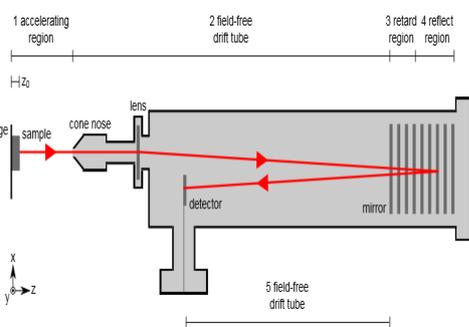


SIMULAÇÃO DE SIMS (Secondary Ion Mass Spectrometry)

Gabriel Onzi
Setembro, 2018

1 Introdução

Espectrometria de massa de íons secundários (SIMS) é uma técnica de análise da composição da superfície de um material [1]. A partir de um feixe de íons primário de alta energia, íons secundários são ejetados do material por Sputtering.



$$F = ma = q \frac{V}{d} v = v_0 + atz = z_0 + v_0 t + \frac{at^2}{2}$$

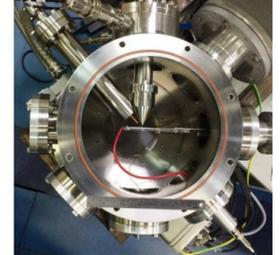
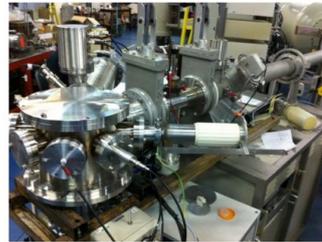
$$t_1 = \left[\sqrt{v_0^2 + \frac{2qV_1}{md_1}(d_1 - z_0)} \right] \frac{md_1}{qV_1} = \frac{d_1}{v_1}$$

$$t_2 = \frac{d_2}{v_1}$$

$$t_3 = 2d_3 \left[\frac{mv_1}{qV_3} - \sqrt{\left(\frac{mv_1}{qV_3} \right)^2 - \frac{2}{qV_3}} \right] = 2d_3/v_3$$

$$t_4 = \frac{2md_4 v_3}{qV_4}$$

$$t_5 = \frac{d_5}{v_1}$$



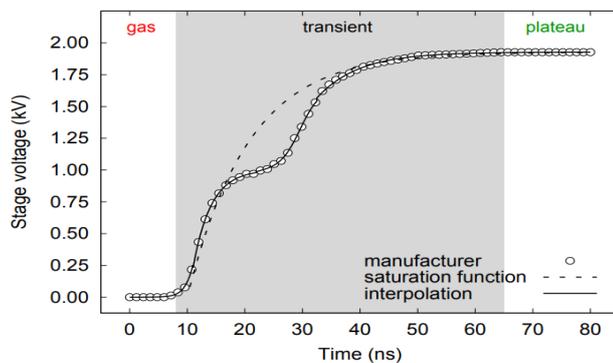
Linha instalada no Laboratório de Implantação Iônica

Pulsos de alta voltagem extraem esses íons secundários para um tubo aterrado onde após serem direcionados e refletidos por uma lente e um espelho eletrostáticos, respectivamente, é medido seu tempo de voo com resolução abaixo de nanosegundo. O uso de um feixe altamente energético diminui a fragmentação das moléculas e aumenta a quantidade de material ejetado [2]. Esta ferramenta foi recentemente implementada no Laboratório de Implantação Iônica da UFRGS e está sendo estudada detalhadamente [3]. Por isso, tornou-se relevante uma ferramenta de simulação dessa técnica.

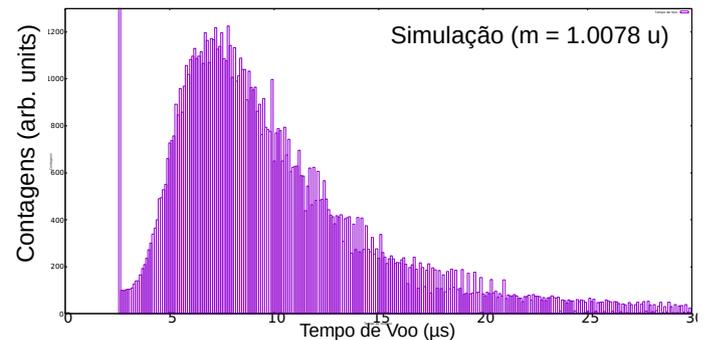
Esquemático do Detector ToF (time-of-flight)

2 Código

Por ser considerado um regime de gás iônico ao serem ejetadas, utilizamos uma distribuição de Maxwell-Boltzmann de velocidade para integrar pelo método numérico FDM (Finite Differential Method) a trajetória, velocidade e tempo de voo das partículas.

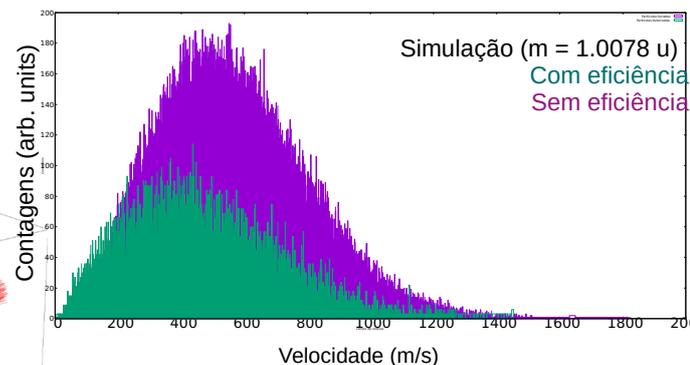


Dependência no tempo do potencial de Extração dos íons secundários
O código foi implementado em C e o cálculo da aceleração devida ao potencial possui dependência no tempo e no espaço. Na figura à cima, a voltagem de extração das partículas mostra sua dependência no tempo.



3 Resultados e Perspectivas

Comparado com equações analíticas de velocidades máxima e tempo máximo, temos um erro de 0,004%. O código segue em desenvolvimento, porém fatores como eficiência do detector e regime de velocidades das partículas ejetadas já podem ser analisados. A perspectiva é implementar geometrias tridimensionais[3] para simulações mais realísticas, expandindo a nossa compreensão da técnica de ToF-SIMS.



Referências

- [1] Vickerman, Analyst (2011) 2199
- [2] Nakata et al., Appl. Surf. Sci. 255 (2008) 1591.
- [3] Kanvas et al, Rev. Sci. Instr. 81 (2010) 02B703
- [4] Alencar et al., Time of Flight Secondary Ion Mass Spectrometry.

