

PERDA DE ENERGIA DE IONS RÁPIDOS DE HE EM SI SOB REGIME DE CANALIZAÇÃO

M. Barbatti*, N.V. de Castro Faria, R.J. Donangelo
Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ

J.C. Acquadro
Universidade de São Paulo - USP

* IF - UFRJ, Pós Graduação, Cx. Postal 68.528,
21941-590, Rio de Janeiro, RJ, Brazil.
E-mail: barbatti@if.ufrj.br.

Palavras-chave: *channeling, energy loss*

RESUMO

Medimos a perda de energia por unidade de comprimento, na canalização de íons de He a 2.0 MeV em Si cristalino, numa varredura angular do plano {001}, entre o canal axial [100] e o [110], detalhando a passagem do plano ao eixo. A perda mostrou-se coerente com dados da literatura e a medida da abertura angular dos canais axiais feita por perda de energia foi significativamente menor que a feita por retroespalhamento. Este efeito é discutido a partir do modelo fenomenológico de Lindhard-Jin-Gibson (LJG).

ABSTRACT

We have measured the energy loss of 2.0 MeV He ions channeled in Si. Angular scanings are made in the {001} plane from [110] axis to [100] axis. The energy loss was in good agreement with the reference data, although the channel angular width measured by energy loss was significantly smaller than the channel angular width measured by Rutherford backscattering. This effect is discussed on basis of the Lindhard-Jin-Gibson phenomenological model (LJG).

1. INTRODUÇÃO

Partículas carregadas atravessando a matéria são freadas numa taxa dependente de sua energia, $S(E) = (dE/dx)$. Num alvo cristalino, esta taxa pode variar de acordo com a direção de incidência da partícula no cristal, diminuindo quando esta direção coincide com as direções cristalinas de mais baixos índices. Neste caso, o ordenamento geométrico da matéria alinha os átomos em longas fileiras, formando canais axiais ou planares. Uma partícula positivamente carregada será guiada pelos campos eletrostáticos dos átomos das paredes destes canais, por regiões de mais baixa densidade eletrônica e de mais baixa probabilidade de colisão frontal com qualquer átomo. Este fenômeno é chamado canalização^{1,2}.

Nossa principal motivação para o estudo da perda de energia sob condições de canalização é a possibilidade, junto às análises teóricas, de compreender as interações entre os íons e a distribuição eletrônica na matéria cristalina.

A canalização permite um certo controle sobre as distribuições de parâmetros de impacto dos íons com o material, revelando detalhes sobre o caráter binário (elétron-íon, átomo-íon), ou o caráter coletivo (íon-gás de elétrons, íon-cristal) desta interações. A canalização permite também um estudo sistemático das várias contribuições para o potencial sentido pelo íon: contribuições coulombianas blindadas, contribuições de elétrons atômicos (camadas internas), contribuição de elétrons de valência, etc.

Com o objetivo de estudar a forma das interações íon-matéria, este trabalho visa ajudar a formar e atualizar uma base de dados experimentais que permita a comparação sistemática, na variação da energia e na variação do ângulo de incidência. Apresentaremos resultados experimentais para a dependência com o ângulo de incidência da perda de energia de íons de He⁺ a 2.0 MeV na canalização no plano {001} do Si. Estudaremos mais cuidadosamente a perda de energia próxima aos eixos [100] e [110], ambos contidos no plano {001}.

2. EXPERIMENTO

Os experimentos foram realizados no Pelletron de 1.6 MV do Instituto de Física da Universidade de São Paulo, através da técnica de retroespalhamento (Rutherford backscattering-RBS)³. O feixe de íons, colimado por um sistema de fendas numa área de cerca de 0.8 mm², penetra uma câmara RBS na qual o alvo é mantido fixo num suporte de Al coberto com uma fina camada de Au (cerca de 800 Å de espessura). A razão para haver a camada de Au ficará clara mais adiante. O suporte, ligado a um goniômetro de dois eixos (0.01°), permite a rotação do alvo no ângulo polar θ e no azimutal ϕ .

A detecção é feita por um detector do tipo barreira de superfície mantido fixo num ângulo de 170° com relação à direção de incidência do feixe. O detector produz um pulso que é proporcional à energia da partícula detectada. Este pulso é amplificado e classificado por um analisador multicanal. Como resultado, obtemos um gráfico do número de partículas retroespalhadas em 170° em função da energia quando elas atingem o detector. Este gráfico é chamado espectro RBS (figura 1).

O alvo utilizado foi um monocristal de Si, com espessura $L = (6700 \pm 100) \text{ \AA}$, produzido pela *Spire Corporation*, utilizando técnicas de crescimento epitaxial, seguidas de debastamento químico. O Au no suporte do alvo — muito mais pesado que o Si — marca de forma muito característica o espectro RBS, permitindo a leitura da energia, na detecção, das partículas retroespalhadas pelos átomos de Au na interface Au-Si (figura 1). Esta informação é a base para o cálculo da perda de energia. Poderíamos também utilizar a energia das partículas retroespalhadas pelos átomos de Si na interface, porém, devido à semelhança entre as massas do Si e do Al, estes sinais aparecem misturados no espectro RBS.

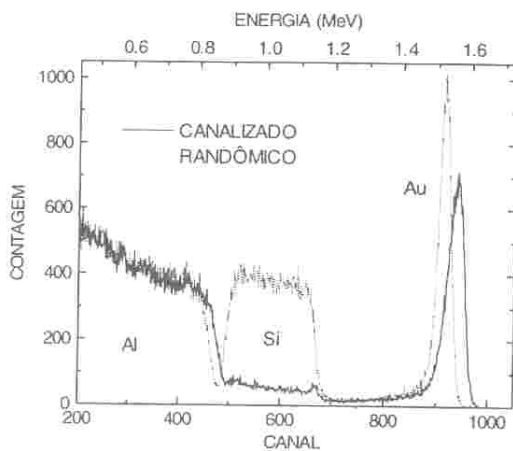


Figura 1 - Espectros RBS para He em Si a 2 MeV.

O alvo foi produzido por crescimento epitaxial ao longo da direção [100]. Assim, orientando o cristal para que o feixe o atinja numa normal à sua face, estaremos próximos à canalização no [100]. Varreduras angulares do número de partículas retroespalhadas, ajudam-nos a localizar mais exatamente o canal. A determinação do [110] é feita, a partir da determinação do [100], girando o cristal em $\theta = 45^\circ$. Novas varreduras angulares permitem ajustar mais cuidadosamente a incidência do feixe no canal. A simetria de rotação do canal [100] não nos permite fixar o ângulo azimutal ϕ , isto é feito na localização do canal [110]. O feixe de íons é mantido próximo ao plano {001} se mantivermos o ângulo ϕ constante e igual ao determinado na localização do canal [110], e girarmos θ em qualquer ângulo entre os canais [100] e [110]. A localização exata do plano deve também ser feita por varreduras do retroespalhamento.

3. ANÁLISE DE DADOS

Para obter a taxa de perda de energia, reconstituímos as energias em função das trajetórias, das partículas retroespalhadas na interface Au-Si (figura 2). Um íon com energia inicial E_0 é suavemente freado conforme atravessa a matéria. Imediatamente antes de ser retroespalhado nos átomos de Au da interface ele tem energia

$$E_1 = E_0 - \Delta E_{in} \quad (1)$$

Imediatamente após ao retroespalhamento, sua energia é dada por

$$E_2 = kE_1, \quad (2)$$

onde o fator cinemático k depende apenas das massas M_1 e M_2 do íon e do átomo, respectivamente, e também do ângulo de retroespalhamento³. Após esta perda de energia *instantânea*, o íon volta a perder energia suavemente com a trajetória até deixar o cristal e ser detectado com energia final

$$E_f = E_2 - \Delta E_{out} \quad (3)$$

A perda de energia do íon entre um ponto inicial L_0 e um ponto final L_1 é dada por

$$\Delta E = \int_{L_0}^{L_1} S(E) dL, \quad (4)$$

ou, se $S(E)$ varia lentamente com a energia,

$$\Delta E \approx S(\bar{E}) \Delta L \quad (5)$$

onde $\bar{E}$ é a energia média do íon entre L_0 e L_1 .

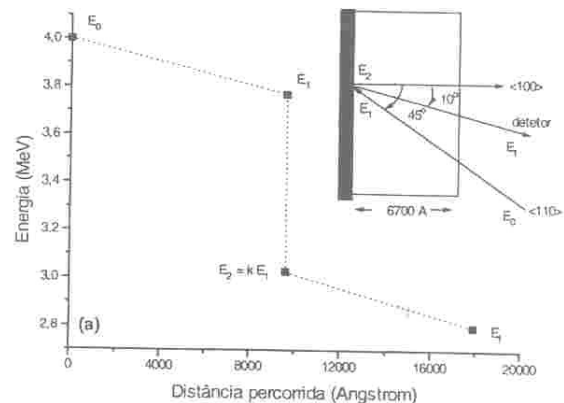


Figura 2 - Energia do íon na saída do cristal.

Portanto, as energias perdidas ΔE_{in} e ΔE_{out} na entrada e na saída do íon no alvo, respectivamente, podem ser escritas como funções das taxas de perda de energia $S_{in}(E)$ e $S_{out}(E)$. Se o feixe é canalizado, a taxa de perda na entrada deve ser menor que a taxa numa direção sem canalização, ou randômica, e $S_{in}(E) = S_{ch}(E)$. Por outro lado, numa rede tipo diamante, como é o caso do Si, a probabilidade de um íon retroespalhado em 170° permanecer canalizado é mínima, o que nos faz considerar que a taxa de perda de energia pós-retroespalhamento é a mesma de uma direção randômica, ou $S_{out}(E) = S_{rand}(E)$.

Para calcularmos $S_{ch}(E)$ a partir dos dados experimentais, procedemos da seguinte maneira: começando

da energia final detetada dos íons retroespalhados na interface E_f , recuperamos a energia perdida usando a eq. (5) numa forma iterativa. A trajetória do íon após ele ser retroespalhado, $L/\cos(\theta - 10^\circ)$, onde L é a espessura do alvo, é dividida em n intervalos ΔL . A uma distância ΔL antes do íon deixar o cristal, sua energia é

$$E_{f-\Delta L} = E_f + S_{\text{rand}}(E_f)\Delta L \quad (6-a)$$

Dois ΔL 's antes, a energia é

$$E_{f-2\Delta L} = E_{f-\Delta L} + S_{\text{rand}}(E_{f-\Delta L})\Delta L \quad (6-b)$$

E assim por diante, até que obtemos a energia imediatamente antes do retroespalhamento, E_2

$$E_2 = E_{f-n\Delta L} = E_{f-(n-1)\Delta L} + S_{\text{rand}}(E_{f-(n-1)\Delta L})\Delta L \quad (6-c)$$

Para S_{rand} , nós temos usado dados simulados pelo programa 89-TRIM (*Transport of Ions in Matter*)⁴. Estes dados são ajustados entre 1.0 MeV e 4.0 MeV, com erros menores que 1%, pela curva:

$$S_{\text{rand}} = a_0 + a_1 \exp(b_1 E) + a_2 \exp(b_0 + b_1 E + b_2 E^2). \quad (7)$$

Onde os coeficientes são

$$a_0 = 10.69; a_1 = -43.21; a_2 = 10.33; \\ b_0 = 1.267; b_1 = -0.5782; b_2 = 0.03513; b_3 = -5.741$$

Em nossa análise, n tem sido tomado igual a 10^3 , tal que ΔL , aproximadamente $10\text{\AA}$, é suficientemente pequeno para valer a aproximação da eq. (5).

Tendo E_2 , então E_1 é calculada pela eq. (2) e finalmente obtemos

$$\langle S_{\text{ch}}(E) \rangle = (E_0 - E_1)/(L/\cos(\theta)) \quad (8)$$

Na próxima seção, apresentaremos os dados experimentais para $\langle S_{\text{ch}}(E) \rangle$ em função do ângulo de incidência do He em Si. Estes dados podem ser tomados como a perda de energia $S(1.9, \theta)$, onde $E = 1.9$ MeV é a média entre E_0 e E_1 . Como $S(E)$ varia muito suavemente com a energia, estes dados podem ser considerados, mais simplesmente, como a perda de energia para a energia inicial $E_2 \approx 2.0$ MeV ou $S(2.0, \theta)$.

Antes de apresentar os resultados, queremos chamar a atenção para o fato da integração entre E_1 e E_2 dada pela eq. (6-c), nos dá a curva *exata* da energia como função da trajetória do íon após ele ser retroespalhado, e pode ser perfeitamente ajustada por uma reta. Isto justifica a análise dos dados pela aproximação de energia média (*energy loss approximation*), geralmente mais utilizada na literatura^{3, 5, 6}. Nossos dados, analisados por um ou outro método, apresentam diferenças sempre menores que 2%.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A perda de energia do He canalizado em Si sofre uma sensível redução se comparada à perda numa direção

não canalizada. Pontos representativos de nossos dados experimentais no plano {001}, varrendo-o do eixo [100] ao eixo [110] são mostrados na figura 3, para 2.0 MeV de energia inicial do feixe e estão em boa concordância com os resultados já encontrados na literatura². Como esperado devido a geometria do cristal, a perda de energia na canalização axial é menor que na planar, bem como a perda ao longo do canal [110] é menor que ao longo do canal [100].

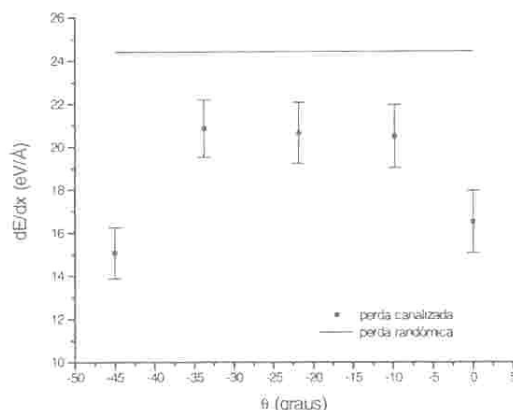


Figura 3 - Perda de energia de He (2 MeV) em {001}-Si.

A mesma varredura com mais detalhes em torno dos dois canais axiais é mostrada nas figuras 4-a e 4-b. As barras de erro são as mesmas da figura anterior (figura 3), 2 eV/Å, aproximadamente. Próxima aos canais axiais, a varredura angular da perda de energia apresenta uma forma semelhante ao perfil de retroespalhamento, com poços centrados nos canais, correspondendo à menor probabilidade de colisões frontais. Em particular devemos notar que a perda de energia não chega a atingir o nível randômico, mas tendem a um nível mais inferior, de perda na canalização planar (com exceção dos dados à esquerda do [110]), que foram tomados de um nível randômico para o canalizado axialmente.

Enquanto o perfil da varredura angular do número de partículas retroespalhadas depende da probabilidade de colisão frontal íon-íon, o perfil da varredura angular da perda de energia depende das colisões íon-elétrons. Por esta razão, a despeito da similaridade entre os perfis a varredura angular da perda de energia e a varredura angular do retroespalhamento, os poços têm profundidade e largura muito diferentes, caracterizando a diferença entre os processos que geram um e outro.

Apesar do estudo da varredura angular do retroespalhamento ter sido muito estudado nas últimas décadas², conhecemos na literatura apenas dois outros registros da abertura angular medida por perda de energia: para canalização de He a 2.0 MeV no eixo [100] do Si e para canalização de He a 0.8 MeV no eixo [100] do Si, ambos tomados numa varredura entre a direção axial e uma randômica^{7, 8}. Nossos dados tomados entre uma direção de canalização planar e uma de axial, em comparação com os dados da referência (7), são mostrados na figura 5.

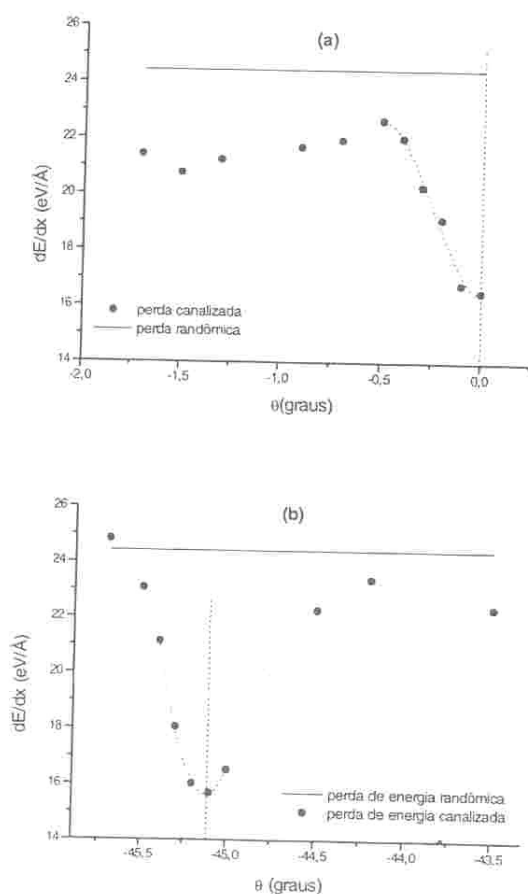


Figura 4 - Detalhe da perda no (a) [100] e (b) no [110].

Na tabela I, a largura dos poços à meia altura medidas por perda de energia ($\theta_{1/2}$) e por retroespalhamento ($\psi_{1/2}$) são comparadas para energias de 0.8 MeV e 2.0 MeV, nos canais [100] e [110]. Denominamos tipo a-r, a uma varredura feita entre um canal axial e uma direção randômica e tipo a-p, a uma varredura entre uma direção de canalização axial e uma de canalização planar. Note que todas as medidas de mesmo tipo têm aproximadamente a mesma razão $\theta_{1/2} / \psi_{1/2}$, independentemente da energia ou do canal.

Uma análise teórica da abertura angular a partir do modelo de Lindhard-Jin-Gibson (LJG) ^{1, 7}, nos dá para a abertura angular entre o canal axial e uma direção canalizada

$$(\theta_{1/2} / \psi_{1/2})^{\text{ico}} = [\ln(2)/2]^{1/2} (1/\alpha_t) \quad (9)$$

onde α_t é uma medida de efeitos térmicos na rede e é para o He em Si, à temperatura ambiente, igual a 0.84 ². Assim a razão entre a meia largura por perda de energia e a meia largura por retroespalhamento é, segundo o modelo LJG, aproximadamente 0.7. As discrepâncias entre este valor teórico e os dados experimentais são de cerca de 10% para a passagem de uma direção randômica ao canal axial (a-r). No

entanto, as discrepâncias passam de 30%, quando se trata da passagem da direção planar para a axial.

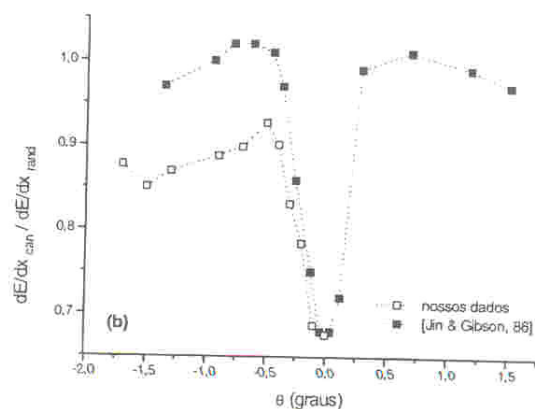


Figura 5 - Comparação das varreduras a-r e a-p.

O modelo LJG divide a perda de energia dos íons em duas contribuições distintas: uma proporcional à densidade média do cristal e outra proporcional à densidade local sentida pelo íon. Um íon com uma energia transversal $E_{\perp}$, tem acesso apenas a uma determinada região do espaço transversal do canal na qual os potenciais repulsivos dos átomos do cristal não são maiores que esta energia. Portanto o íon percebe uma *densidade local média* que depende de sua energia transversal e é tanto maior quanto maior for $E_{\perp}$. O efeito de aumentar o ângulo de incidência equivale ao de aumentar a energia transversal média dos íons em relação à direção do canal e, conseqüentemente, de aumentar a densidade eletrônica média percebida, até que ela atinge a densidade média do cristal. Neste caso o íon pode ser considerado descanalizado. A largura angular do canal medida por perda de energia é fortemente dependente da forma como a densidade eletrônica cresce com a energia transversal, já que é esta densidade que determina a perda de energia.

 Tabela I - Abertura angular $\theta_{1/2} / \psi_{1/2}$.

	E_0	tipo	canal	$\theta_{1/2} / \psi_{1/2}$
LJG (teórico)	—	a-r	—	0.69
dos Santos <i>et al</i> ,97	0.8	a-r	[100]	0.612
Jin and Gibson,86	2.0	a-r	[100]	0.628
nossos dados	2.0	a-r	[110]	0.631
nossos dados	2.0	a-p	[100]	0.435
nossos dados	2.0	a-p	[110]	0.407

A grande discrepância que encontramos entre os dados experimentais a-r e a-p de passagem do plano ao eixo, é devida em primeiro lugar à forma da dependência da densidade eletrônica em função da energia, que deve crescer de maneira diversa daquele crescimento no caso tratado pelo modelo LJG.

Para compreender esta diferença, é bastante razoável supor que conforme nos afastamos do canal axial em direção a um canal planar, os íons passem a coexistir em

dois regimes distintos, com parte da população canalizada axialmente, e parte canalizada planarmente. O número de ions em um ou outro regime depende do ângulo de incidência, sendo que todos estão no regime axial para um perfeito alinhamento entre o eixo do canal e o ângulo de incidência. Por outro lado, a população em regime planar aumenta conforme o alinhamento é desfeito pela varredura. O modelo LJG falha no caso p-r por só levar em consideração o potencial do canal axial (potencial de Lindhard para uma fileira de átomos) e não contar a contribuição do potencial do canal planar no cálculo da densidade eletrônica local média.

Atualmente, temos desenvolvido uma análise que generaliza o modelo LJG para dar conta não só das varreduras a-r e a-p, mas também varreduras entre a canalização planar e uma direção axial (p-r) que será publicada oportunamente.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho tem sido financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Os autores também gostariam de agradecer a Fereydoon Namavar, da *Spire Corporation*, que nos forneceu os alvos e a Leonardo P. G. de Assis, do IM-UFRJ, pela curva de ajuste, eq. (7).

BIBLIOGRAFIA

- (1) LINDHARD, J., Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 34 (1965) no. 14.
- (2) GEMMELL, D.S., Rev. Mod. Phys. 46 (1): 129, 1974.
- (3) CHU, W-K., MAYER, J.W., and NICOLET, M.A., *Backscattering Spectrometry*, Academic Press, New York, 1978.
- (4) ZIEGLER, J.F., BIERACK, J.P. and LITTMARK, U., *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Pergamon Press, New York, 1985.
- (5) DYGO, A., BOSHART, M.A., SEIBERLING, L.E., and KABACHNIK, N.M., Phys. Rev. A 50 (6): 4979, 1994.
- (6) DOS SANTOS, J.H.R., GRANDE, P.L., BOUDINOV, H., BEHAR, M., STOLL, R., KLATT, CHR., and KALBTZER, S., Nuc. Instr. and Meth. B 106: 51-54, 1995.
- (7) JIN, H.S. and GIBSON, W.M., Nucl. Instr. and Meth. B13: 76-80, 1986.
- (8) DOS SANTOS, J.H., GRANDE, P.L., BEHAR, M., BUDINOV, H., and SCHIWETZ, G., Phys. Rev. B 55 (7): 4332, 1997.