésta estuviera en la superficie.

En esta figura se puede observar que para las energías pequeñas de 1.5 MeV la señal correspondiente a la plata se superpone con la del silicio, por lo que no es fácil obtener las alturas y el número total de cuentas de estos iones retrodispersados por la plata. Esto se debe a que los iones de helio tienen poca energía, pero si se aumenta ésta, la señal correspondiente a la plata comienza a dejar de superponerse con la del silicio, debido a que el factor cinemático de la plata es mayor que la del silicio. Cuando la energía es suficientemente grande, como lo es para 3 MeV, es posible separar totalmente a la señal de la plata de la del sustrato.

Para poder analizar los espectros de RBS en estos casos, existen programas de cómputo que con base en los conceptos básicos de la espectroscopía RBS y el conocimiento de las expresiones semiempíricas para el frenamiento de los iones en un material [3,4] es posible simular la forma del espectro que tendría un espectro con una distribución de elementos dada.

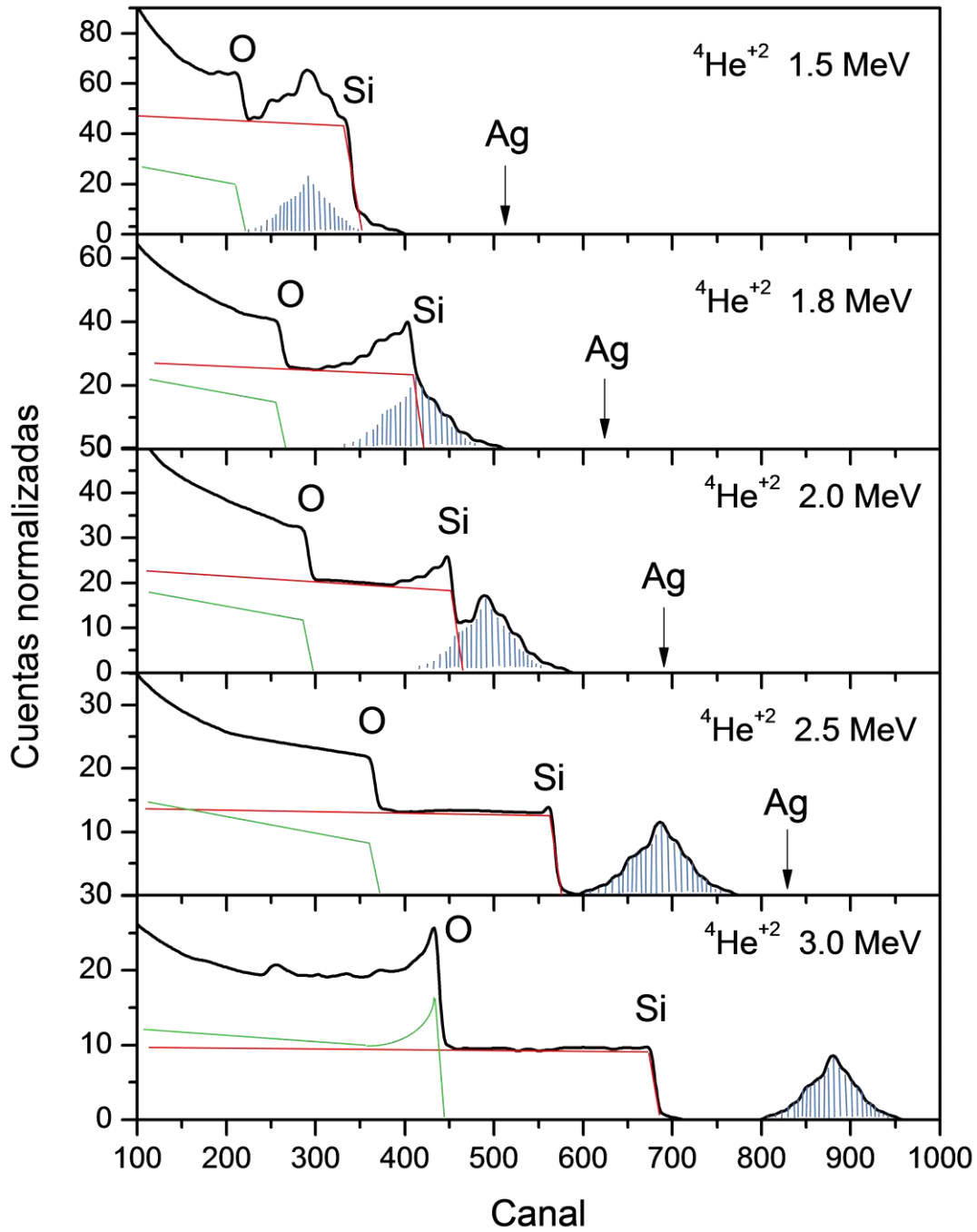


Figura 2.10 Simulación de espectros RBS correspondientes a una distribución de átomos de plata en el interior de una matriz de dióxido de silicio.

2.9 Programa RUMP

Dentro de los programas de computadora más utilizados para la simulación de espectros de RBS es el RUMP del inglés Rutherford Universal Manipulation Program [5,6]. Esto es debido a que el programa fue uno de los primeros que se hicieron, las subrutinas y algoritmos que utiliza son de dominio público, además de que en la actualidad es un programa gratuito.

Sin embargo, uno de los cambios que ha presentado el RUMP durante el tiempo es que se ha programado desde Fortran hasta la última versión en lenguaje C y ha mejorado a tal grado que, por ejemplo existe una tabla que contiene el poder de frenado de cualquier tipo de elemento que incide sobre diversos tipos de blancos y selecciona automáticamente el rango de energía necesaria en la simulación.

Este programa lo que hace es dividir en rebanadas a la muestra y aplicar los conceptos involucrados en las colisiones atómicas junto con los debidos a la pérdida de energía. A grandes rasgos puede entenderse esto como un análisis de múltiples películas delgadas que se van superponiendo una sobre otra y con ello aplicar con más detalle lo expuesto en las secciones 2.6 a 2.8.

Con este programa lo que se hace es simular un espectro de RBS a partir de las condiciones que el usuario imponga inicialmente para la concentración de elementos en una muestra. Los parámetros experimentales de irradiación, como la energía del ion, tipo de ion, ángulo de detección, ángulo sólido, etc., se mantienen fijos en el programa todo el tiempo. Una vez simulado el espectro se compara con el obtenido experimentalmente. Cuando esta simulación coincide o se ajusta al espectro experimental lo suficiente, puede uno tener la certeza de que esta simulación corresponde a la que hay en realidad adentro de la muestra. En caso de que no exista una coincidencia se vuelven a variar las concentraciones de elementos y su distribución en el interior de la muestra procurando que generen una simulación más parecida a la experimental. Este proceso se repite hasta conseguir la coincidencia entre los dos espectros.

Referencias

- [1] W.K. Chu, J.M. Mayer, M.A. Nicolet, "*Backscattering Spectrometry*", Academic Press, New York, 1978.
- [2] A. Beiser, "*Conceptos de física moderna*", McGraw Hill, segunda edición, México, 1988.
- [3] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, and U. Littmark, "The stopping and range of ions in solids", volumen 1, Pergamon Press, New York, 1985.
- [4] J.F. Ziegler, J.P. Biersack, and U. Littmark, "The stopping and range of ions in matter", Pergamon Press, New York, 1985.
- [5] Doolittle, L.R. Nuclear Instruments and Methods B 15 (1986) 227.
- [6] Página web del sitio oficial del software RUMP: <http://www.genplot.com/>.

Capítulo 3

Desarrollo Experimental

En este capítulo se presentan los aspectos experimentales relacionados con la preparación de las muestras y el análisis de la distribución de iones de plata por medio de RBS, al variar las condiciones de implantación.

3.1 Acelerador de iones positivos Pelletron

Para preparar la muestra por medio de implantación de iones de Ag, como para analizarla por RBS, se utilizó el acelerador de iones positivos Pelletron tipo tandem del Instituto de Física de la UNAM, fabricado por la National Electrostatic Corp, modelo 9SDH-2. La terminal de este acelerador permite llegar hasta 3 MV y puede producir muchos tipos de iones. En la figura 3.1 se muestra un diagrama de este acelerador.

El acelerador cuenta con dos fuentes de iones negativos: una SNICS (Secondary Negative Ions by Cesium Sputtering) que sirve para acelerar iones a partir de materiales sólidos (señalada como 1 en la figura 3.1), y una segunda de radiofrecuencia llamada Alphasross para gases (señalada como 2 en la figura 3.1).

En la fuente SNICS el material del cual se obtendrán los iones a acelerar es colocado a manera de cátodo al cual se le aplica un potencial. Este cátodo se encuentra bajo una atmósfera de vapor de cesio, el cual, bajo la influencia del potencial produce erosión iónica en el cátodo, desprendiendo sus átomos que al intercambiar carga con el cesio se convierten en iones negativos y son repelidos por el cátodo hacia una etapa de preaceleración por medio de campos eléctricos. Posteriormente, un electroimán llamado inyector (indicado como 3 en la figura 3.1) desvía el haz de partículas hacia la etapa de aceleración de alta energía (ver la figura 3.1).

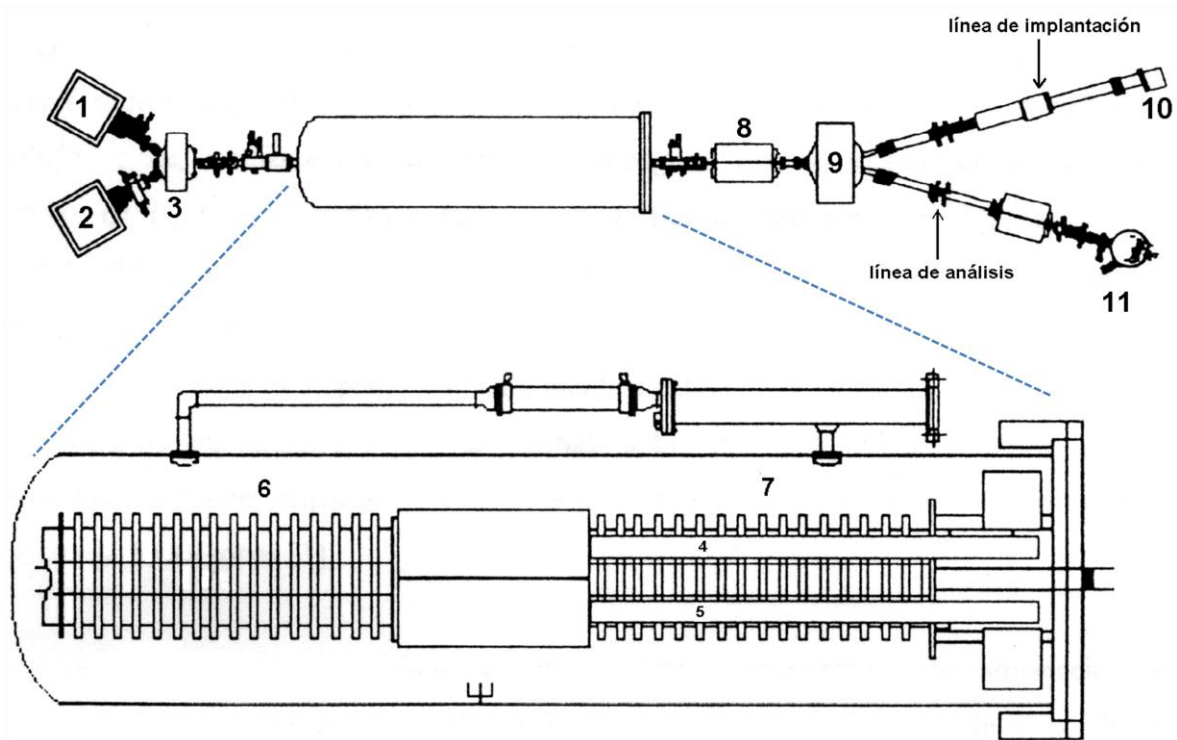


Figura 3.1 Esquema de los componentes esenciales del acelerador Pelletron tipo Tandem utilizado para la implantación y análisis.

Dos cadenas de eslabones conductores unidos entre sí con elementos aislantes (indicadas como 4 y 5 en la figura 3.1) transportan carga eléctrica inducida y la depositan en la terminal de alto voltaje que se encuentra al centro de un tanque cilíndrico presurizado con un gas dieléctrico de SF_6 . A partir de esta terminal y hacia ambos extremos se encuentra una serie de anillos conductores (indicados como 6 y 7 en la figura 3.1) interconectados por resistencias, de modo que el potencial va aumentando en cada anillo hasta llegar a la terminal. De esta manera los iones negativos desviados por el imán inyector son acelerados por los anillos de la izquierda (6 en la figura 3.1) hacia la terminal de alto voltaje cargada positivamente. Un vez que llegan a la terminal por medio de una celda con una atmósfera de nitrógeno son despojados de electrones, de tal manera que pasan de tener carga negativa a positiva, por lo cual son repelidos hacia los anillos del lado derecho (7 en la figura 3.1) y expulsados del acelerador. Si el potencial en la terminal de alto voltaje es V y q es el número de electrones faltantes en el ion, entonces la energía del ion será de igual a $(1+q)V$ en unidades de electrón volts.

Los iones salen del acelerador hacia un cuadrupolo magnético (indicado por 8 en la figura 3.1) usado para enfocar el haz saliente y que luego pasa por el imán selector (indicado por 9 en la figura 3.1) el cual los desvía de acuerdo a su carga y a su masa hacia la línea de implantación (indicada por 10 en la figura 3.1) o hacia la línea de análisis (indicada por 11 en la figura 3.1). Todas las líneas y conductos por los que se mueven los iones se encuentran al vacío para evitar que pierdan energía (debido a choques con partículas del aire).

3.2 Preparación de las muestras

Las muestras que fueron analizadas por medio de RBS en este trabajo consistieron en pequeñas placas de sílice (SiO_2) de alta pureza, con una muy baja concentración de radicales OH de menos de 1 ppm e impurezas totales de menos de 20 ppm, e implantadas con iones de plata a energías de 2 MeV a diferentes ángulos de incidencia.

Las placas de sílice eran cuadrados con áreas entre 0.25 a 4.0 cm^2 y con espesor de 1 mm. Las caras de las placas estaban pulidas y fueron adquiridas a la empresa Nippon Silica Glass del modelo EDC.

Las placas fueron colocadas en la cámara de implantación del acelerador Pelletron para ser irradiadas con los iones de plata acelerados a una energía de 2 MeV. El esquema de la línea de implantación se muestra en la figura 3.2. En este caso el haz de iones de plata pasa primero por un deflector de campo eléctrico consistente en dos placas paralelas. Este deflector se utiliza para eliminar las partículas neutras que viajen junto con el haz. Luego los iones pasan a un sistema barredor de haz de tal manera que barren un área dentro de la cámara de implantación.

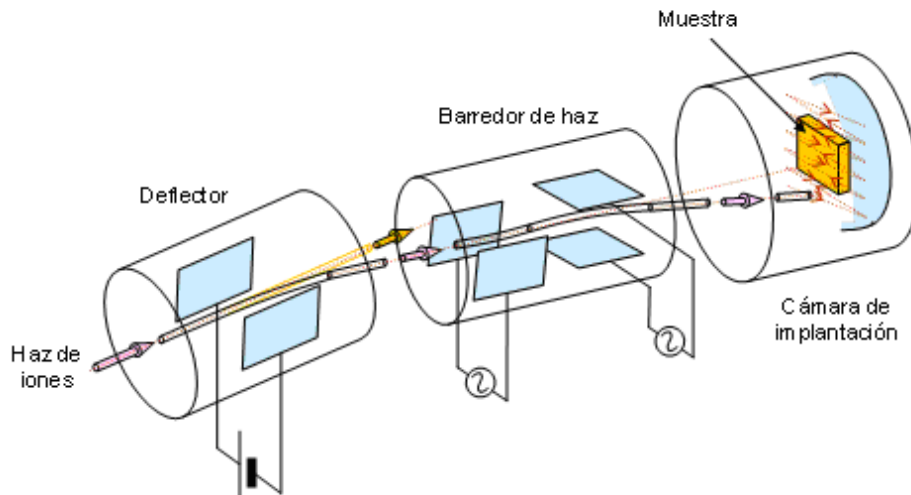


Figura 3.2 Esquema del sistema de implantación. El haz de iones primero es deflectado eléctricamente por dos placas paralelas dirigiéndolo al sistema barredor del haz. De esta manera las partículas eléctricamente neutras no llegan a la muestra. El sistema barredor de haz se utiliza para producir una distribución uniforme de iones en la muestra.

Las muestras fueron colocadas en la cámara de implantación sobre una platina de aluminio que puede inclinarse varios ángulos θ tal como se muestra en la figura 3.3. De esta manera los iones penetran en diferentes direcciones con respecto a la superficie de la muestra. Esta platina se encuentra aislada eléctricamente de la cámara y conectada a un medidor de corriente. A su vez, a este medidor se encuentra conectado a un integrador de corriente que nos dice cuál fue la carga total Q integrada durante la irradiación de la muestra junto con la platina.

La cantidad total de iones N que inciden en la zona de irradiación (incluye platina y muestra) es: $N = Q / (qe)$ en donde e es la carga eléctrica fundamental del electrón y q es el estado de carga del ion de plata (+1, +2,...).

Si la implantación es uniforme, entonces dividiendo entre el área de la muestra podemos obtener la densidad areal de iones que han quedado implantados en ella. De esta manera la fluencia en la muestra queda dada como $\Phi = (N / A) \cos \theta$.

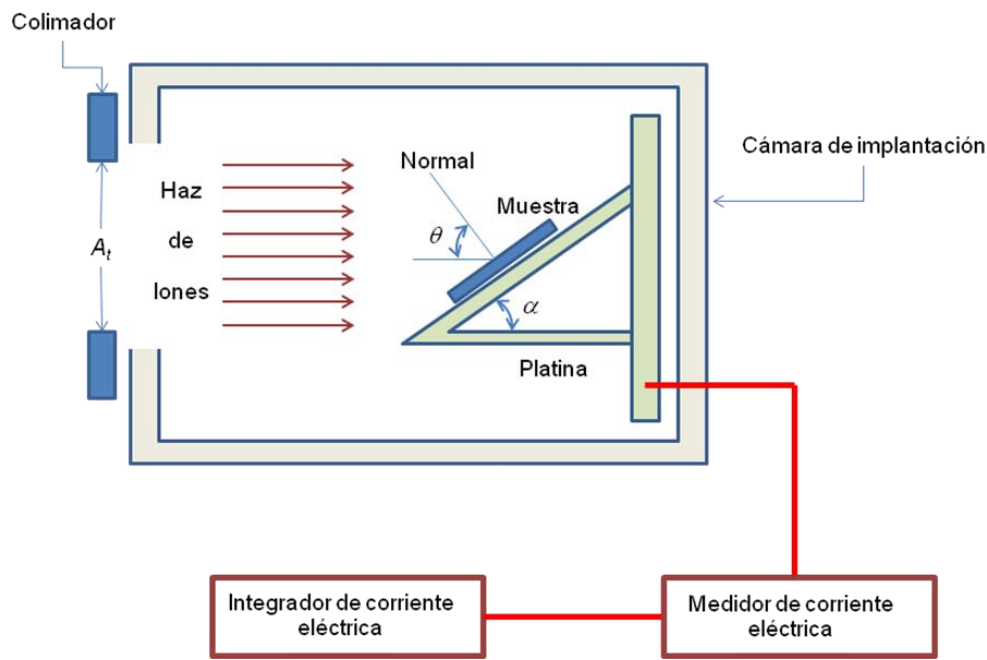


Figura 3.3 Diagrama de la cámara de implantación utilizada, donde se muestra la colocación de la muestra con respecto del haz de iones. La cantidad de iones que inciden en la muestra se determina a partir de la carga eléctrica total integrada.

Las placas de sílice fueron irradiadas con iones de Ag^{+2} ($q = 2$) y con energía de 2 MeV a diferentes corrientes de haz i . Como la potencia de la irradiación es proporcional a la densidad de corriente definimos la cantidad $W = i / (A_t \cos \theta)$, en donde A_t es el área total de irradiación definida por un colimador colocado a la entrada de la cámara de implantación. Esta cantidad está directamente relacionada con la energía por unidad de

tiempo depositada sobre la muestra. La temperatura de la cámara de implantación se mantuvo a temperatura ambiente durante el proceso de irradiación.

3.3 Análisis por espectroscopía de retrodispersión de iones (RBS)

La distribución de los iones de plata implantados en las placas de sílice se realizó utilizando la técnica de RBS (descrita en el capítulo 2) en la línea de análisis del acelerador Pelletron.

Para las mediciones de RBS se utilizaron iones de ${}^4\text{He}^{+2}$ a energías entre los 2.5 y 4.0 MeV, dependiendo de la profundidad a la que se encuentran depositados los iones implantados.

Para las muestras implantadas a $\theta = 0^\circ$ la profundidad a la que se encuentran los iones de Ag de 2 MeV es la más grande y se requiere de 4 MeV en el RBS para poder detectar a las partículas de ${}^4\text{He}^{+2}$ retrodispersadas por los átomos de Ag. Luego para las otras muestras implantadas a ángulos diferentes se utilizaron energías menores, hasta llegar a las implantadas con $\theta = 80^\circ$.

El diagrama de la cámara de análisis RBS se muestra en la figura 3.4. El haz de iones que viaja por la línea de vacío llega a un colimador circular que reduce el área transversal del haz a un círculo de 1.0 mm de diámetro. Este haz colimado se hace incidir sobre la muestra, la cual puede estar inclinada un ángulo θ_i definido entre la normal a la superficie de la muestra y el haz de iones. En todos los casos medidos en este trabajo el haz de iones de ${}^4\text{He}^{+2}$ incidió en dirección normal a la superficie de la muestra de tal manera que $\theta_i = 0^\circ$ (en el programa RUMP implica: $\theta_i = 0$).

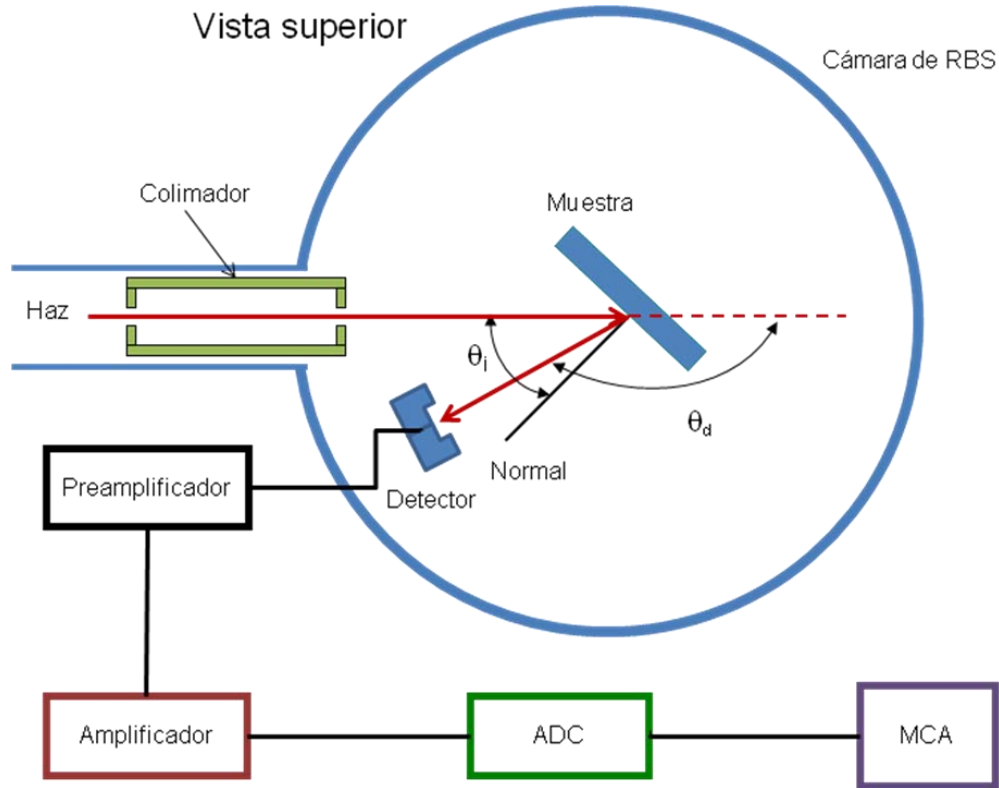


Figura 3.4 Diagrama de la cámara de análisis de RBS. El haz de $^4\text{He}^{+2}$ primero es colimado antes de hacerse incidir sobre la muestra. Los iones de $^4\text{He}^{+2}$ retrodispersados en el ángulo θ_d son registrados con un detector de partículas.

Los iones retrodispersados fueron detectados por medio de un detector de estado sólido de barrera superficial localizado a un ángulo θ_d definido entre la dirección del haz de iones y la posición del detector. Se utilizaron dos geometrías de detección: En unos casos se utilizó la geometría IBM donde la posición del ángulo del detector $\theta_d = 165^\circ$ con respecto a la dirección de incidencia del haz (en el programa RUMP implica: $\phi = 15^\circ$). En los otros casos se utilizó una geometría de Cornell con el detector de partículas justamente por debajo del haz de iones formando un ángulo $\theta_d = 168^\circ$ (en el programa RUMP implica: $\phi = 12^\circ$).

Los iones al llegar al detector de partículas generan una cantidad de carga eléctrica proporcional a la energía de la partícula. Esta carga eléctrica es integrada y transformada

a un pulso eléctrico por medio de un preamplificador. Luego la señal del preamplificador pasa a un amplificador que produce un pulso casi cuasigaussiano con una altura proporcional a la energía del ión detectado. Posteriormente este pulso pasa a un convertidor de señal analógica a digital (ADC) que luego es acumulada en un analizador multicanal (MCA) en donde se obtiene un histograma de la frecuencia de eventos registrados con una energía determinada. Es decir, en el MCA se obtiene el espectro de energía de los iones retrodispersados.

Finalmente los espectros fueron analizados por medio del programa RUMP [1,2]. En total fueron analizados 9 muestras implantadas a 0° , 2 implantadas a 45° , 11 implantadas a 63° y 2 implantadas a 80° .

En el Apéndice A se muestra como se efectuaron estos análisis utilizando el programa RUMP.

Referencias

[1] Doolittle, L.R. Nuclear Instruments and Methods B 15 (1986) 227.

[2] Página web del sitio oficial del software RUMP: <http://www.genplot.com/>.

Capítulo 4

Resultados

En las figuras 4.1 y 4.2 se muestran dos espectros típicos de RBS obtenidos en las muestras de sílice implantadas con plata a 0° utilizando iones de $^4\text{He}^{+2}$. La fluencia de iones de plata medida para la muestra de la figura 4.1 fue de 9.4×10^{16} átomos/cm², en tanto que para la figura 4.2 fue de 3.7×10^{16} átomos/cm². En estas dos figuras las flechas indican la posición correspondiente a la señal generada por la retrodispersión debida al oxígeno, silicio y plata en la superficie de la muestra. El espectro RBS de la figura 4.1 fue realizado a 4 MeV y el de la Figura 4.2 fue a 3 MeV. Estas energías fueron empleadas para poder obtener la señal debida a la plata sin superponerse sobre la generada por el sustrato de sílice (ver sección 2.8). De esta manera, en las dos figuras las cuentas que aparecen a la derecha del espectro corresponden a la plata implantada. También de estas dos figuras se puede apreciar que cuanto mayor es la energía de los iones de $^4\text{He}^{+2}$ más grande es la separación que hay entre la señal de la plata y la del sustrato de SiO_2 . Así para el RBS a 4 MeV esta separación es de aproximadamente 150 canales y para el RBS de 3 MeV es de aproximadamente 75 canales.

En la figura 4.1 se observan dos picos debidos a la restrodispersión por los átomos de plata. El pico más pequeño a la derecha corresponde a plata localizada justamente en la superficie de la muestra, en tanto que el pico más grande es el asociado con los iones implantados adentro del material. En el caso de la figura 4.2 no se observa este pico de plata superficial, solamente el de los implantados en el interior. En un principio la plata implantada a 2 MeV debe de quedar totalmente en el interior del sustrato, por este motivo la presencia de plata superficial solamente puede ser debida a difusión térmica. Es de esperarse que la muestra analizada en la figura 4.1 por corresponder a una mayor fluencia se haya calentado a mayor temperatura durante su implantación que el de la muestra de la figura 4.2. Esto es, para tener una mayor fluencia es necesario que el blanco esté sometido durante más tiempo al haz de iones y por tanto recibe más energía.

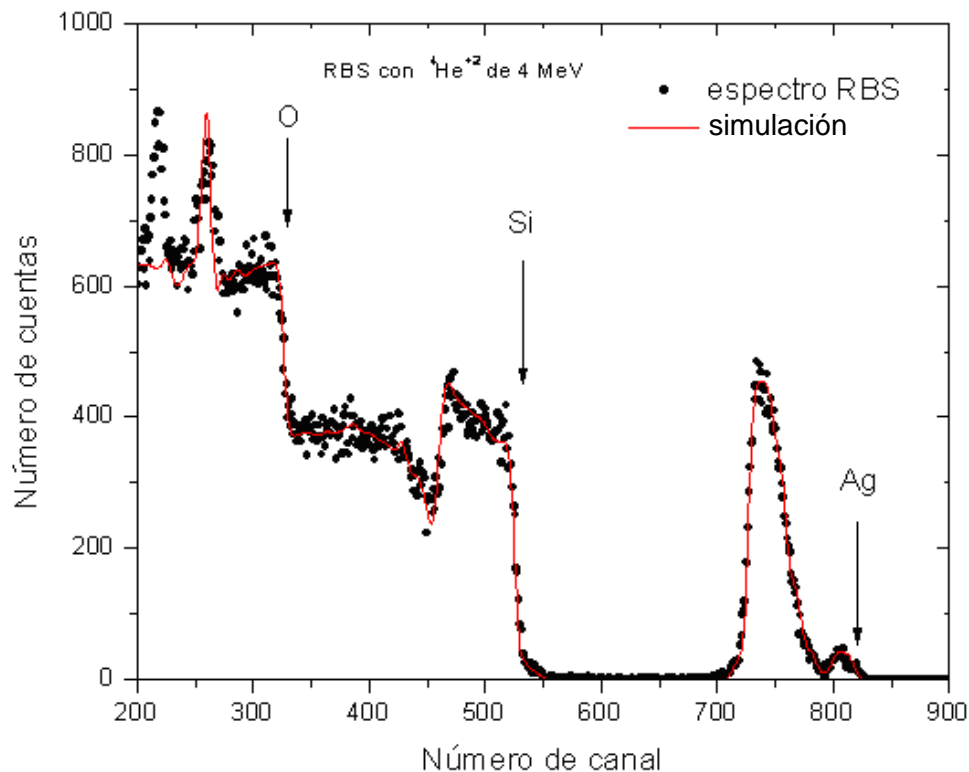


Figura 4.1 Espectro RBS de una muestra de SiO_2 implantada con Ag a energía de 2 MeV. Este espectro se obtuvo utilizando iones de ${}^4\text{He}^{+2}$ a una energía de 4 MeV. La fluencia de plata medida para esta muestra fue de 9.4×10^{16} átomos/cm².

Los picos de la figura 4.1 que aparecen en los canales 225 y 275 son debidos a resonancias por dispersión de elástica de iones en átomos de oxígeno y carbón (presente en la superficie de la muestra como suciedad). Esto ocurre cuando los iones de ${}^4\text{He}^{+2}$ tienen energías suficientes que le permiten superar la barrera coulombiana de los núcleos atómicos del blanco e interactuar con la “estructura” energética nuclear. Estos iones dispersados no cumplen con la fórmula de Rutherford y por lo tanto se describen por medio de secciones eficaces no-Rutherford [1,2]. La presencia de estas resonancias no afecta el análisis general de la muestra, ni altera el resultado de la concentración de átomos medidos en la muestra.

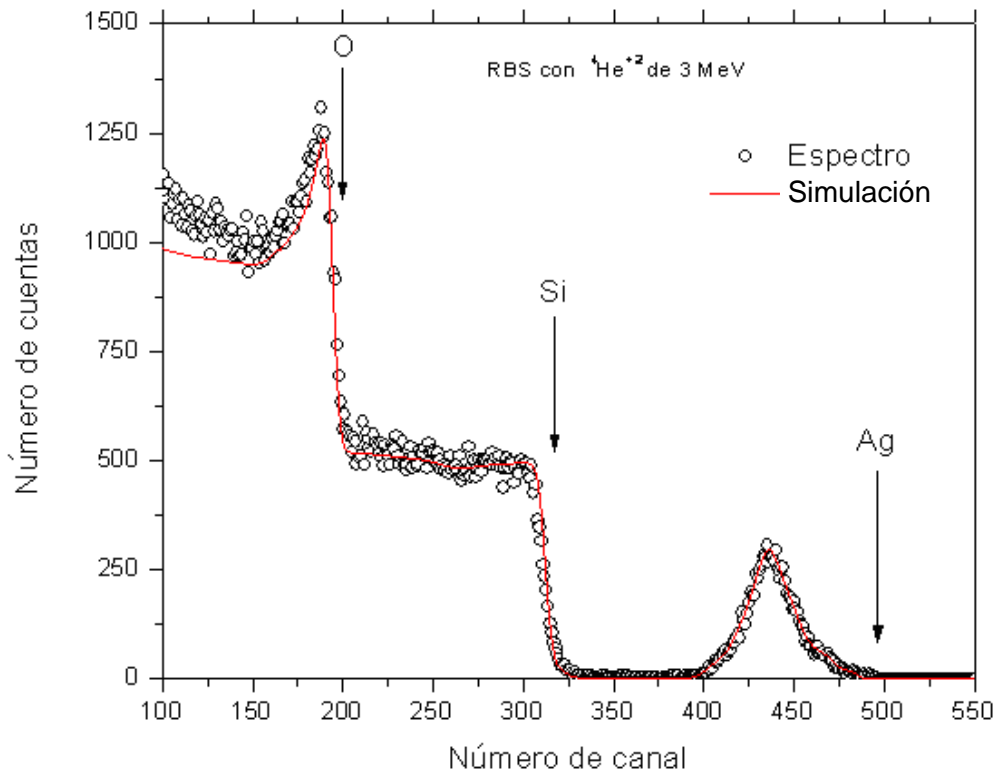


Figura 4.2 Espectro RBS de una muestra de SiO_2 implantada con Ag a energía de 2 MeV. Este espectro se obtuvo utilizando iones de ${}^4\text{He}^{+2}$ a una energía de 3 MeV. La fluencia de plata medida para esta muestra fue de 3.7×10^{16} átomos/cm².

A partir de las simulaciones con el programa RUMP para cada caso se obtiene la cantidad y la distribución de los iones de plata en el interior de las placas cuadradas de sílice. El procedimiento empleado se explica en detalle en el Apéndice A. En las figuras 4.3 a 4.6 se muestran ejemplos de las distribuciones de plata obtenidas para las muestras implantadas a 0°, 45°, 63°, 80° respectivamente. En este caso se seleccionaron las distribuciones más cercanas a las predichas por las simulaciones con el programa SRIM y que se muestra con una línea continua en cada una de las figuras anteriores. También en ellas se muestra la simulación del perfil de daño predicho con el programa SRIM, en donde en este caso se calculan las vacantes atómicas producidas en el material debido a la irradiación con iones que provocan defectos en la muestra como son las vacancias, intersticiales y pares de Frenkel.

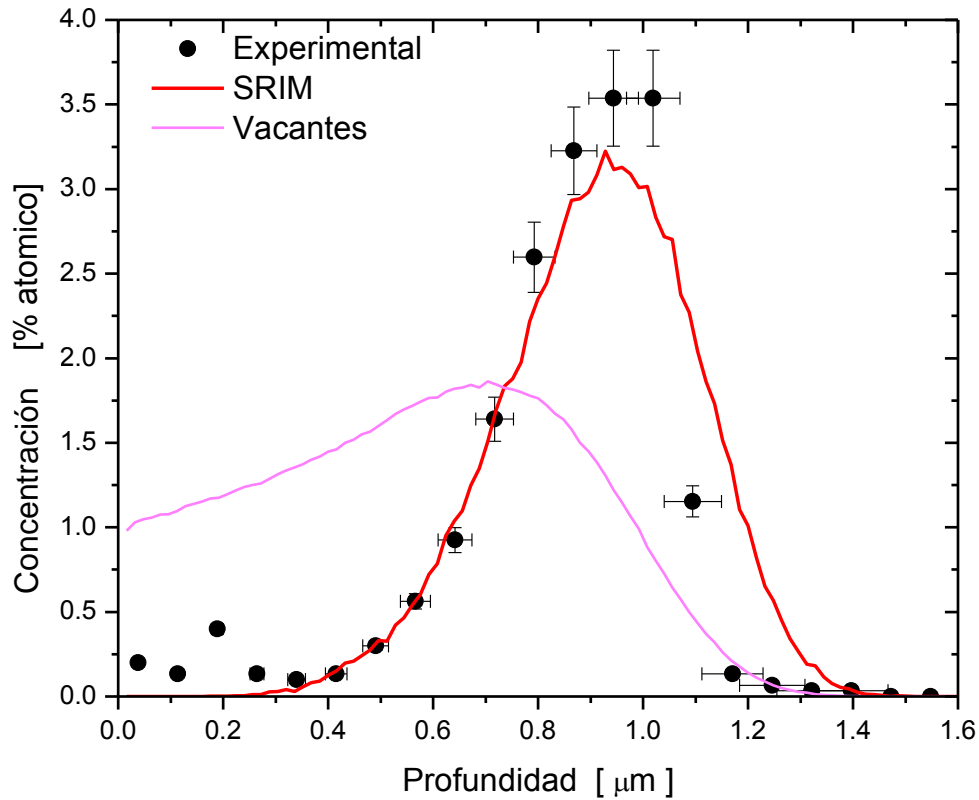


Figura 4.3 Distribución de los iones de plata implantados a 2 MeV a un ángulo de incidencia de 0° en el interior de la matriz de sílice para la muestra cuya distribución se asemejó más a la predicha por el programa SRIM. En la gráfica también se muestra la distribución de daño calculada con el programa SRIM. Cuando la irradiación se produce a este ángulo de incidencia los átomos de plata alcanzan la mayor profundidad adentro de la matriz.

En las figuras 4.3 a 4.6 se puede observar que la mayor intensidad de daño producido en la muestra se genera un poco antes del alcance promedio de los iones de plata en la sílice. Esto es debido a que al disminuir la energía de los iones aumenta el frenado nuclear, y por tanto se produce un mayor desplazamiento de átomos de oxígeno y silicio en la matriz.

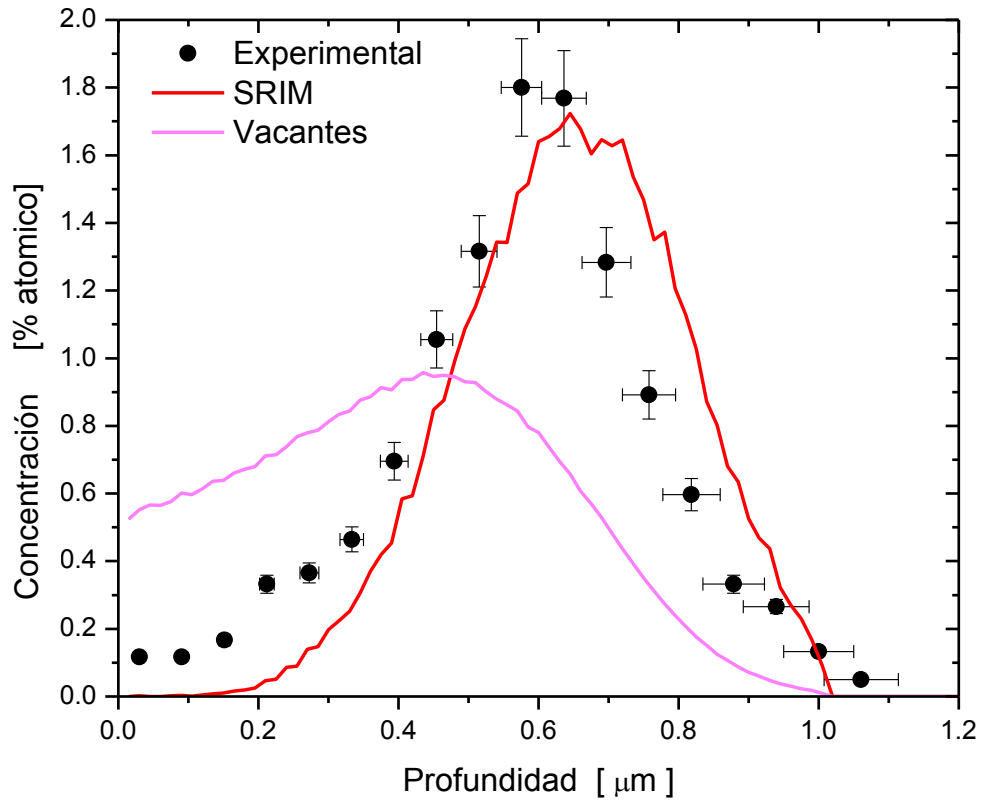


Figura 4.4 Distribución de los iones de plata implantados a 2 MeV a un ángulo de incidencia de 45° en el interior de la matriz de sílice para la muestra cuya distribución se asemejó más a la predicha por el programa SRIM. En la gráfica también se muestra la distribución de daño calculada con el programa SRIM.

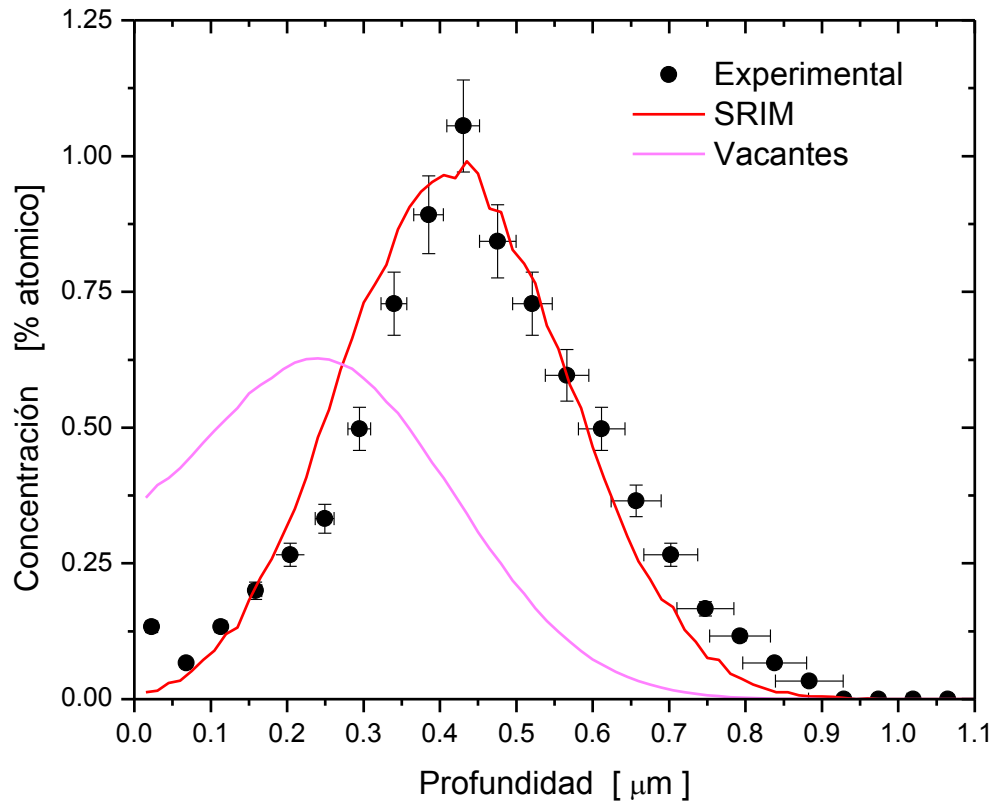


Figura 4.5 Distribución de los iones de plata implantados a 2 MeV a un ángulo de incidencia de 63° en el interior de la matriz de sílice para la muestra cuya distribución se asemejó más a la predicha por el programa SRIM. En la gráfica también se muestra la distribución de daño calculada con el programa SRIM.

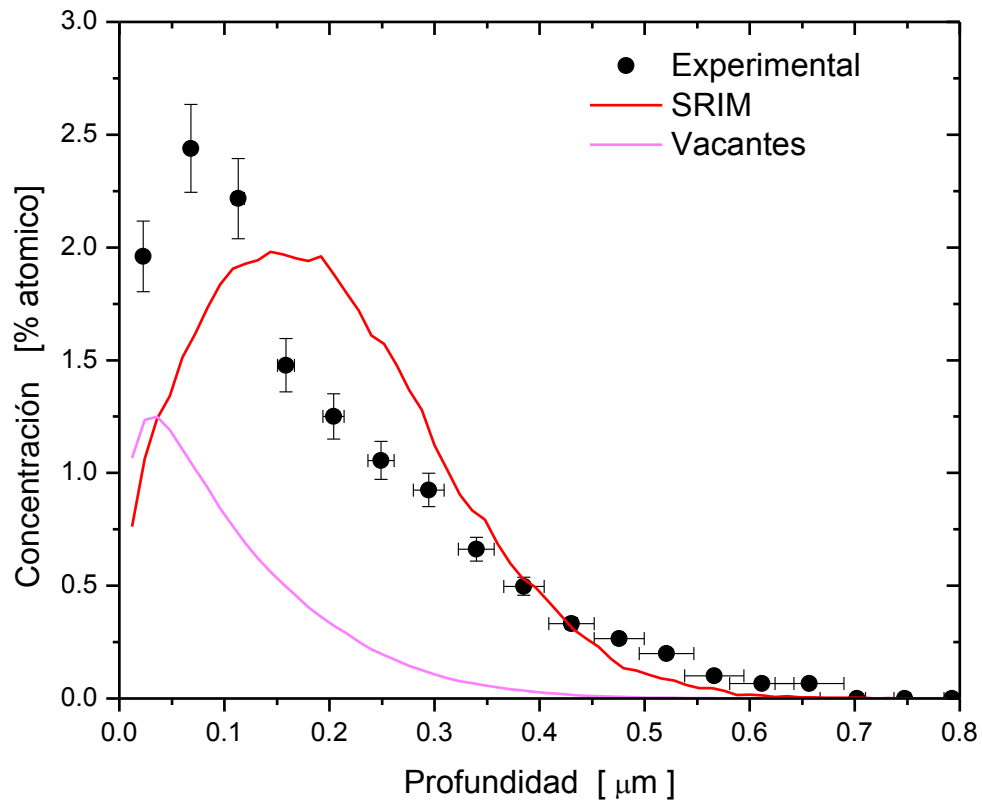


Figura 4.6 Distribución de los iones de plata implantados a 2 MeV a un ángulo de incidencia de 80° en el interior de la matriz de sílice para la muestra cuya distribución se asemejó más a la predicha por el programa SRIM. En la gráfica también se muestra la distribución de daño calculada con el programa SRIM. En esta figura se observa que la implantación de los iones se encuentra muy cercana a la superficie en comparación con las gráficas anteriores.

Como resultado de todas las medidas por RBS se encuentra que las fluencias medidas fueron diferentes de las fluencias calculadas a partir de la carga integrada en el blanco durante la irradiación con iones de plata. En la figura 4.7 se muestra graficada la relación entre la fluencia medida Φ_m y la fluencia nominal Φ_n calculada con la carga. Esta fluencia medida es la que nos da el valor real de la cantidad de iones de plata que fueron implantados en la muestra. Hay que tener en cuenta que durante el proceso de implantación la integración de carga eléctrica en el blanco no es simple cuando la matriz está compuesta por un material dieléctrico, como es el caso de la sílice. Cuando se irradia con iones una muestra dieléctrica, esta se va cargando eléctricamente hasta que se generan descargas con otras partes de la cámara de implantación no conectadas al portamuestras y que dan como resultado una medida errónea de la carga total acumulada en el blanco.

Para las muestras estudiadas en este trabajo se encuentra que en promedio la fluencia medida resulta ser un 62% más pequeña que la fluencia nominal. También puede observarse que la relación entre la fluencia medida y la nominal es prácticamente lineal. Con ayuda del ajuste de una recta por mínimos cuadrados se determina para la plata esta relación como:

$$\Phi_m = 0.362 \Phi_n - 0.1 \quad (4.1)$$

Esta última relación es muy importante porque nos permite poder estimar cual debe de ser la fluencia nominal integrando carga que se necesita acumular en un blanco para obtener una fluencia real esperada de iones de plata.

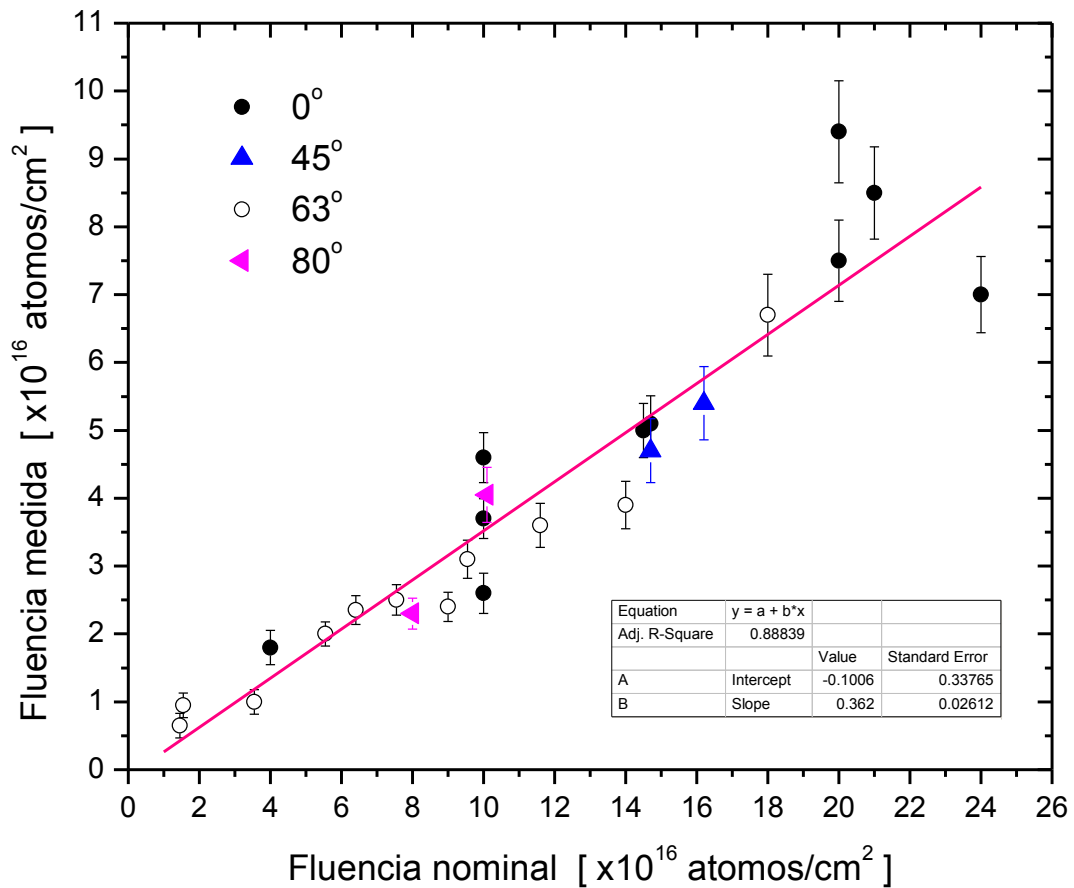


Figura 4.7 Gráfica de la fluencia de iones de plata medida con RBS contra su correspondiente valor nominal obtenido a partir de la integración de carga en el blanco durante la implantación de los iones a 2 MeV y diferentes ángulos de incidencia. En esta gráfica se muestra la relación lineal de la fluencia medida con la fluencia nominal.

También a partir de las simulaciones con el programa RUMP se obtuvieron los alcances promedio de los iones en la matriz de sílice para los diferentes ángulos de implantación. En la figura 4.8 se muestran estos alcances para cada ángulo en términos de la fluencia medida en la muestra. En el caso de las implantadas a 0° y 63° (son de las que tenemos más medidas) se observa una tendencia a incrementar el alcance a medida que se aumenta la fluencia en las muestras. Para esto nos ayudamos con una línea recta dibujada directamente sobre los puntos experimentales de los alcances a 0°.

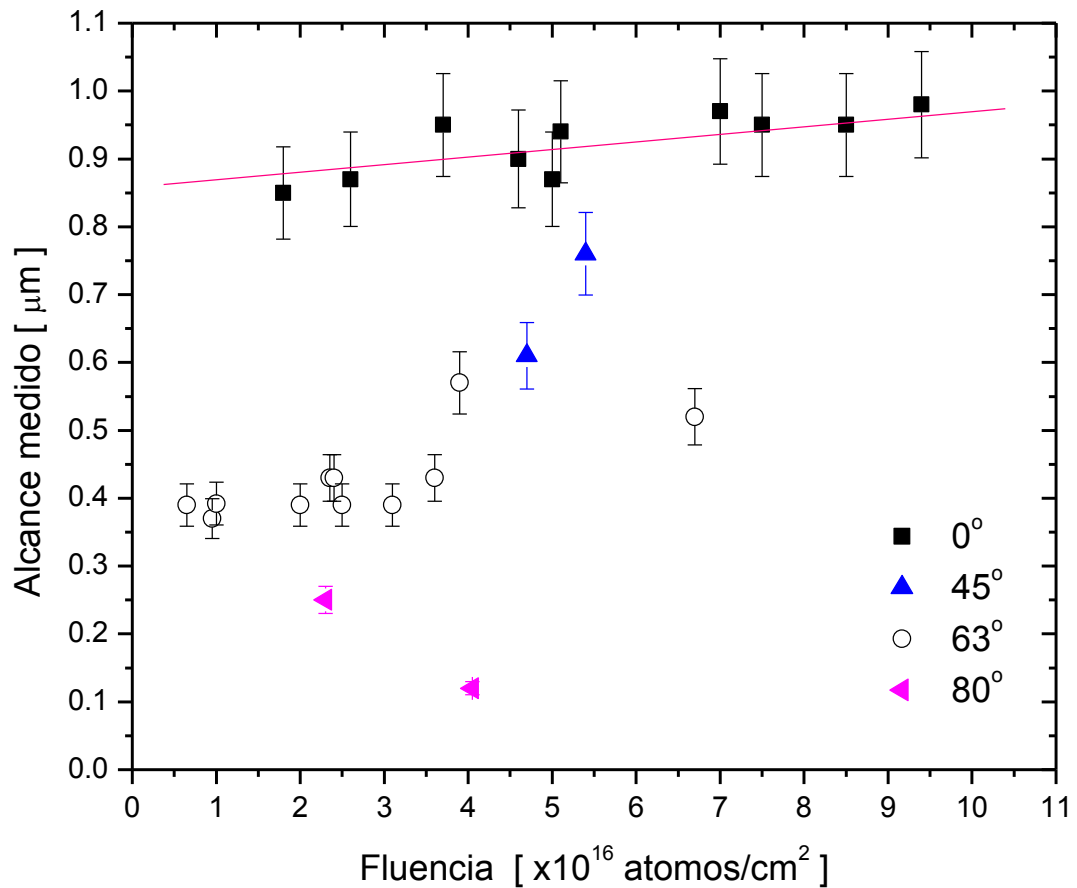


Figura 4.8 Gráfica que muestra el alcance promedio de los iones de plata implantados a 2 MeV con diferentes ángulos de incidencia sobre una matriz de sílice en función de la fluencia real medida en las muestras. Con la línea recta se muestra una tendencia al aumento en el alcance con el incremento en la fluencia.

En la figura 4.9 se muestran graficados el promedio de los alcances medidos para cada conjunto de muestras en función del ángulo al que fueron implantadas. Se puede observar que aunque los alcances varían de una muestra a otra (ver figura 4.8), el promedio coincide con el cálculo teórico obtenido con el programa SRIM. Esto es una prueba del carácter estadístico de la implantación de iones. Con una línea punteada se muestra también a la función coseno, la cual ajusta bien a los promedios experimentales. Esto nos indica que los iones viajan la misma longitud en el interior de la matriz

independientemente del ángulo de incidencia con el que entran en la muestra, aunque quedan depositados a diferente profundidad.

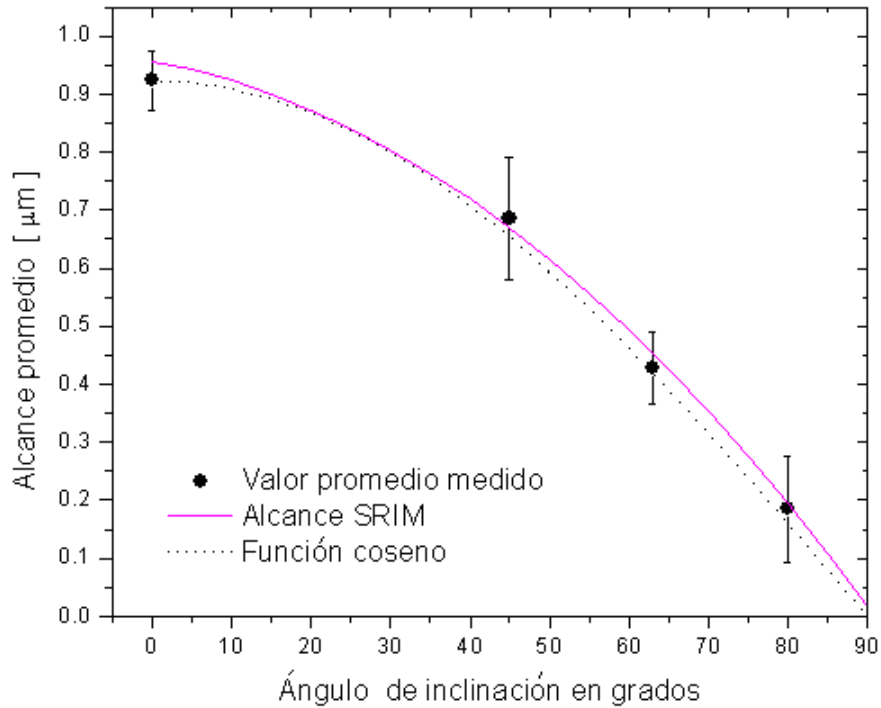


Figura 4.9 Promedio de los alcances medidos para iones de Ag^{+2} implantados a 2 MeV sobre SiO_2 en función de los ángulos de incidencia sobre la muestra. La línea continua muestra los alcances calculados con el programa SRIM y la línea punteada muestra a la función coseno.

En la figura 4.10 se muestran las anchuras de las distribuciones medidas en términos del ancho a la mitad del máximo, FWHM (Full Width at Half Maximum). En la figura 4.11 se muestra el valor promedio del FWHM para cada conjunto de muestras implantadas a determinado ángulo de incidencia. De esta última figura puede observarse que el ancho de las distribuciones es mayor que el estimado con el programa SRIM. Este efecto puede deberse a que la plata puede difundirse en el interior de la muestra durante la implantación debido a efectos térmicos que no son considerados en el cálculo del programa SRIM.

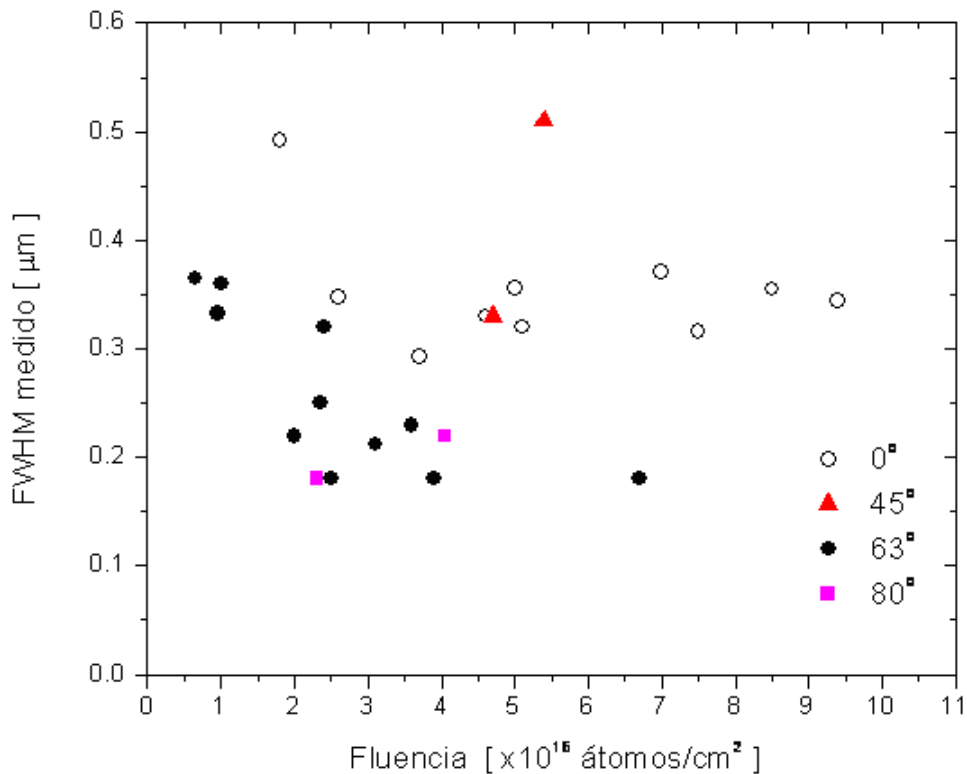


Figura 4.10 Anchuras de las distribuciones en términos del FWHM con respecto a la fluencia medida para los iones de plata implantados a 2 MeV con varios ángulos de incidencia sobre matrices de sílice.

Como ya fue mencionado antes, en las figuras 4.3 a 4.6 se comparan las distribuciones de plata a partir de simulaciones del programa SRIM con las distribuciones experimentales obtenidas que mejor se ajustan para cada conjunto de muestras implantadas a cada ángulo de incidencia. En los demás casos las distribuciones medidas tuvieron menor concordancia con el cálculo del programa. En términos generales, todas las distribuciones medidas estuvieron un poco corridas hacia la superficie. Además, hubo mayor concentración de plata hacia la superficie que la estimada con el SRIM. Esto dio como resultado que los FWHM medidos fueran más grandes que los calculados. El motivo por el cual se encuentra más plata hacia la superficie tiene que estar relacionado con la difusión de plata en la sílice y la mayor producción de daño poco antes del alcance de los

iones. De esta manera, como hay mayor daño (más cantidad de vacantes en la matriz) hacia la superficie, es de esperarse que por calentamiento durante la irradiación los iones de plata se difundan más fácilmente hacia donde hay vacantes.

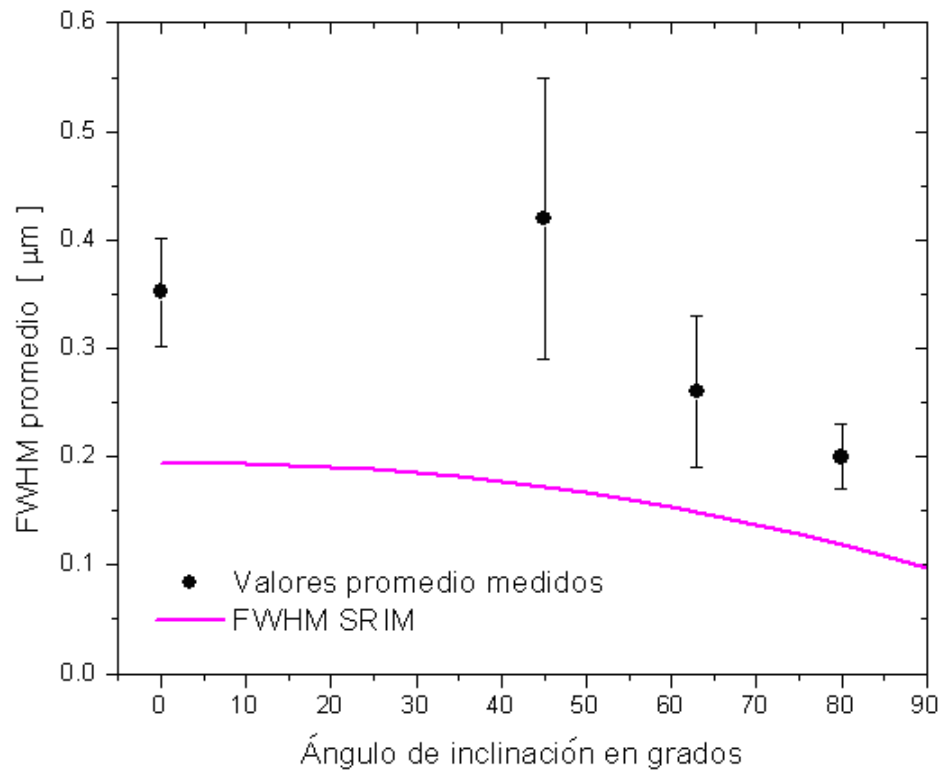


Figura 4.11 Promedio de las anchuras de las distribuciones para cada conjunto de muestras implantado a determinado ángulo de incidencia. La anchura está dada en términos del FWHM. La línea continua muestra el cálculo del programa SRIM para el FWHM de iones de plata implantados con 2 MeV a diferentes ángulos de incidencia sobre una matriz de sílice.

Referencias

- [1] J.E.E. Baglin and J.S. Williams, "*High energy ion scattering spectrometry*", publicado en "*Ion beam for material analysis*". Editado por J.R. Bird y J.S. Williams, Academic Press, Sidney, 1989,pg. 143.
- [2] R.P.Cox, J.A. Leavitt and L.C. McIntyre, Jr., "*Non-Rutherford elastic backscattering cross sections*", publicado en "*Handbook of modern ion beam materials analysis*". Editado por J.R. Tesmer y M. Nastasi, Materials Research Society, Pittsburg, 1995.

Conclusiones

De los resultados obtenidos se puede concluir lo siguiente:

Se encuentra que las fluencias medidas con RBS no coinciden con las que se determinan a partir de la carga eléctrica acumulada al momento de irradiar los sustratos de sílice. El valor real medido es entre un 60% – 70% más pequeño que el integrado en la cámara de irradiación. Esto es debido a la propiedad dieléctrica de las matrices irradiadas, que no permite medir con exactitud la corriente eléctrica en el blanco. Además, es un indicativo de que a pesar de contar con un sistema de supresión de electrones en la cámara de implantación, este no resulta muy efectivo al momento de irradiar muestras dieléctricas como lo es la sílice.

En el futuro deberá de diseñarse un nuevo sistema de supresión de electrones para la cámara de implantación del Pelletron del IFUNAM, con la finalidad de poder efectuar medidas de corriente eléctrica del haz de iones más realistas durante la irradiación de blancos dieléctricos.

Con base en la línea ajustada por mínimos cuadrados a los datos de la figura 4.7 y reportada en la ecuación (4.1) se tiene una relación que permite estimar la cantidad de carga eléctrica que hay que acumular para obtener la fluencia real deseada al irradiar una matriz de sílice con iones de plata en la cámara de implantación del acelerador Pelletron. En principio esta relación sólo es válida para la irradiación de sílice con iones de plata.

Los alcances obtenidos experimentalmente de los análisis RBS coinciden en promedio con los simulados por el programa SRIM. Así pues, se tiene que este programa resulta muy bueno para el cálculo de alcances de iones de plata en sílice. Por el contrario, los resultados experimentales para el ancho de la distribución de iones implantados a partir del FWHM no coinciden con los del programa SRIM. En nuestro caso los valores experimentales resultaron ser mucho más grandes que los estimados por el programa.

Al comparar las distribuciones de iones obtenidas de los espectros RBS con las simuladas con el SRIM, además del ancho, encontramos que los átomos de plata se encuentran

distribuidos en mayor cantidad hacia la superficie de la muestra. Al ver la distribución de vacantes (o daño) que simula el SRIM, podemos suponer que la plata al momento de ser implantada, tiende a moverse hacia la zona de mayor daño por procesos de difusión térmica debidos al calentamiento que sufre la muestra al ser irradiada. Esta zona de daño que se localiza más cerca de la superficie de la matriz. Lamentablemente en este trabajo no fue posible medir la temperatura del sustrato porque la utilización de un termopar afecta la colección de carga durante la irradiación. Este proceso podrá ser mejor estudiado una vez que se cuente con equipos de detección infrarroja para determinar la temperatura de la superficie del sustrato durante la irradiación

Apéndice A

En este apéndice se muestra con detalle cómo se efectuaron las simulaciones con el programa RUMP para analizar los espectros de RBS medidos en este trabajo.

Primero fue necesario efectuar el RBS de las muestras y de un blanco de SiO₂ puro para calibrar la energía correspondiente a cada canal del espectro. Tomando el espectro del SiO₂ puro se determinaba la posición del canal del escalón del oxígeno y del silicio (a la mitad de la altura de cada escalón). Luego a cada uno de estos dos canales se le asocia la energía correspondiente a los iones de ⁴He⁺² retrodispersados en la superficie de la muestra por el oxígeno y el silicio respectivamente. Con este par de puntos se determina la ecuación de una recta que nos dice la energía en función del número de canal. Estas energías dependen del ángulo de retrodispersión utilizado experimentalmente.

Luego, con el programa RUMP se ingresaban todos los parámetros experimentales utilizados junto con la calibración en energía del espectro. Estos parámetros experimentales eran: La energía del proyectil, el tipo de partícula (⁴He⁺² en este caso), el ángulo de retrodispersión (phi), el ángulo de inclinación de la muestra (the), la geometría utilizada (Cornell o IBM), etc. Una vez ingresados en el programa se mantuvieron fijos.

Una vez incorporados los datos experimentales, se procede a crear en el programa una serie de capas con determinadas concentraciones de plata. Para los análisis realizados en este trabajo se consideraba inicialmente una matriz de SiO₂ pura dividida en múltiples capas con una densidad areal de átomos fija. Comúnmente se emplearon capas de entre 300×10^{15} a 500×10^{15} átomos/cm². Luego a cada capa se le asignaba una cantidad proporcional de átomos de oxígeno, silicio y plata. Una vez dada esta distribución de átomos para todas las capas se procedía a efectuar la correspondiente simulación del espectro de RBS que se generaría bajo estas condiciones, el cual se compara con el experimental. Este proceso se repite hasta que la simulación sea lo más parecida al espectro de RBS real.

El trabajo final de este proceso se resume en una tabla donde se muestran las densidades areales de cada capa con su correspondiente proporción de los elementos oxígeno, silicio y plata. En la tabla A1 se muestra un ejemplo de cómo quedaban reportados estos datos.

Tabla A1

Número de capa	Densidad areal [10^{15} at/cm ²]	Proporción sin normalizar			Densidad areal acumulada [10^{15} at/cm ²]	Concentración			Cantidad de plata	
		O	Si	Ag		O	Si	Ag	[10^{15} at/cm ²]	% atómico
1	400	2	1	0.001	0	0.6664	0.3332	0.0003	0.133	0.033
2	400	2	1	0.002	400	0.6662	0.3331	0.0007	0.266	0.067
3	400	2	1	0.002	800	0.6662	0.3331	0.0007	0.266	0.067
4	400	2	1	0.003	1200	0.6660	0.3330	0.0010	0.400	0.100
5	400	2	1	0.005	1600	0.6656	0.3328	0.0017	0.666	0.166
6	400	2	1	0.006	2000	0.6653	0.3327	0.0020	0.798	0.200
7	400	2	1	0.007	2400	0.6651	0.3326	0.0023	0.931	0.233
8	400	2	1	0.009	2800	0.6647	0.3323	0.0030	1.196	0.299
9	400	2	1	0.009	3200	0.6647	0.3323	0.0030	1.196	0.299
10	400	2	1	0.01	3600	0.6645	0.3322	0.0033	1.329	0.332
11	400	2	1	0.012	4000	0.6640	0.3320	0.0040	1.594	0.398
12	400	2	1	0.028	4400	0.6605	0.3303	0.0092	3.699	0.925
13	400	2	1	0.04	4800	0.6579	0.3289	0.0132	5.263	1.316
14	400	2	1	0.05	5200	0.6557	0.3279	0.0164	6.557	1.639
15	400	2	1	0.065	5600	0.6525	0.3263	0.0212	8.483	2.121
16	400	2	1	0.08	6000	0.6494	0.3247	0.0260	10.390	2.597
17	400	2	1	0.108	6400	0.6435	0.3218	0.0347	13.900	3.475
18	400	2	1	0.04	6800	0.6579	0.3289	0.0132	5.263	1.316
19	400	2	1	0.016	7200	0.6631	0.3316	0.0053	2.122	0.531
20	400	2	1	0.012	7600	0.6640	0.3320	0.0040	1.594	0.398
21	400	2	1	0.007	8000	0.6651	0.3326	0.0023	0.931	0.233
22	400	2	1	0.004	8400	0.6658	0.3329	0.0013	0.533	0.133
23	400	2	1	0.002	8800	0.6662	0.3331	0.0007	0.266	0.067
24	400	2	1	0.001	9200	0.6664	0.3332	0.0003	0.133	0.033
25	400	2	1	0	9600	0.6666	0.3333	0.0000	0.000	0.000

Matriz

Fluencia: 67.910

En la primer columna se muestra el número correspondiente a cada capa en la que fue dividida la muestra. La capa con el número 1 corresponde a la primera que está en la superficie de la muestra. La segunda columna indica el “espesor” de cada capa en términos de la densidad areal en unidades de 10^{15} átomos/cm². Luego en las siguientes tres columnas se dan las proporciones sin normalizar de los elementos oxígeno, silicio y plata para cada capa. En la sexta columna se muestra la “profundidad” a la que se

encuentra cada capa en términos de la densidad areal. En las siguientes tres columnas se muestra la concentración de cada elemento correspondiente a cada una de las capas. Esta se obtiene normalizando las proporciones en las columnas tercera a la quinta para los tres elementos considerados. En la penúltima columna se obtiene la cantidad de átomos de plata en unidades de 10^{15} átomos/cm² para cada capa, como resultado de multiplicar la concentración de plata por la segunda columna de la densidad areal de cada capa. La suma de todas estas cantidades nos da la fluencia total de átomos de plata que fueron implantados y este dato se muestra al final de la tabla. Finalmente en la última columna se muestra el porcentaje atómico de átomos de plata que hay en cada capa, dado como el producto de la concentración de la plata por 100.

Para obtener la profundidad de cada una de estas concentraciones en unidades de longitud se divide a la “profundidad” o densidad areal acumulada entre la densidad atómica del blanco. Para todas las muestras analizadas en este trabajo el porcentaje de plata siempre fue menor al 5% para cada capa (como puede verse en la última columna de la tabla A1). Por este motivo se puede considerar que la densidad de la muestra es la misma que la de la matriz de sílice original. De esta manera se puede pasar de la “profundidad” en unidades de átomos/cm² a unidades de longitud.

Para el tipo de sílice empleada en este trabajo, su densidad atómica fue de 6.22×10^{22} átomos/cm³. (La densidad atómica N se obtiene como: $N = \rho N_0 / A$, en donde ρ es la densidad de masa, N_0 el número de Avogadro y A es la masa atómica del material).

A partir de las concentraciones para cada capa y su correspondiente valor en profundidad fue posible obtener las distribuciones de los átomos de plata implantados en las muestras, tal como se muestran en las figuras 4.3 a 4.6.