

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

**ESTUDO DO PODER DE FREAMENTO
ELETRÔNICO DE ÍONS DE He e B
CANALIZADOS EM Si ***

José Henrique Rodrigues dos Santos

Tese realizada sob a orientação dos Drs. Moni Behar e Pedro Luís Grande e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS, em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Ciências.

Porto Alegre
Janeiro, 1997

FT 61.72.
S 237 e

* Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Agradecimentos:

Aos Drs. Moni Behar e Pedro Luís Grande, pela orientação, paciência, atenção e amizade.

Ao Dr. Fernando Cláudio Zawislak, pelo seu incentivo e apoio na realização deste trabalho.

Aos demais Profs. do Grupo de Implantação Iônica, em especial aos Drs. Henri Boudinov, Joel Pereira de Souza, Lívio Amaral e Paulo Fernando Papaleo Fichtner, pelo apoio na realização deste trabalho e discussões.

Aos colegas de grupo, Rogério Luiz Maltez, Carlos Eugênio Foerster, Eduardo Ceretta Moreira, Jorge Kaschny, Gustavo M. de Azevedo, Rodolfo Ariel Perez, Guillermo Sanchez, Márcio Soares, Márcia Azevedo e Júlio Martini, pela amizade, apoio e discussões.

Aos funcionários do Laboratório de Implantação Iônica, Eng. Agostinho Bulla e Técnicos Clodomiro F. Castelo, Luís Henrique Ávila Vieira e Paulo Roberto Borba, pela constante disposição em ajudar e competência no controle do feixe de íons.

À secretária da Física Experimental, Wanda Aurélio Knebel, pela presteza e paciência.

Aos funcionários da biblioteca do Instituto de Física; em especial, à Zuleika Berto e à Silvia Catarina Rossi, pela competência, dedicação e paciência.

A todas as demais pessoas que, direta ou indiretamente, contribuíram para a execução deste estudo.

Aos Meus Pais

ÍNDICE

1. <i>Interação de Íons com a Matéria</i>	22
1.1 Introdução	22
1.2 Poder de Freamento Nuclear	22
1.3 Poder de Freamento Eletrônico	25
1.3.1 Cálculo do Poder de Freamento Eletrônico para Altas Energias do Projétil: Aproximação de Born de Onda Plana (PWBA)	26
1.3.2 Teoria de Bohr	29
1.3.3 Cálculo do Poder de Freamento Eletrônico para Baixas Energias do Projétil: Método dos Deslocamentos de Fase ("Phase Shifts Method")	30
1.3.4 Teoria da Resposta Linear	32
1.3.5 Cálculo do Poder de Freamento Eletrônico para Energias do Projétil Altas e Intermediárias: Método dos Canais Acoplados.	36
2. <i>Análise por Espectrometria de Retroespalhamento de Rutherford</i>	41
2.1 Introdução	41
2.2 Processo Físico Básico	42
2.2.1 Fator Cinemático	42
2.2.2 Freamento	44
2.3 Análise de Dados	45
2.3.1 Escala de Profundidade para Uma Amostra Elementar	45
3. <i>Canalização</i>	48
3.1 Introdução	48
3.2 Aspectos Experimentais	50
3.2.1 O Efeito da Canalização e Procedimento de Alinhamento de Um Cristal	50
3.2.2 Semi-ângulo axial $\psi_{1/2}$ e Razão Mínima de Contagens χ_{min}	54

3.3	Teoria Clássica de Canalização	57
3.3.1	Introdução	57
3.3.2	O Modelo do Potencial Transversal Contínuo de uma Corda de Átomos	57
3.3.3	Condição para a Validade da Aproximação Contínua e Ângulos Críticos	62
3.3.4	Tratamento Estatístico	63
4.	<i>Procedimento e Resultados</i>	65
4.1	Procedimento Experimental	65
4.1.1	Preparação das Amostras	65
4.1.2	Detalhes Experimentais	67
4.2	Medição da Perda de Energia Canalizada em Função da Energia do Projétil	68
4.2.1	Análise de Dados	68
4.2.2	Resultados da Perda de Energia de Íons de He sob Canalização	70
4.2.3	Resultados da Perda de Energia de Íons ^{10}B ao longo da Direção $\langle 100 \rangle$ do Si	74
4.3	Distância de Equilibração de Carga de Íons He ao longo do Canal $\langle 100 \rangle$ do Si.	76
4.3.1	Medições de Equilibração de Carga	76
4.3.2	Resultados	78
4.4	Dependência Angular da Perda de Energia de Íons de He em torno da Direção $\langle 100 \rangle$ do Si.	80
4.4.1	Análise de Dados	82
4.4.2	Procedimento Teórico	84
4.5	Medições da Perda de Energia de Íons de Boro em Direções Aleatórias do Si.	91
4.5.1	Procedimento Experimental	91
4.5.2	Análise de Dados	95
4.5.3	Resultados	96
5.	<i>Discussão e Conclusões</i>	99
5.1	Medições da Perda de Energia Canalizada de He em Si	99
5.2	Medidas da Perda de Energia de B em Si	104
5.2.1	Poder de Freamento sob Canalização	104
5.2.2	Poder de Freamento em Direção Aleatória	109
5.3	Conclusões	112

5.3.1	Íons de He	113
5.3.2	Íons de B	114
A.	<i>Potencial Interatômico</i>	117
A.1	Distribuições de Carga Atômicas	118
A.2	Similaridade	123
B.	<i>Medições da Perda de Energia de Íons Canalizados</i>	127
B.1	Introdução	127
B.2	Estudos de Transmissão	127
B.3	Estudos de Alcance	137
B.4	Estudos de Retroespalhamento	139
C.	<i>Algoritmo para "Extração" da Contribuição das Partículas Canalizadas para o Espectro de RBS de Canalização.</i>	145
D.	<i>Publicações Relacionadas com Este Trabalho</i>	148

RELAÇÃO DE TABELAS

2.1	Comparação entre Espessuras Determinadas pela Aproximação de Energia de Superfície e pela Aproximação de Energia Média a partir de Espectros de RBS de 2,0 MeV de partículas α 's Espalhadas de filmes de Pt (Chu et al., 1978: p. 144-146).	47
3.1	Índices de Miller planares para estruturas cúbicas, listados em ordem decrescente da profundidade do perfil angular da probabilidade de retroespalhamento.	55
3.2	Índices de Miller axiais para estruturas cúbicas, listados em ordem decrescente da profundidade do perfil angular da probabilidade de retroespalhamento.	55
B.1	Medidas relacionadas com a perda de energia de íons energéticos ao longo de trajetórias canalizadas.	143

RELAÇÃO DE FIGURAS

1.1	Representação qualitativa dos poderes de freamento nuclear e eletrônico.	23
1.2	Diagrama vetorial para um íon energético de massa M_1 e carga Z_1 incidindo sobre um átomo-alvo estacionário de massa M_2 e carga Z_2 . cm é o centro de massa do sistema constituído pelo e^- e pelo "caroço iônico" do átomo-alvo.	26
1.3	Diagrama veotrial para o íon nu (Z_1, M_1) , o "caroço iônico" do alvo (Z_2, M_2) e um elétron ativo (e^-) . \vec{r}_p , \vec{r}_t e \vec{r}_e são as posições do projétil, do alvo e do elétron no sistema de referência do centro-de-massa do sistema.	37
2.1	Diagrama em blocos do sistema analisador de um experimento de RBS: D = detector, AT = alta tensão, PA = pré-amplificador, A = amplificador, GP = gerador de pulsos e MCA = analisador multicanal.	42
2.2	Representação esquemática de uma colisão entre um projétil de massa M_1 , velocidade \mathbf{v}_0 e energia E_0 e um átomo alvo de massa M_2 que está inicialmente em repouso. Após a colisão, o projétil e o átomo alvo têm velocidades e energias \mathbf{v}_1 , E_1 e \mathbf{v}_2 , E_2 , respectivamente.	43
2.3	Diagrama esquemático mostrando o espalhamento à superfície da amostra e a uma profundidade x de partículas de um feixe incidente em uma direção oblíqua com relação à normal	46
3.1	Trajetórias de íons canalizados (Brandt, 1968).	49
3.2	Modelo de rede cristalina mostrando a configuração atômica na rede do tipo da do diamante, vista a partir de três direções: (a) aleatória, (b) planar e (c) axial (Chu et al., 1978: p.224).	50
3.3	RBS esquemático de (a) um amorfo, (b) de um cristal planar e (c) de um cristal cúbico em função da orientação da amostra com relação ao feixe (Chu et al., 1978, p. 226)	51

- 3.4 RBS esquemático em função do ângulo de rotação para um cristal cujo eixo está inclinado de um ângulo θ em relação ao feixe incidente (Chu et al., 1978: p. 227). 52
- 3.5 Uso da técnica de canalização para alinhar um monocristal de silício em relação à direção de incidência do feixe de 2 MeV de partículas α : (a) desenho esquemático da geometria de espalhamento; o eixo de inclinação é perpendicular ao feixe incidente e o detector está no plano definido por essas duas linhas que se interseccionam; (b) contagem de partícula retroespalhadas da superfície do cristal em função do ângulo de rotação e (c) posições dos mínimos planares em coordenadas polares para os ângulos de inclinação de 5 e 6° (Chu et al., 1978: p. 228.) 53
- 3.6 Planos que interseccionam o eixo $\langle 110 \rangle$ 54
- 3.7 Orientação dos planos principais em torno dos três eixos principais de um cristal cúbico: (a) $\langle 111 \rangle$, (b) $\langle 100 \rangle$ e (c) $\langle 110 \rangle$ 54
- 3.8 Espectros de RBS para um feixe iônico incidente ao longo de um eixo de um cristal e ao longo de uma direção aleatória. 55
- 3.9 Número de partículas retroespalhadas em função do ângulo de inclinação. 56
- 3.10 Linhas equipotenciais através do canal $\langle 100 \rangle$ do Si, para íons de He^{2+} incidentes paralelamente ao eixo do canal. Para calcular o potencial de cada corda de átomos foi utilizado o modelo de Moliere. Os vértices do quadrado correspondem às intersecções das cadeias de átomos com o plano transversal ao eixo. 61
- 4.1 Feixe de íons de energia E_0 incidindo sobre uma estrutura SIMOX. E é a energia com que uma partícula retroespalhada na interface Si/SiO₂ é detectada. 66
- 4.2 Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons He^{2+} de 760 keV. O intervalo de energia relacionado ao número dos canais exibidos corresponde a toda a espessura da amostra. O rótulo Si-c identifica o sinal proveniente das partículas retroespalhadas na camada superficial de Si cristalino; Si(SiO₂), o sinal dos íons retroespalhados por átomos de Si da camada enterrada de SiO₂; O(SiO₂) tem o mesmo significado, mas para átomos espalhadores de O e Si-substr. corresponde ao sinal das partículas do feixe retroespalhadas por átomos de Si do substrato. 67
- 4.3 Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 110 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons He^{2+} de 760 keV. 71

4.4	Valores de poder de freamento canalizado em função da energia do íon He^{2+} para a direção $\langle 110 \rangle$ do Si (círculos cheios). Por comparação, mostramos também os resultados de Eisen et al. (1972) (asteriscos).	72
4.5	Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons He^{2+} de 760 keV.	73
4.6	Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons He^{2+} de 2 MeV.	74
4.7	Valores de poder de freamento canalizado em função da energia do íon He^{2+} para a direção $\langle 100 \rangle$ do Si. A linha sólida corresponde ao poder de freamento aleatório tomado de Niemann et al. (1993).	75
4.8	Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons $^{10}\text{B}^{2+}$ de 800 keV.	76
4.9	Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons $^{10}\text{B}^{2+}$ de 8 MeV.	77
4.10	Valores de poder de freamento canalizado em função da energia do íon $^{10}\text{B}^{2+}$ para a direção $\langle 100 \rangle$ do Si.	78
4.11	Espectros de RBS aleatório e canalizado para um feixe de $^4\text{He}^{2+}$ de 800 keV a ângulos de inclinação θ de 0,0, 0,5 e 0,7° em torno do eixo $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX.	81
4.12	Representação esquemática das duas contribuições mais importantes para o espectro de RBS. Partículas que são retroespalhadas na interface Si/SiO ₂ e partículas que são decanalizadas antes de ser retroespalhadas podem ter a mesma energia detectada.	83
4.13	Razão α entre os poderes de freamento canalizado e aleatório para íons de He de 800 keV em torno da direção $\langle 100 \rangle$ do Si em função do ângulo de inclinação. Os círculos cheios são os presentes resultados experimentais. Na mesma escala (quadrados cheios) representamos o perfil de decanalização. Alinha tracejada representa os resultados dos cálculos baseados no método de canais acoplados.	85
4.14	Representação diagramática dos processos básicos de perda de energia de um feixe de íons de He colidindo com átomos de Si.	88
4.15	A distribuição do fluxo dos íons de He^{2+} através do canal $\langle 100 \rangle$ mediada sobre os 1500 Å de espessura do filme.	91

- 4.16 Razão α entre os poderes de freamento canalizado e em direção aleatória para íons de He de 800 keV ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ do Si em função do ângulo de incidência. Os círculos cheios representam os dados experimentais, a linha tracejada, os resultados dos cálculos sem as correções teóricas e experimentais (AO) - v. o texto - e a linha cheia, os resultados teóricos corrigidos (AO*). 92
- 4.17 Espectro de RBS aleatório medido com íons $^{10}\text{He}^{2+}$ de 800 keV incidentes sobre um alvo de Si amorfizado. Essa amostra contém um marcador constituído por um pico de íons de Bi implantados a uma energia de 30 keV. 93
- 4.18 Espectro de RBS aleatório medido com íons $^{10}\text{B}^{2+}$ de 800 keV incidentes sobre um alvo de Si amorfizado. Essa amostra contém um marcador constituído por um pico de íons de Bi implantados a uma energia de 30 keV. 95
- 4.19 $\frac{dE}{dx}|_{E_0}$ versus $\frac{dE}{dx}|_{K_{Bi}E_0}$ para íons de ^{10}B a 700 keV. As linhas retas correspondem as geometrias especificadas. O ponto de intersecção de duas retas dá os valores de perda de energia específica medidos ao longo do caminho de entrada e do caminho de saída. 96
- 4.20 Poder de freamento eletrônico aleatório de ^{10}B em Si. A linha cheia corresponde aos valores extraídos de Ziegler et al. (1985). Os círculos abertos apresentam os resultados obtidos usando os poderes de freamento de Niemann et al. (1993) - v. o texto. O círculos cheios são os presentes valores experimentais obtidos usando-se os poderes de freamento de Ziegler et al. (1985) - v. o texto. 97
- 5.1 Razão α entre os poderes de freamento canalizado (medido) e o aleatório (Niemann et al., 1993) em função da energia do íon. A linha sólida é somente para guiar os olhos. Os símbolos vazados correspondem aos dados tomados de Jin e Gibson (1987) e de Wilson (1987). 100
- 5.2 Razão α entre os poderes de freamento canalizado e o aleatório (Niemann et al., 1993) de íons de He em função da energia do íon. A linha tracejada corresponde a uma estimativa de α baseada em PWBA. O triângulo para baixo e o quadrado correspondem aos dados tomados de Wilson (1987) e de Jin e Gibson (1987). . . . 102
- 5.3 Dependência com o parâmetro de impacto da perda de energia eletrônica para He^{2+} colidindo com átomos de Si calculada com o método dos canais acoplados. Os rótulos indicam a camada interna do Si à qual o elétron ativo está inicialmente ligado. . . 104

5.4	O mesmo que a fig. 5.3, mas para He^+	105
5.5	Resultados para a dependência com o parâmetro de impacto da perda de energia de íons de He colidindo com átomos de Si. A ionização e a excitação do projétil, no caso da fração de estado de carga +1 é levada em conta o sistema de colisão $\text{Si} + \text{He}^+$	106
5.6	Valores de poder de freamento canalizado em função da energia do íon $^{10}\text{B}^{2+}$ para a direção $\langle 100 \rangle$ do Si. Círculos cheios correspondem aos presentes resultados. A linha cheia representa os dados de Bogen et al. (1993). Quadrados correspondem aos dados de La Ferla et al. (1992). O triângulo é o dado de Eisen (1968).	107
5.7	Razão α entre os poderes de freamento canalizado (medido) e o aleatório em função da energia do íon para ^{10}B ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ do Si (círculo cheio). A linha cheia representa os poderes de freamento aleatório de ^{10}B em Si (Ziegler et al., 1985). A linha tracejada é somente para guiar os olhos.	108
5.8	Valores calculados do poder de freamento eletrônico canalizado (até 800 keV) em função da velocidade do íon $^{10}\text{B}^{2+}$ para a direção $\langle 100 \rangle$ do Si. Adicionalmente, são mostrados resultados experimentais previamente publicados (Eisen, 1968; La Ferla et al., 1994). Todos os pontos experimentais foram ajustados com uma função do tipo lei de potência - linha tracejada-pontilhada - $dE/dx = (35 \pm 1)(v/v_0)^{0,90 \pm 0,06}$ eV/Å.	110
5.9	Poderes de freamento eletrônico aleatórios de ^{10}B em Si a baixas energias em função da velocidade do íon junto com os poderes de freamento eletrônico calculados. A linha tracejada-pontilhada corresponde a um ajuste com uma função do tipo lei de potência, o qual resulta em $dE/dx = (49 \pm 3)(v/v_0)^{1,1 \pm 0,2}$ eV/Å.	111
A.1	Distribuições de carga de Thomas-Fermi e Hartree-Fock de átomo isolado e de estado sólido para átomos de níquel (Ziegler et al., 1985: p. 29).	119
A.2	Funções de blindagem relativas a distribuições de carga atômica de estado sólido para Ni, B e Au e as quatro funções de blindagem clássicas (Ziegler et al., 1985, p. 34).	121
A.3	Funções de blindagem interatômica para as combinações B-B, Ni-Ni e Au-Au (Ziegler et al., 1985: p. 36).	123
A.4	Funções de blindagem para os diferentes pares de colisão escolhidos por Ziegler et al. (1985: p. 46).	125

A.5	Funções de blindagem da fig.1.5 em função da distância reduzida definida em termos do raio de blindagem universal de Ziegler et al. (1985, p. 47).	126
B.1	Distribuição em energia de prótons de 2,1 MeV de energia incidente transmitidos através de um cristal fino de silício ao longo de uma direção aleatória (acima) e em canalização (abaixo) (Dearnaley, 1964).	128
B.2	Espectros de energia medidos com um detetor de pequeno diâmetro para prótons de 4.85 MeV de energia transmitidos através de um cristal de silício de $50\mu\text{m}$ de espessura a uma orientação aleatória (pico do lado direito) e sob condições de canalização ao longo do plano $\{111\}$ (pico central). O pico do lado direito mostra o espectro dos prótons incidentes. Todos os três espectros correspondem ao mesmo número de prótons incidentes (Gibson et al., 1965).	129
B.3	Espectros de energia (normalizados a mesma altura) de prótons de 4.9 MeV de energia transmitidos através de um cristal de silício de $33\mu\text{m}$ de espessura a uma orientação aleatória e sob condições de canalização ao longo dos planos $\{111\}$ $\{110\}$. Esses espectros foram medidos com um detetor de grande área de aceitação colocado logo atrás do cristal absorvedor (Appleton et al., 1967).	131
B.4	Espectros de energia correspondentes a prótons de 9 MeV transmitidos através de um cristal de silício de $48\mu\text{m}$ de espessura a uma orientação aleatória e sob condições de canalização ao longo do eixo $\langle 110 \rangle$. Os espectros são normalizados ao mesmo número de prótons incidentes. Esses espectros foram medidos com um detetor de grande área colocado logo atrás do cristal absorvedor (Appleton et al., 1967). . . .	132
B.5	Espectros de energia registrados com um detetor de pequeno ângulo de aceitação para prótons de 3 MeV transmitidos em uma direção aleatória (esquerda) e paralela aos planos $\{111\}$ (centro) de um filme de silício de $33\mu\text{m}$ de espessura. O espectro do lado direito mostra a distribuição de energias dos íons incidentes (Appleton et al., 1967).	133
B.6	Poder de Freamento para prótons de 4 MeV transmitidos ao longo dos eixos principais de cristais de Si e Ge em função do raio do canal correspondente a cada eixo (Clark et al., 1970).	134

-
- B.7 Espectros de energia correspondentes a íons de He de 7 MeV transmitidos através de um cristal de silício de $11.2 \mu\text{m}$ de espessura a uma orientação aleatória e sob condições de canalização ao longo das direções indicadas. Esses espectros foram medidos com um detector de pequeno ângulo de aceitação (Eisen et al., 1972). . . 135
- B.8 Razão entre os poderes de freamento canalizados e aleatórios medidos para íons He^+ transmitidos através de monocristais de Si em função da energia (Eisen et al., 1972). 136
- B.9 Razão entre os poderes de freamento canalizados e aleatórios medidos para íons de próton, deutério e hélio transmitidos ao longo das direções $\langle 110 \rangle$ e $\langle 111 \rangle$ de monocristais de Si em função da energia por nucleon (Della Mea et al., 1972). . . 137
- B.10 Distribuições de perda de energia para íons de He de 1 MeV transmitidos ao longo do plano $\{111\}$ de Si (linha sólida) e em orientação aleatória (curva tracejada) (Holland e Appleton, 1976). 138

RESUMO

Neste trabalho, medimos a perda de energia de íons de He e B ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ do Si, com energias que vão desde 200 keV a 4,5 MeV, no primeiro caso, e de 500 keV a 9 MeV, no segundo. Usamos a técnica de retroespalhamento de Rutherford com amostras do tipo SIMOX, as quais consistem de uma camada de Si monocristalino sobre uma camada de 500 nm de SiO₂ enterrada numa matriz de Si $\langle 100 \rangle$. No método experimental empregado, a perda de energia dos íons canalizados é obtida depois de os mesmos serem retroespalhados em um marcador especialmente utilizado para esse fim.

Para ambos os tipos de projétil, a curva da razão α entre os poderes de freamento de canalização e em direções aleatórias exibe um máximo largo e decresce lentamente a energias mais altas, em conseqüência do aumento da contribuição da camada L do Si para o poder de freamento eletrônico, como é indicado por cálculos de Aproximação de Born de Onda Plana (PWBA).

Por outro lado, também medimos a perda de energia de íons de He de 800 keV canalizados ao longo do eixo $\langle 100 \rangle$ do Si em função do ângulo de incidência do feixe de íons. Comparamos os resultados experimentais com cálculos realizados por Grande e Schiwietz (dos Santos et al., 1997 e ref. 4 do apêndice D), os quais utilizaram a perda de energia dependente do parâmetro de impacto obtida da solução da equação de Schroedinger dependente do tempo através do método de canais acoplados. Esse cálculo não-perturbativo fornece resultados de perda de energia confiáveis, os quais estão em bom acordo com os valores experimentais.

No caso do B, além da perda de energia de partículas canalizadas ao longo da direção axial $\langle 100 \rangle$ do Si, medimos também o poder de freamento eletrônico de íons ¹⁰B para direções de incidência aleatórias. As medições foram realizadas no intervalo de energia de 300 a 800 keV. Cálculos baseados no modelo de gás de elétrons-livres indicam que o mecanismo de perda de energia mais importante para íons ¹⁰B lentos penetrando em Si provém do espalhamento dos elétrons de valência dos átomos do alvo pelos íons incidentes. Com relação às medições de canalização, os dados de baixa energia (500-800 keV) seguem um comportamento v^s com $s = 0,90 \pm 0,06$, enquanto que, para os dados de perda de energia em direção aleatória, $dE/dx \propto v^s$ com $s = 1,1 \pm 0,2$. Ambos os

resultados estão em bom acordo com a previsão das teorias vigentes. Por outro lado, os valores experimentais de poder de freamento de ^{10}B em direções aleatórias (para energias até 650 keV) estão em bom acordo com os valores obtidos por Ziegler, Biersack e Littmark por um procedimento de escalonamento. Entretanto, para energias mais altas do que 650 keV, diferenças pequenas, mas sistemáticas são observadas.

ABSTRACT

In this work, we have measured the electronic stopping power of He and B ions channeling along the $\langle 100 \rangle$ direction of Si crystals. The ion energies ranged between 200 keV and 4.5 MeV, in the first case, and between 500 keV and 9 MeV, in the second one. We have used the Rutherford backscattering technique with SIMOX samples consisting of a Si single-crystal layer on top of a buried layer of 500 nm SiO₂ built into Si $\langle 100 \rangle$ wafer. In this experimental method, the channeling energy loss is obtained after the particles being backscattered at some marker specially used for this purpose.

For both types of projectile, the curve of the α ratio between the channeling and random stopping powers has a broad maximum and decreases slowly at high energies due to the increasing of the contribution of the Si L shell to the electronic stopping power, as indicated by Plane Wave Born Approximation (PWBA) calculations.

We also present measurements of the stopping power of 800 keV ⁴He ions channeling along Si $\langle 100 \rangle$ axis as a function of the incidence angle. We compare the experimental results with theoretical calculations carried out by Grande and Schiwietz (dos Santos et al., 1997 and ref. 4 in the appendix D) which used the impact parameter dependent energy-loss obtained from the solution of the time-dependent Schroedinger equation through the coupled-channel method. This non-perturbative calculation provides reliable energy-loss results which are in good agreement with the experimental values.

For B ions, besides the channeling energy-loss along the $\langle 100 \rangle$ axial direction of Si, we have measured the ¹⁰B electronic stopping power in random directions. The measurements were carried out in a 300-800 keV range. Calculations based on the free-electron gas model indicate that the most important energy-loss mechanism for slow ¹⁰B ions penetrating into Si comes from the scattering of the valence electrons of the target by the incoming projectile. For the channeling measurements, the low energy data (500-800 keV) follow a v^s regime with $s = 0.90 \pm 0.06$ whereas, for the random data, $dE/dx \propto v^s$ with $s = 1.1 \pm 0.2$. Both results are in good agreement with the prediction of current theories. On the other side, the experimental random ¹⁰B stopping power

values (for energies up to 650 keV) are in fair agreement with the ones obtained from Ziegler, Biersack and Littmark scaling procedure. However, for energies higher than 650 keV, slight but systematic differences are observed.

INTRODUÇÃO

O conhecimento do processo de freamento de íons energéticos ao penetrar a matéria é importante não somente do ponto de vista da física básica, mas também na moderna tecnologia de modificação e análise de materiais por feixes de íons. A energia depositada pelas partículas incidentes pode alterar profundamente as propriedades elétricas, mecânicas e óticas dos materiais. Por outro lado, na análise de materiais, essa é utilizada para a obtenção da concentração de elementos em função da profundidade da amostra.

Os processos físicos relacionados com a perda de energia são extremamente complexos, envolvendo uma grande variedade de tipos de interação entre o projétil, o "caroço iônico" do alvo e os elétrons, tanto do projétil quanto dos átomos-alvo. Devido a já mencionada importância estratégica da compreensão desses fenômenos, eles têm sido intensamente estudados desde o início do século. Eminentemente físicos tais como E. Rutherford, N. Bohr, F. Bloch, E. Fermi, J. Lindhard, entre outros, dedicaram-se a esse estudo.

Quando um feixe de íons incide sobre um monocristal segundo um dos eixos principais do mesmo, a trajetória da partícula é governada pelo potencial eletrostático que existe através do canal formado pelo arranjo geométrico bem definido de cadeias de átomos que compõe o cristal. Essa é a essência do fenômeno denominado canalização iônica.

A canalização de íons energéticos foi prevista através de cálculos de simulação por Oen e Robinson em 1963 (Oen e Robinson, 1963) e foi experimentalmente comprovada por Davies (Piercy et al., 1964). A perda de energia sofrida por íons energéticos que incidem ao longo dos eixos principais de cristais tem sido estudada desde então. Além da física subjacente ao fenômeno da canalização, muitas aplicações tais como estudos de superfícies atômicas (Feldman et al., 1978; Cheung et al., 1980), posição na rede cristalina de átomos de impurezas (Wampler, 1995; Boshart et al., 1995), perfis de defeitos (Tesmer e Nastasi, 1995; Albertazzi et al., 1995) e implantações profundas (La Ferla et al., 1994) demandam um acurado conhecimento da perda de energia por unidade de comprimento do caminho atravessado por íons canalizados.

Usualmente, a perda de energia de íons canalizados tem sido determinada medindo-se a energia

final de íons transmitidos através de monocristais. Apesar das inúmeras vantagens desse método, ele depende fortemente da preparação de finos monocristais homogêneos auto-sustentáveis. A fim de medir a perda de energia de projéteis pesados ou mesmo prótons a baixas energias, alvos extremamente finos devem ser empregados. Essa necessidade torna difícil o uso da geometria de transmissão e métodos alternativos foram empregados no passado (Götz et al., 1975; Cembali e Zignani, 1977).

Neste trabalho, medimos a perda de energia de íons de He e B ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ do Si, com energias que vão desde 200 keV a 4,5 MeV, no primeiro caso, e de 500 keV a 9 MeV, no segundo. No método experimental utilizado, a perda de energia dos íons canalizados é obtida depois de os mesmos serem retroespalhados em um marcador especialmente utilizado para esse fim.

Como uma calibração do nosso método experimental, medimos também a perda de energia de íons de He ao longo da direção $\langle 110 \rangle$ com energias do projétil compreendidas entre 350 e 780 keV. Os resultados obtidos foram comparados com os previamente existentes de Eisen et al. (1972), mostrando que nossa técnica experimental fornece valores confiáveis de perda de energia canalizada.

O estudo do poder de freamento em função da energia do projétil realizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ produziu os primeiros resultados sistemáticos de medições diretas da perda de energia ao longo dessa direção - tanto no caso do He quanto do B.

Ademais, calculamos a perda de energia para íons de He^{2+} incidentes segundo o eixo $\langle 100 \rangle$ do Si. Nesse cálculo, levamos em conta que, no intervalo investigado de energias do projétil, somente os elétrons de valência do Si são responsáveis pelo freamento de íons de He bem canalizados ao longo dessa direção cristalográfica. Usando, então, a Aproximação de Born de Onda Plana, calculamos a perda de energia devida aos elétrons das camadas internas do Si. Essa contribuição foi posteriormente descontada do poder de freamento em trajetórias aleatórias, a fim de obter-se uma estimativa da perda de energia específica sob canalização. Os resultados desses cálculos apresentam uma concordância razoável com os valores experimentais, para energias do projétil superiores a 2 MeV.

Com a mesma técnica, para íons de He^+ incidentes ao longo do eixo $\langle 100 \rangle$ do Si, fomos capazes de identificar o poder de freamento eletrônico de pré-equilíbrio devido a processos de equilibração de carga. Nossos resultados sugerem alguns nm para distância de equilibração de carga.

Nós também medimos a perda de energia de íons de He de 800 keV canalizados ao longo do eixo $\langle 100 \rangle$ do Si em função do ângulo de incidência do feixe de íons. Cálculos baseados no método de canais acoplados realizados por Grande e Schiwietz (dos Santos et al., 1997 e ref. 4 do apêndice D) permitiram deduzir que, na região em torno do máximo do poder de freamento (a 800 keV), a dependência do poder de freamento com o ângulo de incidência do feixe é basicamente devida a perda de elétrons da partícula incidente e captura de elétrons das camadas internas do Si pelo projétil.

No caso do B, além da perda de energia de partículas canalizadas ao longo da direção axial $\langle 100 \rangle$, medimos também o poder de freamento eletrônico de íons ^{10}B para direções de incidência aleatórias. Essas medições forneceram os primeiros resultados sistemáticos do poder de freamento de íons de B em Si como função da energia para trajetórias aleatórias dos íons incidentes. Cálculos baseados no modelo de gás de elétrons-livres indicam que o mecanismo de perda de energia mais importante para íons ^{10}B lentos penetrando em Si provém do espalhamento dos elétrons de valência dos átomos do alvo pelo íon incidente.

A presente tese de doutoramento, a qual resultou deste estudo experimental-teórico, está organizada da seguinte forma. No capítulo 1, revisamos a teoria de interação de íons energéticos com a matéria. A técnica experimental básica empregada no presente estudo, a Espectrometria de Retroespalhamento de Rutherford (RBS) padrão, é estudada no capítulo 2. Os princípios físicos básicos que regem o movimento governado de partículas energéticas carregadas ao longo de um canal axial de um cristal são discutidos no capítulo 3. No capítulo 4, detalhamos o procedimento experimental empregado no presente estudo e os subseqüentes resultados. Todos os resultados obtidos são discutidos no capítulo 5, onde também apresentamos nossas conclusões deduzidas desses resultados. Uma revisão sobre o cálculo de potenciais interatômicos é feita no apêndice A. No apêndice B, apresentamos uma revisão de trabalhos experimentais relacionados com a medida da perda de energia de íons canalizados. O algoritmo utilizado para "extrair" somente a contribuição das partículas canalizadas para o espectro de RBS de canalização, no caso do estudo da dependência angular da perda de energia eletrônica, é desenvolvido no apêndice C. Publicações relacionadas com o estudo descrito nesta tese estão no apêndice D.

Capítulo 1

INTERAÇÃO DE ÍONS COM A MATÉRIA

1.1 Introdução

O freamento de íons energéticos penetrando na matéria deve-se a dois tipos de processos: a) a transferência de energia para os elétrons do meio e b) colisões com os átomos do alvo como um todo, as quais são regidas pela energia potencial de interação entre o íon incidente e os átomos que compõe o alvo. A energia média perdida por unidade de caminho percorrido pelo íon é chamada **poder de freamento**. A parcela decorrente de excitações e ionizações do alvo e/ou do próprio íon recebe o nome de **poder de freamento eletrônico** ou **inelástico**, e aquela transferida na forma de energia cinética para os átomos do alvo é chamada **poder de freamento nuclear** ou **elástico**. Esses dois processos de perda energia têm sido considerados independentes. Porém, nos últimos anos, têm aparecido evidências experimentais de correlação entre ambos (Grande, 1989). A figura 1.1 mostra a dependência com a energia dos poderes de freamento eletrônico e nuclear.

Na próxima seção, abordaremos o problema do cálculo do poder de freamento nuclear e, na seção seguinte, estudaremos o poder de freamento eletrônico. Consideraremos ambas as contribuições para o poder de freamento separadamente, i.e., sem considerar a correlação existente entre elas.

1.2 Poder de Freamento Nuclear

O poder de freamento nuclear está relacionado com a energia cinética transferida pelo íon incidente aos átomos-alvos numa colisão. Uma abordagem usual do problema consiste em considerar somente colisões binárias, i.e., o projétil interage com um único átomo-alvo de cada vez. Nessa aproximação, o freamento do íon dá-se por uma sucessão de colisões binárias com os átomos do alvo.

A energia cinética transferida elasticamente de um projétil de massa M_1 e energia E no sistema

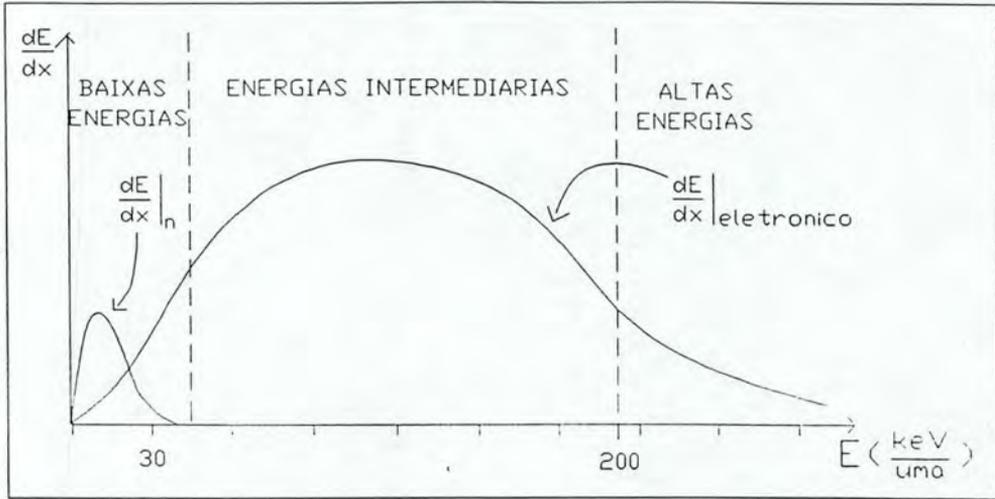


Fig. 1.1: Representação qualitativa dos poderes de freamento nuclear e eletrônico.

de coordenadas do laboratório para um átomo-alvo de massa M_2 em repouso é dada por (Goldstein, 1980: cap. 3):

$$T = \gamma E \text{sen}^2\left(\frac{\Theta}{2}\right), \tag{1.1}$$

onde

$$\gamma \equiv \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2}, \tag{1.2}$$

e Θ é o ângulo de espalhamento do projétil no sistema de coordenadas do centro-de-massa. Classicamente, este pode ser determinado em termos do parâmetro de impacto e da energia do projétil:

$$\Theta(p, E) = \pi - 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{pdr}{r^2 \sqrt{1 - U(r)/E_{CM} - p^2/r^2}}, \tag{1.3}$$

sendo a energia do projétil no sistema de coordenadas do centro-de-massa E_{CM} relacionada com a energia E através da relação

$$E_{CM} = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E. \tag{1.4}$$

U é a energia potencial de interação entre os dois átomos e r_0 , a distância mínima de aproximação entre o projétil e o átomo-alvo, dada pela raiz do radicando da equação 1.3:

$$1 - U(r_0)/E_{CM} - p^2/r_0^2 = 0. \quad (1.5)$$

Consideremos um arranjo de átomos aleatoriamente distribuídos com uma densidade uniforme de átomos por unidade de volume N . Um íon incidindo sobre o mesmo, ao atravessar uma distância Δx , sofre, em média, um número de colisões $\bar{n}(p)dp$ com átomos-alvo situados a parâmetros de impacto entre p e $p + dp$. Esse número é igual ao produto do número de átomos do alvo por unidade de área em Δx pela área do anel entre p e $p + dp$:

$$\bar{n}(p)dp = 2\pi N \Delta x p dp. \quad (1.6)$$

Assim, a energia média transferida nessas colisões é

$$d\overline{\Delta E} = N \Delta x T(p) 2\pi p dp. \quad (1.7)$$

Somando sobre todos os parâmetros de impacto, obtemos

$$\overline{\Delta E} = N \Delta x \int_0^\infty T(p) 2\pi p dp. \quad (1.8)$$

No limite $\lim \Delta x \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dE}{dx}\right)_n &\equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{\overline{\Delta E}}{\Delta x}\right) \\ &= N \int_0^\infty T_n(p) 2\pi p dp \\ &= 2\pi N \int_0^{2\pi} T_n(p) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n(\Theta) \sin\Theta d\Theta \\ &= N \int T_n(p) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n(\Theta) d\Omega \\ &= N \int T_n d\sigma_n, \end{aligned} \quad (1.9)$$

onde $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n(\Theta)$ é a seção de choque diferencial para espalhamentos elásticos e, para chegar à expressão 1.9, utilizamos as identidades

$$d\sigma_n \equiv \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n(\Theta) d\Omega \equiv 2\pi \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n(\Theta) \sin\Theta d\Theta \equiv 2\pi p dp \quad (1.10)$$

e a simetria cilíndrica do problema, introduzindo o subscrito n , em referência ao poder de freamento nuclear.

Como vemos, $\left(\frac{dE}{dx}\right)_n$ é proporcional à densidade atômica volumétrica. Para eliminar essa dependência, definimos a seção transversal de freamento ("stopping cross-section"):

$$\epsilon_n \equiv \frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dx}\right)_n. \quad (1.11)$$

Introduzindo na eq. 1.9 o valor da energia transferida numa colisão binária dada por 1.1 e adaptando a eq. 1.9 para ϵ_n , obtemos

$$\epsilon_n = 2\pi\gamma E \int_0^\infty \text{sen}^2(\Theta/2) p dp \quad (1.12)$$

ou

$$\epsilon_n = 2\pi\gamma E \int_0^\pi \text{sen}^2(\Theta/2) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n (\Theta) \text{sen}(\Theta) d\Theta. \quad (1.13)$$

A seção de choque diferencial, que figura na equação acima, é calculada através de

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n (\Theta) = \frac{p}{\text{sen}\Theta} \frac{1}{\left|\frac{d\Theta}{dp}(p, E)\right|} \quad (1.14)$$

e, como vemos da eq. 1.3, ela é um funcional da função energia potencial de interação entre o projétil e o átomo-alvo.

Vejamos três exemplos de função energia potencial e a seção de choque diferencial de espalhamento e seção transversal de freamento resultantes:

- (i) um potencial tipo coulombiano, $U(r) \sim \frac{1}{r}$, resulta em $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n (\Theta) \sim \frac{1}{E^2}$ e $\epsilon_n \sim \frac{1}{E}$ e
- (ii) um potencial do tipo esfera rígida produz $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n \sim 1$ e $\epsilon_n \sim E$.

O potencial de interação entre o íon incidente e o átomo-alvo ("potencial interatômico") é a componente principal que entra no cálculo do poder de freamento nuclear. O apêndice A é dedicado a esse tópico.

1.3 Poder de Freamento Eletrônico

Parte da energia transferida pelo íon incidente aos átomos-alvo é utilizada para promover excitação e ionização dos átomos que compõe o alvo. Na região de alta energia, o poder de freamento eletrônico é dominado pela contribuição oriunda da excitação dos elétrons das camadas internas do átomo-alvo. O comportamento funcional da perda de energia eletrônica nessa região é bem descrito pela Teoria de Bethe, a qual é baseada na Aproximação de Born de Onda Plana

(PWBA). Já na região de baixa energia, onde processos de perda de energia envolvendo os elétrons mais internos do alvo têm baixas probabilidades, o poder de freamento deve-se à interação com os elétrons de valência. Nessa região de energia, efeitos de estado sólido têm de ser levados em conta. As teorias que descrevem o poder de freamento eletrônico nesse regime são baseadas no modelo de gás de elétrons-livres. Para energias do projétil intermediárias, entretanto, cálculos perturbativos de baixa ordem são insuficientes, sendo necessários cálculos mais sofisticados para dar conta dos diferentes tipos de interação que tomam lugar para íons incidentes com energia nessa faixa. Cálculos de primeiros princípios, assim chamados cálculos de canais-acoplados, têm sido bem sucedidos em descrever o freamento de íons nessa faixa de energia atravessando alvos gasosos (H e He).

1.3.1 Cálculo do Poder de Freamento Eletrônico para Altas Energias do Projétil: Aproximação de Born de Onda Plana (PWBA)

Consideremos uma partícula energética de carga Z_1 , massa M_1 e momentum inicial $\hbar\vec{k}_i$ (energia cinética inicial não-relativística $T_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2M_1}$) incidindo sobre um átomo estacionário de número atômico Z_2 . Seja $\hbar\vec{k}_f$ o momentum da partícula espalhada. Um desenho esquemático da colisão é mostrado na fig. 1.2. Os índices p , t e e referem-se, respectivamente, ao projétil, ao "caroço iônico" do alvo e ao elétron ativo.

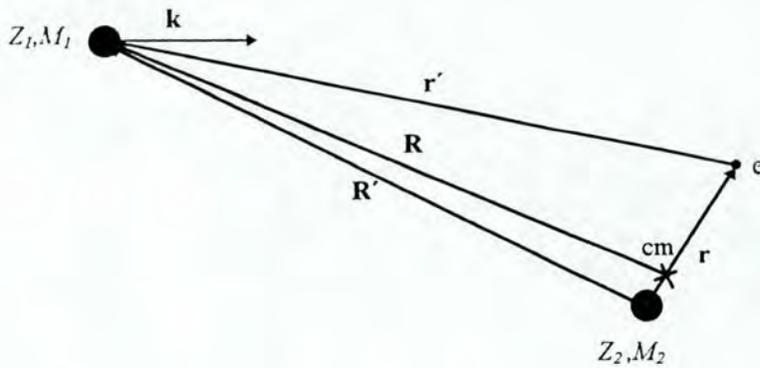


Fig. 1.2: Diagrama vetorial para um íon energético de massa M_1 e carga Z_1 incidindo sobre um átomo-alvo estacionário de massa M_2 e carga Z_2 . cm é o centro de massa do sistema constituído pelo e^- e pelo "caroço iônico" do átomo-alvo.

Nesta subseção, usaremos unidades atômicas ($e = \hbar = m = 1$).

A seção de choque diferencial de espalhamento é dada por (McDowell e Coleman, 1970)

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{i \rightarrow f} = \frac{\mu^2}{4\pi^2} \frac{k_f}{k_i} |T_{i \rightarrow f}|^2, \quad (1.15)$$

onde μ é a massa reduzida do sistema formado pelo núcleo do átomo-alvo e pelo elétron ativo. $T_{i \rightarrow f}$ é a matriz de transição do estado inicial i para o estado final f . Na Aproximação de Born de Onda Plana, a matriz T é dada por

$$T_{i \rightarrow f} = \langle e^{ik_f \cdot \vec{R}} \varphi_f(\vec{r}) | V_{\text{int}}(\vec{r}, \vec{R}) | e^{ik_i \cdot \vec{R}} \varphi_i(\vec{r}) \rangle, \quad (1.16)$$

onde

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + V_{te}(\vec{r}) \right] \varphi_a = \varepsilon_a \varphi_a. \quad (1.17)$$

Se V_t é o potencial eletrostático gerado pelo "caroço iônico" do alvo, a energia potencial $V_{te}(r) = V_t(r)$. Aqui, estamos considerando o modelo de elétrons independentes. O potencial V_t pode ser obtido, por exemplo, através do método Hartree-Fock-Slater.

O valor do termo perturbativo V_{int} é dado pela equação

$$V_{\text{int}}(\vec{r}', \vec{R}') = V_{pe}(\vec{r}') + V_{pt}(\vec{R}'). \quad (1.18)$$

Da fig. 1.2, vemos que $\vec{r}' \simeq \vec{R} - \vec{r}$ e $\vec{R}' \simeq \vec{R}$. Dessa forma

$$V_{\text{int}}(\vec{r}', \vec{R}') \simeq V_{\text{int}}(\vec{r}, \vec{R}) = V_{pe}(\vec{R} - \vec{r}) + V_{pt}(\vec{R}), \quad (1.19)$$

com

$$V_{pe}(\vec{R} - \vec{r}) = \frac{-Z_1}{|\vec{R} - \vec{r}|} \quad (1.20)$$

e

$$V_{pt}(R) = Z_1 V_t(R). \quad (1.21)$$

Sendo conhecida a seção de choque diferencial de espalhamento, a seção transversal de freamento pode ser calculada através da equação

$$\epsilon_e = \sum_{i,f} (\epsilon_f - \epsilon_i) \sigma_{i \rightarrow f}, \quad (1.22)$$

com

$$\sigma_{i \rightarrow f} \equiv \int d\Omega \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{i \rightarrow f} \quad (1.23)$$

Teoria de Bethe

Bethe formulou o primeiro modelo quântico completo do problema de freamento eletrônico. Nesse modelo, ele utilizou a Aproximação de Born de Onda Plana (PWBA).

A fórmula de Bethe (Bethe e Jackiw, 1968: p. 294; Cruz, 1986) é expressa por

$$- \left(\frac{dE}{dx} \right)_e^{\text{Bethe}} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} N Z_2 \ln \frac{2mv^2}{I}, \quad (1.24)$$

onde I é a energia de excitação média de um átomo-alvo (ou molécula), sendo determinada através da relação

$$\ln I \equiv \frac{1}{Z_2} \sum_i \sum_f f_{i \rightarrow f} \ln(\epsilon_f - \epsilon_i), \quad (1.25)$$

com ϵ_f (ϵ_i) sendo a energia do estado final (inicial) do elétron do átomo-alvo e $f_{i \rightarrow f}$, sua força de oscilador de dipolo dada por

$$f_{i \rightarrow f} \equiv (\epsilon_f - \epsilon_i) | \langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle |^2, \quad (1.26)$$

onde φ_j é a função de onda que descreve o estado quântico de um elétron no nível atômico j .

Esse resultado está baseado em duas aproximações essenciais:

(a) o potencial de interação entre o projétil e o átomo-alvo deve ser suficientemente fraco para poder ser considerado (dentro do espírito da Aproximação de Born) como um termo perturbativo e

(b) a velocidade do projétil deve ser muito maior do que a velocidade orbital de qualquer elétron do alvo.

Embora a fórmula de Bethe descreva qualitativamente a estrutura Z_2 do poder de freamento eletrônico de uma forma bastante boa, ela não fornece valores acurados de ϵ_e , quando comparados com resultados experimentais.

Quando $\frac{Z_1 e^2}{\hbar v} \gg 1$, modelos não-perturbativos devem ser usados. Nesse limite, Bohr demonstrou a aplicabilidade da mecânica clássica à descrição do processo de colisão.

1.3.2 Teoria de Bohr

De acordo com Bohr, o freamento eletrônico pode ser considerado como um processo em que energia é transferida do íon incidente para elétrons-livres, contanto que o tempo de interação seja muito menor do que o período do movimento orbital dos elétrons do alvo. Caso contrário, o elétron terá tempo para ajustar seu movimento de acordo com o potencial de interação elétron-projétil, absorvendo muito menos energia na colisão.

Para levar em conta o efeito da ligação do elétron ao átomo-alvo, Bohr considerou o átomo como um conjunto de osciladores harmônicos carregados sujeitos à força externa da interação eletrostática coulombiana entre o íon e o elétron.

O tempo de interação é da ordem de p/v . Então, mesmo para velocidades do projétil muito altas, o tempo de interação será grande para parâmetros de impacto grandes. Portanto, a condição de que o tempo de interação seja curto é mais corretamente expressa em termos do parâmetro de impacto. Ou seja, p deve satisfazer $p \ll v/\omega \equiv p_0$, onde ω é a frequência do oscilador, a qual está, obviamente, relacionada com a energia de um elétron num átomo-alvo.

Para parâmetros de impacto muito menores do que p_0 , o efeito da ligação do elétron pode ser desprezado, e a energia transferida Q , nesse caso, é calculada através da transferência de energia numa colisão binária entre o íon-projétil e o elétron-livre (Jackson, 1983: p. 483; Cruz, 1986)

$$Q_{p \ll p_0} = \frac{2(Z_1 e^2)^2}{m v^2} \frac{1}{p^2 + \left(\frac{Z_1 e^2}{m v^2}\right)^2} \quad (1.27)$$

No caso $p \geq p_0$, o efeito da ligação tem de ser levado em conta, e a energia transferida para o elétron é dada por (Jackson, 1983: p. 483):

$$Q = \frac{\pi}{m} |\hat{F}(\omega)|^2, \quad (1.28)$$

onde \hat{F} é a transformada de Fourier da força \vec{F} de interação entre o projétil e o elétron.

Introduzindo a força de Coulomb na equação 1.28 e supondo que a trajetória do projétil é uma linha reta que não sofre alteração na colisão com o elétron, obtemos

$$Q = \frac{2(Z_1 e^2)^2 \omega^2}{m v^4} \left[K_0^2\left(\frac{\omega p}{v}\right) + K_1^2\left(\frac{\omega p}{v}\right) \right], \quad (1.29)$$

onde K_0 e K_1 são as funções de Bessel modificadas de ordem zero e 1, respectivamente.

A seção transversal de freamento eletrônico é dada pela seguinte expressão (inspirada na eq. 1.9):

$$\epsilon_e \equiv \frac{1}{NZ_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_e = \int_0^\infty Q(p) 2\pi p dp, \quad (1.30)$$

A equação 1.29 é válida para todos os valores de p . No entanto, quando a mesma é substituída na equação 1.30, a integral diverge. Para contornar esse problema, pode-se adotar um certo valor $p_{min} \neq 0$ como limite inferior da integral definida. Para determinar esse valor de parâmetro de impacto, exige-se, então, que o integrando 1.29, quando avaliado em p_{min} , forneça o valor da energia transferida no encontro binário frontal entre o projétil e o elétron. O valor p_{min} que satisfaz essa condição é $p_{min} = \frac{|Z_1|e^2}{mv^2}$. Substituindo-se a equação 1.29 na equação 1.30 e adotando o limite de integração inferior p_{min} adequado, resulta

$$\epsilon_e^{Bohr} = 4\pi \frac{(Z_1 e^2)^2}{mv^2} \ln \left(\frac{1,123 mv^3}{|Z_1| \omega e^2} \right). \quad (1.31)$$

A principal diferença entre os modelos de Bohr e de Bethe reside no uso de idéias clássicas, tais como órbitas bem definidas e parâmetros de impacto, no primeiro caso e conceitos da teoria quântica de espalhamento, tais como amplitudes de espalhamento, no segundo.

A Teoria de Bohr do poder de freamento eletrônico descreve acuradamente os resultados experimentais, desde que (i) $v \gg v_0$, sendo $v_0 = \frac{c}{137}$, a velocidade de Bohr, e (b) $Z_1/(v/v_0) \gg 1$, condição que dá o limite de aplicabilidade da Mecânica Clássica.

1.3.3 Cálculo do Poder de Freamento Eletrônico para Baixas Energias do Projétil: Método dos Deslocamentos de Fase ("Phase Shifts Method")

Baseados no modelo de gás de elétrons-livres com a suposição adicional de espalhamento individual e independente dos elétrons do alvo pelo projétil, podemos calcular o poder de freamento de um íon lento em termos dos deslocamentos de fase da função de onda dos elétrons do alvo. O deslocamento de fase é devido ao espalhamento pelo potencial efetivo do íon incidente. O efeito do princípio de Pauli é incluído restringindo-se os estados eletrônicos possíveis após a colisão somente àqueles estados que ficam fora da esfera de Fermi.

Nessa abordagem, a perda de energia eletrônica pode ser expressa em termos da seção de choque de transporte (Echenique e Uranga, 1991):

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{dE}{dx}\right)_e &= \int d\vec{v}_e f_0(\vec{v} + \vec{v}_e) |\vec{v}_e| m \vec{v}_e \sigma_{\text{Tr}}(|\vec{v}_e|) \\
 &= 2\pi m \int_0^\infty dx x^2 f_0(x) \int_{-1}^1 du \sigma_{\text{Tr}}(y) y(xu - v).
 \end{aligned} \tag{1.32}$$

Aqui, m e v_e são a massa e a velocidade do elétron, respectivamente, f_0 , a função distribuição de partículas em um gás de elétrons, v , a velocidade do íon, $\vec{x} \equiv \vec{v} + \vec{v}_e$ e

$$y \equiv \sqrt{v^2 + x^2 - 2xvu}. \tag{1.33}$$

σ_{Tr} é a seção de choque de transporte para elétrons, a qual é definida em termos da seção de choque diferencial de espalhamento $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta)$ através da seguinte expressão

$$\sigma_{\text{Tr}} = 2\pi \int_0^\pi d\theta \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) (1 - \cos\theta). \tag{1.34}$$

Para um potencial esfericamente simétrico, a seção de choque de transporte pode ser escrita como

$$\sigma_{\text{Tr}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \text{sen}^2[\delta_l(k) - \delta_{l+1}(k)], \tag{1.35}$$

onde os δ_l 's são os deslocamentos de fase para espalhamento por um potencial esfericamente simétrico e k é o número de onda do elétron que corresponde à velocidade do projétil. A fim de calcular o deslocamento de fase δ_l da l -ésima onda parcial χ_l da função de onda do elétron, temos de resolver a parte radial da equação de Schrödinger:

$$\frac{d^2\chi_l}{dr^2} + [k^2 + u(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}]\chi_l = 0, \tag{1.36}$$

onde $u(r) \equiv (2m/\hbar^2)U(r)$, sendo $U(r)$ a energia potencial que descreve a interação entre um elétron do alvo e o projétil.

Para $U(r) = 0$, a solução da equação 1.36 tem a forma assintótica

$$\chi_l \sim \text{sen}(kr - \frac{1}{2}l\pi). \tag{1.37}$$

O deslocamento de fase é, então, calculado encontrando-se a diferença entre os nodos da função de onda radial obtida da resolução da equação 1.36 e da solução 1.37 para r grande.

1.3.4 Teoria da Resposta Linear

A abordagem mais usual no estudo do freamento eletrônico de íons energéticos em qualquer intervalo de energia, contudo, consiste na aplicação da Teoria de Resposta Linear de Sistemas Homogêneos (Ritchie, 1959; Calkin e Nicholson, 1967).

Embora estejamos interessados no poder de freamento eletrônico de um íon em um sólido, por simplicidade, começaremos estudando o poder de freamento em um gás de elétrons.

Poder de Freamento em Um Gás de Elétrons

Nesse esquema, o papel do íon incidente é gerar um campo elétrico externo \vec{E}^{ext} que constitui uma perturbação ao gás de elétrons, gerando um campo elétrico induzido:

$$\vec{E}^{\text{ind}} = \left[\frac{1}{\epsilon(\vec{k}, \omega)} - 1 \right] \vec{E}^{\text{ext}}, \quad (1.38)$$

onde \vec{E}^{ext} e \vec{E}^{ind} são as transformadas de Fourier dos campos elétricos externo e induzido, respectivamente, e $\epsilon(\vec{k}, \omega)$ é a constante dielétrica longitudinal do plasma eletrônico.

A energia dissipada por unidade de tempo pelo íon incidente $\frac{dW}{dt}$ é dada por

$$\frac{dW}{dt} = \vec{F} \cdot \vec{v} = \vec{v} \cdot \int \rho_{\text{ion}}(\vec{r}, t) \vec{E}^{\text{ind}}(\vec{r}, t) d^3r. \quad (1.39)$$

A distribuição de carga de um projétil de carga nuclear Z_1 movendo-se a uma velocidade v_1 com N elétrons ligados a ele em um meio é dada por

$$\rho_{\text{ion}}(\vec{r}, t) = Z_1 \delta(\vec{r} - \vec{v}t) - \rho_{\text{ion}}^e(\vec{r} - \vec{v}t), \quad (1.40)$$

com o vínculo $\int \rho_{\text{ion}}^e(\vec{r}) d^3r = N$.

Substituindo ρ_{ion} da eq. 1.40 na eq. 1.39, obtemos (Brandt e Kitagawa, 1982):

$$\left(\frac{dE}{dx} \right)_e = \frac{1}{v_1} \frac{dW}{dt} = \frac{2Z_1^2 e^2}{\pi v_1^2} \int \frac{dk}{k} |\rho_{\text{ion}}^e(k)|^2 \int_0^{kv_1} d\omega \omega \text{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(\vec{k}, \omega)} \right], \quad (1.41)$$

onde $\rho_{\text{ion}}^e(k)$ é a transformada de Fourier de $\rho_{\text{ion}}^e(\vec{r})$ no sistema de coordenadas do íon incidente.

A eq. 1.41 não considera efeitos da excitação e/ou ionização dos elétrons do íon incidente. Ela considera também a densidade eletrônica do íon (eq. 1.40) como sendo rígida, i. e., não se deforma, quando o íon se aproxima do átomo-alvo. O efeito da excitação do gás de elétrons está todo contido na constante dielétrica $\epsilon(\vec{k}, \omega)$.

Restringindo-nos ao caso de um íon nu, o poder de freamento eletrônico em um meio pode ser escrito na forma:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv_1^2} nL(n, v_1), \quad (1.42)$$

onde L depende somente da densidade eletrônica do meio e da velocidade do projétil.

Por exemplo, para $v_1 \leq v_F$ (Mann e Brandt, 1981),

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \sim f(n) \frac{v_1}{v_F(n)}, \quad (1.43)$$

onde f depende só da densidade eletrônica do alvo, $v_F = \frac{\hbar}{m}(3\pi^2 n)^{1/3}$ é a velocidade de Fermi do gás eletrônico, m , a massa de um elétron e $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, sendo h , a constante de Planck.

Para $v_1 \gg v_F$ (Ritchie, 1959),

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \sim Z_1^2 \frac{n}{v_1^2} \ln\left[\frac{2v_1^2}{\omega_p(n)}\right], \quad (1.44)$$

sendo $\omega_p = \sqrt{4\pi e^2 n/m}$ a frequência de excitação de plásmos.

As forma funcionais de L e f dependem do tipo de aproximação usada para calcular $\epsilon(\vec{k}, \omega)$ (Calkin e Nicholson, 1967; Mann e Brandt, 1981).

Poder de Freamento Eletrônico em Sólidos

Em um sólido, ao contrário de um gás, não temos densidade eletrônica uniforme. Lindhard e Scharff (1953 e 1954) e Lindhard e Winther (1964) adaptaram a equação 1.42 para um sólido, escrevendo-a localmente (Aproximação de Densidade Local):

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} n(\vec{r}) L[n(\vec{r}), v], \quad (1.45)$$

sendo $L(n, v)$ chamada função de interação de freamento.

A seção transversal de freamento é, então, calculada através de

$$\epsilon_e = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} \int d^3r n_a(\vec{r}) L[n(\vec{r}), v], \quad (1.46)$$

onde $n_a(\vec{r})$ é a densidade de elétrons por átomo do alvo:

$$\int d^3r n_a(\vec{r}) = Z_2. \quad (1.47)$$

Para baixas velocidades do íon incidente ($v_1 \ll v_0 Z_1^{2/3}$), Lindhard e Scharff (1961) chegaram à seguinte aproximação:

$$\epsilon_e = 8\pi e^2 a_0 \xi \frac{Z_1 Z_2 v_1}{Z v_0}, \quad (1.48)$$

onde a_0 e v_0 são o raio e a velocidade de Bohr, respectivamente, $\xi \approx Z^{1/6}$ e

$$Z = \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{3/2}. \quad (1.49)$$

Firsov (1959) também encontrou a mesma dependência linear com a velocidade.

No regime de altas velocidades do projétil ($v_1 \gg v_0 Z_1^{2/3}$), temos que

$$\epsilon_e = \frac{Z_1^2}{v_1^2} f(\text{alvo}, v_1), \quad (1.50)$$

onde f , como indicado, é uma função que depende só do alvo e da velocidade do projétil.

Como uma consequência da equação acima, para um mesmo alvo e uma mesma velocidade do íon incidente, podemos escrever

$$\frac{\epsilon_e(Z_1, v_1)}{\epsilon_e(Z_1 = 1, v_1)} = Z_1^2, \quad v_1 \gg v_0 Z_1^{2/3}. \quad (1.51)$$

Vemos, então, que, a altas velocidades do íon incidente, o poder de freamento de qualquer íon em qualquer alvo escala com o poder de freamento do próton nesse mesmo alvo na mesma velocidade, sendo a constante de proporcionalidade o quadrado do número atômico do íon incidente.

Até aqui temos considerado um íon nu. A velocidades intermediárias, situação em que não é razoável a hipótese de que o íon que penetra um material encontra-se desprovido de seus elétrons, podemos adaptar a equação acima, substituindo a carga Z_1 do núcleo por uma carga efetiva Z_1^* (Brandt e Kitagawa, 1982):

$$\frac{\epsilon_e(Z_1, v_1)}{\epsilon_e(Z_1 = 1, v_1)} = Z_1^{*2}. \quad (1.52)$$

Brandt e Kitagawa (1982) encontraram uma expressão para a carga efetiva. Eles utilizaram uma densidade eletrônica do tipo

$$\rho_{ion}^e(r) = \frac{N_1}{4\pi\Lambda^3} \frac{\Lambda}{r} \exp(-r/\Lambda), \quad (1.53)$$

onde Λ é um parâmetro variacional. A energia interna do íon [que depende de $\rho_{ion}^e(r)$] foi minimizada com relação a Λ , encontrando-se o seguinte valor para esse parâmetro:

$$\Lambda(q) = \frac{0,48a_0(1-q)^{2/3}}{Z_1^{1/3}[1 - \frac{1}{7}(1-q)]}, \quad (1.54)$$

com $q \equiv 1 - N_1/Z_1$.

A altas velocidades a constante dielétrica do meio pode ser calculada através da "plasmon-pole approximation" (Echenique et al., 1979):

$$\epsilon(k, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_g^2 + \beta^2 k^2 + k^4/4 - \omega(\omega + i\gamma)}, \quad (1.55)$$

sendo a frequência de ressonância coletiva $\Omega_0 = (\omega_p^2 + \omega_g^2)^{1/2}$, com $\beta^2 = \frac{3}{5}k_F^2$, onde $k_F = 1,919r_s^{-1}$ é o momentum de Fermi dos elétrons do meio e γ está relacionada com os processos de "damping".

Quando $\gamma \rightarrow 0$,

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(k, \omega)} \right] = \frac{\pi\omega_p^2}{2A} \delta(\omega - A), \quad (1.56)$$

com

$$A^2 = \Omega_0^2 + \beta^2 k^2 + k^4/4. \quad (1.57)$$

Quando substituimos as eqs. 1.53, 1.54, 1.56 e 1.57 em 1.41 e consideramos $v_1 < v_F$ e $k_F \Lambda \ll 1$, obtemos

$$\frac{Z_1^*}{Z_1} \equiv \xi = q + C(v_F/v_0)(1-q) \ln[1 + (\frac{2v_F \Lambda}{a_0 v_0})^2], \quad (1.58)$$

onde ξ é chamada carga efetiva fracional, v_F é a velocidade de Fermi, $C(v_F/v_0) \approx 1/2$ e a fração de ionização $q \equiv 1 - N_1/Z_1$ é calculada através de (Ziegler et al., 1985, p. 98-99):

$$q = 1 - \exp(-0,92y_r), \quad (1.59)$$

sendo

$$y_r \equiv \frac{v_r}{v_0 Z_1^{2/3}} \quad (1.60)$$

e a velocidade do projétil em relação à velocidade dos elétrons de condução em um sólido v_r é dada por:

$$v_r = \begin{cases} v_1 \left[1 + \frac{1}{5} \left(\frac{v_F}{v_1} \right)^2 \right], & v > v_F \\ \frac{3}{4} v_F \left[1 + \frac{2}{3} \left(\frac{v_1}{v_F} \right)^2 - \frac{1}{15} \left(\frac{v_1}{v_F} \right)^4 \right], & v_1 \leq v_F \end{cases} \quad (1.61)$$

A seção transversal de freamento do próton pode ser obtida das tabelas de Andersen e Ziegler (Ziegler et al., 1985; Andersen e Ziegler, 1977).

Poder de Freamento de Ziegler, Biersack e Littmark (ZBL)

Ziegler et al. (1985) realizaram uma compilação de dados experimentais de poder de freamento eletrônico. A maioria dos dados experimentais está concentrada nas regiões de energias intermediária e alta. O seu procedimento de escalonamento é ligeiramente diferente daquele de Brandt e Kitagawa (1982). ZBL escalonaram os poderes de freamento eletrônico experimentais para diversos íons em diferentes alvos com os poderes de freamento do próton nos mesmos alvos. Calcularam a correspondente carga efetiva fracional e , posteriormente, resolveram a eq. 1.58 para o comprimento de blindagem Λ em função da fração de ionização q . Em vez de usar a equação 1.54 [da teoria de escalonamento de Brandt e Kitagawa (1982)], encontraram uma função empírica $\Lambda = f(qZ_1^{2/3})$ similar para todas as combinações íon-alvo. Após isso, relacionaram a fração de ionização q de um íon em um meio com a velocidade efetiva y_r . Exigindo que essa relação fosse uma função universal para todas as combinações tabuladas, obtiveram

$$q = 1 - \exp(0,803y_r^{0,3} - 1,3167y_r^{0,6} - 0,3815y_r - 0,00898y_r^2). \quad (1.62)$$

Para baixas energias, onde existem poucos dados experimentais para fazer o escalonamento, eles utilizaram a dependência linear com a velocidade do projétil, exceto para $Z_2 = 6, 14$ e 32 , onde $p = 0,75$.

Para obter ϵ_e para qualquer Z_1, Z_2 e v_1 , o procedimento ZBL faz o seguinte: calcula v_r com a eq. 1.61; y_r com a eq. 1.60; q , com 1.62; Λ com 1.54; Z_1^* com 1.58 e, finalmente, $\epsilon_e(Z_1, Z_2, v_1)$ com a eq. 1.52.

O poder de feamento eletrônico ZBL é utilizado na rotina de computador RSTOP (Ziegler et al., 1985).

1.3.5 Cálculo do Poder de Freamento Eletrônico para Energias do Projétil Altas e Intermediárias: Método dos Canais Acoplados.

O método de cálculo de canais acoplados (Schiwietz, 1990) constitui uma teoria quântica

de colisão aplicável ao cálculo do poder de freamento de íons de energias intermediárias (≈ 50 keV/uma) e altas. Esse tipo de cálculo incorpora funções de onda atômicas exatas centradas no alvo, pacotes de onda contínuos e trajetórias dinâmicas de projéteis curvas.

Nesta subseção, empregaremos unidades atômicas: $e = m = \hbar = 1$).

Excitação atômica e processos de ionização são levados em conta através do operador Hamiltoniano para um sistema de três corpos (v. fig. 1.3)

$$H = T_p(\vec{r}_p) + T_t(\vec{r}_t) + T_e(\vec{r}_e) + V_{pt}(\vec{R}) + V_{te}(\vec{r}) + V_{pe}(\vec{R} - \vec{r}), \quad (1.63)$$

onde T e V denotam as energias cinética e potencial, respectivamente. O índices p , t e e , por sua vez, referem-se ao projétil, ao "caroço iônico" do alvo e ao elétron, respectivamente.

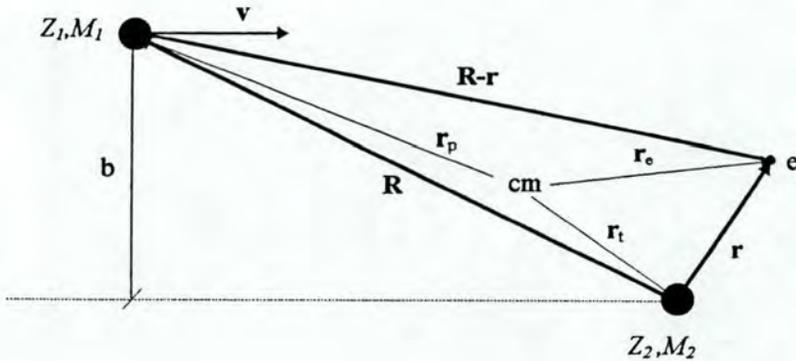


Fig. 1.3: Diagrama vetorial para o íon nu (Z_1, M_1), o "caroço iônico" do alvo (Z_2, M_2) e um elétron ativo (e^-). \vec{r}_p , \vec{r}_t e \vec{r}_e são as posições do projétil, do alvo e do elétron no sistema de referência do centro-de-massa do sistema.

O método do parâmetro de impacto é empregado, i.e., supõe-se que $\vec{r}_p(t)$ e $\vec{r}_t(t)$ são trajetórias clássicas:

$$\begin{cases} \vec{r}_p = \vec{r}_p(t, p) \\ \vec{r}_t = \vec{r}_t(t, p). \end{cases} \quad (1.64)$$

Esse método é válido (Baur et al., 1974), contanto que:

$$\frac{Z_1 Z_2 M_1}{q_{i \rightarrow f}} \approx \frac{Z_1 Z_2 M_1 v}{\Delta E_{i \rightarrow f}} \gg 1, \quad (1.65)$$

onde $q_{i \rightarrow f}$ é o momentum transferido. Esse critério é sempre válido, se o íon tem, ao menos energias térmicas.

Se supomos que os elétrons possuem um movimento independente, podemos resolver a equação de Schrödinger para um elétron ativo:

$$\left[i \frac{\partial}{\partial t} - H_e(t) \right] \Phi_e(t) = 0, \quad (1.66)$$

com

$$H_e(t) = H_{te} + V_{pe}(\vec{R}(t), \vec{r}), \quad (1.67)$$

$$V_{pe}(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{-Z_1}{|\vec{R}(t) - \vec{r}|}, \quad (1.68)$$

$$H_{te} = -V_t(\vec{r}_e - \vec{r}_t(t)) + T_e(\vec{r}_e). \quad (1.69)$$

V_t é tomado como um potencial Hartree-Fock-Slater. O uso de um potencial Hartree-Fock exclui correlações entre estados eletrônicos final e inicial que vão além da teoria de campo médio.

A coordenada do elétron será medida a partir do núcleo acelerado do alvo e é a única variável dinâmica. Então, o sistema de referência está centrado no alvo. Em um sistema de referência como esse, surgem forças não-inerciais. O hamiltoniano correspondente é

$$H_{te} = -V_t(\vec{r}) + T_e(\vec{r}) + V_{recuo}(\vec{r}, \vec{r}_t(t)). \quad (1.70)$$

É razoável desprezar o termo V_{recuo} . O assim chamado efeito de recuo leva a contribuições insignificantes para seções de choque totais, mas pode ser importante para colisões muito próximas ($b < 10^{-3}$ u.a.).

Dada a função de onda eletrônica dependente do tempo Φ_e , um hamiltoniano clássico para as partículas pesadas pode ser definido como

$$H_h = T_p(\vec{r}_p) + T_t(\vec{r}_t) + V_{pt}(\vec{R}) + \langle \Phi_e | V_{te}(\vec{r}) | \Phi_e \rangle + \langle \Phi_e | V_{pe}(\vec{R} - \vec{r}) | \Phi_e \rangle, \quad (1.71)$$

com $V_{pt}(\vec{R}) = Z_1 V_t(\vec{R})$.

Essa equação é resolvida através da aplicação das leis de Newton de movimento. O último termo da eq. 1.71 foi desprezado, devido a sua pequena influência sobre o movimento do "caroço iônico" do alvo, no caso de uma função de onda eletrônica fortemente centrada no alvo. Deve ser

ênfatisado que a eq. 1.71 introduz pela primeira vez uma trajetória de projétil curva no método do parâmetro de impacto. Portanto, o movimento do projétil é acoplado ao do elétron ativo.

Funções de Onda e Dinâmica de Colisões

O ponto de partida é a expansão da função de onda eletrônica dependente do tempo Φ_e em termos de autofunções φ_i do hamiltoniano H_{te} do alvo:

$$\Phi_e(\vec{r}, t) = \Phi_B(\vec{r}, t) + \Phi_C(\vec{r}, t), \quad (1.72)$$

$$\Phi_B(\vec{r}, t) = \sum_{n,l,m} a_{n,l,m}(t) e^{-iE_{n,l}t} \varphi_{n,l,m}(\vec{r}), \quad (1.73)$$

$$\Phi_C(\vec{r}, t) = \sum_{l,m} \int_0^\infty d\varepsilon b_{l,m}(\varepsilon, t) e^{-i\varepsilon t} \varphi_{\varepsilon,l,m}(\vec{r}), \quad (1.74)$$

$$\varphi_{n,l,m}(\vec{r}) = \frac{1}{r} u_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (1.75)$$

e

$$E_{n,l} u_{n,l}(r) = \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - V_t(r) \right] u_{n,l}(r), \quad (1.76)$$

onde $E_{n,l}$ e o subscrito n devem ser substituídos por ε para estados contínuos.

A solução das únicas incógnitas, os coeficientes $a_{n,l,m}$ é direta. A definição de Φ_e (eqs. 1.72, 1.73 e 1.74) para pequenos t é introduzida na equação de Schrödinger dependente do tempo (eq. 1.66):

$$i \frac{d}{dt} a_{j',l',m'}(t) = \sum_{j,l,m} a_{j,l,m}(t) e^{i(E_{j',l'} - E_{j,l})t} \mathcal{V}_{pe}^{j,l,m \rightarrow j',l',m'}(\vec{R}(t)), \quad (1.77)$$

com

$$\mathcal{V}_{pe}^{j,l,m \rightarrow j',l',m'}(\vec{R}(t)) \equiv \langle \varphi_{j',l',m'} | V_{pe}(\vec{R}(t) - \vec{r}) | \varphi_{j,l,m} \rangle \quad (1.78)$$

e

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} a_{n,l,m}(t) = \delta_{n_0, l_0, m_0; n, l, m}. \quad (1.79)$$

As probabilidades de excitação e ionização são dadas pela projeção sobre as funções de estado centradas no alvo assintóticas:

$$P_{n,l,m}(p) = \lim_{t \rightarrow \infty} | \langle \varphi_{n,l,m} | \Phi_e(p, t) \rangle |^2 = \lim_{t \rightarrow \infty} | a_{n,l,m}(p, t) |^2. \quad (1.80)$$

Supondo que o projétil segue trajetórias retilíneas e fazendo $a_{j,l,m}(t) = \delta_{n_0, l_0, m_0; n, l, m}$ na equação 1.77, obtemos a chamada Aproximação Semi-clássica (SCA):

$$a_{j,l,m}(p) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E_{j,l} - E_{j_0, l_0})t} \langle \varphi_{j,l,m} | V_{pe}(p, t; \vec{r}) | \varphi_{j_0, l_0, m_0} \rangle. \quad (1.81)$$

Cálculo do Poder de Freamento

Cada estado excitado ou cada estado contínuo (ionizado) corresponde a uma transferência de energia ΔE ou $\varepsilon + I_B$ bem definida, onde a energia de ligação do estado inicial é denotada por I_B . O valor médio dessa transferência de energia $\bar{Q}(b)$ pode ser definido como:

$$\bar{Q}(p) = n_e \sum_{f=1}^{\infty} P_{i \rightarrow f}(p) \Delta E_{i \rightarrow f} + n_e \int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{dP_{i \rightarrow f}(p, \varepsilon)}{d\varepsilon} (\varepsilon + I_B), \quad (1.82)$$

onde n_e é o número de elétrons do alvo na subcamada.

A seção de choque de freamento é, então, calculada através da integral (v. eq. 1.9)

$$\epsilon_e = \int \bar{Q}(p) d(p^2). \quad (1.83)$$

Capítulo 2

ANÁLISE POR ESPECTROMETRIA DE RETROESPALHAMENTO DE RUTHERFORD

2.1 Introdução

A técnica de Espectrometria de Retroespalhamento de Rutherford (RBS) é uma técnica de análise não destrutiva que permite determinar a composição atômica de materiais em função da profundidade para regiões próximas à superfície dos mesmos (tipicamente para espessuras menores do que $1 \mu\text{m}$).

A idéia conceitual da técnica é bastante simples. Suponha que um feixe de partículas monoenergético e colimado incide sobre uma amostra alvo. As partículas do feixe podem colidir frontalmente com os átomos da amostra, mas esses eventos são de baixa probabilidade, devido a reduzida dimensão dos núcleos atômicos. Para um alvo suficientemente fino, quase todas as partículas incidentes atravessam o mesmo, ocorrendo apenas uma pequena perda de energia. As poucas partículas do feixe que colidem quase frontalmente com átomos do alvo sofrem grandes mudanças em direção e energia. Por outro lado, para um alvo espesso, somente as partículas retroespalhadas a ângulos maiores do que 90° da direção incidente podem ser detectadas.

Uma pequena fração das partículas retroespalhadas incide sobre a área definida pelo ângulo sólido de um detector e pode ser analisada em energia. Tipicamente, são utilizados detectores de estado sólido que produzem um sinal de tensão analógico proporcional à energia da partícula detectada (fig. 2.1). O sinal gerado pelo detector alimenta um pré-amplificador e, logo depois de amplificado, serve de entrada para um analisador multicanal que tem a função de processar e armazenar a informação gerada pelo detector. Isso é feito através da discretização dos eventos em intervalos de energias denominados canais. Um evento de (retro)espalhamento cuja magnitude corresponde à faixa de um dado canal é registrado como uma contagem acrescida a esse canal. Ao fim do experimento, cada canal tem registrado um certo número de contagens (número de partículas detectadas), o que, quando traçado em um gráfico de contagens versus canais constitui

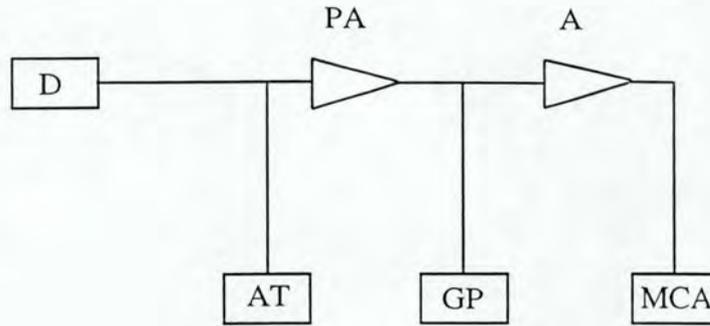


Fig. 2.1: Diagrama em blocos do sistema analisador de um experimento de RBS: D = detector. AT = alta tensão, PA = pré-amplificador, A = amplificador, GP = gerador de pulsos e MCA = analisador multicanal.

o espectro de RBS .

2.2 Processo Físico Básico

A conversão de sinais individuais em um espectro de RBS para distribuições em profundidade de concentrações atômicas em uma amostra reside sobre princípios físicos simples, como veremos a seguir.

2.2.1 Fator Cinemático

Imagine que um feixe de partículas de uma dada energia incide sobre uma amostra. Aquelas poucas partículas que sofrem encontros frontais com caroços atômicos do alvo serão defletidas por causa da força coulombiana que elas encontram. Define-se o fator cinemático K como a razão da energia do projétil após a colisão, E_1 , para aquela antes da colisão, E_0 (ver figura 2.2):

$$K = E_1/E_0. \quad (2.1)$$

Supondo colisões elásticas (a condição necessária é que o valor de energia do feixe seja muito maior que a energia de ligação dos átomos no alvo, porém não tão alto que reações nucleares possam ocorrer) entre duas partículas isoladas e considerando a conservação de energia e de momentum, podemos mostrar que

$$K(M_1, M_2, \theta) = \left\{ \frac{[1 - (M_1/M_2)^2 \sin^2 \theta]^{1/2} + (M_1/M_2) \cos \theta}{1 + (M_1/M_2)} \right\}^2, \quad (2.2)$$

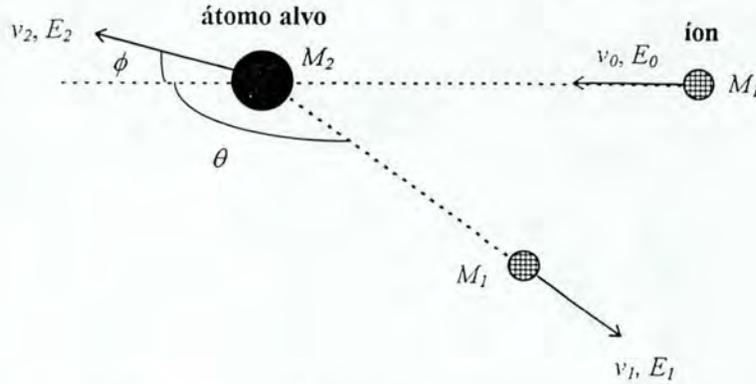


Fig. 2.2: Representação esquemática de uma colisão entre um projétil de massa M_1 , velocidade v_0 e energia E_0 e um átomo alvo de massa M_2 que está inicialmente em repouso. Após a colisão, o projétil e o átomo alvo têm velocidades e energias v_1, E_1 e v_2, E_2 , respectivamente.

onde M_1 e M_2 são as massas atômicas do projétil e do átomo alvo, respectivamente, e θ é o ângulo de espalhamento, i.e., o ângulo entre a direção final e inicial do projétil.

Um evento de espalhamento por átomos da superfície frontal de um alvo é detectado a uma energia $K_{M_2} E_0$. Eventos de espalhamento que ocorrem dentro do material são registrados a energias mais baixas, que decrescem, quando aumenta a profundidade do átomo espalhador em relação à superfície do alvo. Considerando que a intensidade do feixe praticamente não é atenuada, a probabilidade de espalhamento por um dado tipo de átomo a qualquer profundidade é proporcional ao número de átomos desse tipo particular presente lá. Essa é a forma por que um perfil de concentração de um dado elemento é convertido em um sinal de altura correspondente e energia decrescente no espectro de RBS.

A seção de choque diferencial de espalhamento está relacionada com a probabilidade de ocorrência de um evento de espalhamento. Rutherford calculou-a supondo um potencial coulombiano $V(r) = Z_1 Z_2 e^2 / r$, onde Z_1 e Z_2 são as cargas do projétil e do átomo alvo, respectivamente. Nessas condições, a seção de choque diferencial, no sistema de referência do Centro de Massa, é dada por (Marion, 1970: p.307-309, Goldstein, 1980: cap.3):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_{cm} \sin^2(\theta_{cm}/2)} \right]^2, \quad (2.3)$$

onde E_{cm} é a energia no sistema de referência do centro de massa. Já, no sistema de referência de laboratório, é dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \frac{1}{\sin^2(\theta_{cm}/2)} \right]^2 \frac{[(1 - x^2 \sin^2 \theta)^{1/2} + x \cos \theta]^2}{(1 - x^2 \sin^2 \theta)^{1/2}}, \quad (2.4)$$

onde E é a energia no sistema de referência de laboratório, $x \equiv M_1/M_2 \leq 1$ e

$$\operatorname{tg} \theta_{cm} = \frac{\operatorname{sen} \theta}{\cos \theta + x}. \quad (2.5)$$

2.2.2 Freamento

O conceito de perda de energia por unidade de comprimento já foi introduzido no capítulo 1. A profundidade x do alvo em que se encontra uma partícula que incidiu com uma energia E_0 é dada como uma função da energia da partícula E por

$$x = \int_E^{E_0} (dE/dx)^{-1} dE. \quad (2.6)$$

Valores de perda de energia específica dE/dx podem ser obtidos da subrotina RSTOP do programa TRIM Monte Carlo (Biersack e Hagemark, 1980; Ziegler et al., 1985).

É freqüentemente conveniente substituir a função $dE/dx(E)$ por uma aproximação $\frac{dE}{dx}(\bar{E})$, onde \bar{E} é algum valor de energia situado entre a energia de uma partícula imediatamente antes de ser espalhada e E_0 , a energia do feixe incidente.

Com essa aproximação, a integral em eq. 2.6 pode ser imediatamente resolvida, e obtemos:

$$x = (E_0 - E) \left(\frac{dE}{dx} \right)_{\bar{E}}^{-1} \quad (2.7)$$

Existem algumas aproximações usuais, a saber:

a) *aproximação de energia de superfície*: \bar{E} é usada como o valor da energia das partículas incidentes.

b) *aproximação de energia média*: \bar{E} é usada como a média aritmética entre a energia das partículas incidentes e a energia imediatamente antes da partícula sofrer um espalhamento, E :

$$\bar{E} = \overline{E} \equiv (E + E_0)/2 = E_0 - \frac{1}{2} \Delta E, \quad (2.8)$$

onde $\Delta E = E_0 - E$.

2.3 Análise de Dados

2.3.1 Escala de Profundidade para Uma Amostra Elementar

Considere a fig. 2.3. A projeção do deslocamento da partícula na sua trajetória de entrada será dado por:

$$x / \cos \theta_1 = \int_E^{E_0} dE (dE/dx)^{-1} \quad (2.9)$$

e, para a trajetória de saída:

$$x / \cos \theta_2 = \int_{E_1}^{KE} dE (dE/dx)^{-1}. \quad (2.10)$$

Ou, tomando-se a perda de energia dE/dx como constante, temos, para o caminho de entrada:

$$E = E_0 - \frac{x}{\cos \theta_1} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{\text{entrada}}, \quad (2.11)$$

onde dE/dx deve ser avaliada em algum valor de energia que o íon assume ao longo do percurso de entrada. E, para o caminho de saída, temos:

$$E_1 = KE - \frac{x}{\cos \theta_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{\text{saída}}, \quad (2.12)$$

onde dE/dx deve ser avaliada em algum valor de energia que o íon assume ao longo do percurso de saída. Nós podemos eliminar E , a energia que a partícula tem imediatamente antes do espalhamento, entre a eq. 2.11 e a eq. 2.12:

$$\Delta E = [S]x = N[\epsilon]x, \quad (2.13)$$

onde $\Delta E \equiv KE_0 - E_1$,

$$[S] \equiv \frac{K}{\cos \theta_1} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{\text{entrada}} + \frac{1}{\cos \theta_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{\text{saída}} \quad (2.14)$$

é chamado o fator de perda de energia ou fator S e

$$[\epsilon] \equiv \frac{K}{\cos \theta_1} \epsilon_{\text{entrada}} + \frac{1}{\cos \theta_2} \epsilon_{\text{saída}} \quad (2.15)$$

é chamado o fator de seção transversal de freamento ou fator ϵ .

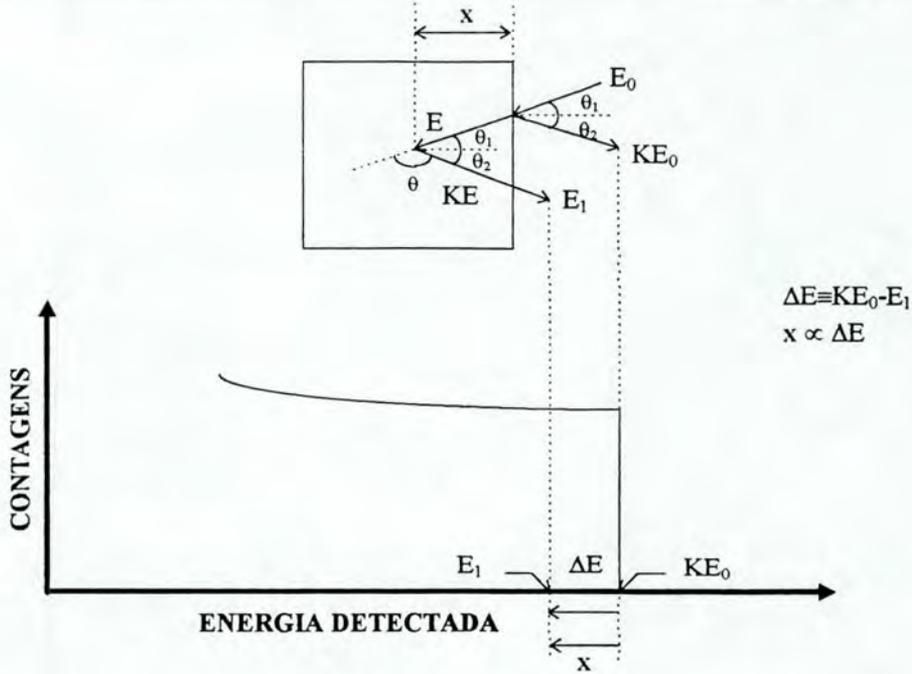


Fig. 2.3: Diagrama esquemático mostrando o espalhamento à superfície da amostra e a uma profundidade x de partículas de um feixe incidente em uma direção oblíqua com relação à normal

Aproximações para $[S]$ e $[\epsilon]$.

a. *Aproximação de Energia de Superfície.* Para regiões próximas à superfície, a variação relativa da energia ao longo da trajetória de entrada é pequena e, portanto, $(dE/dx)_{entrada}$ é avaliada a E_0 e $(dE/dx)_{saída}$, a KE_0 :

$$[S_0] = \frac{K}{\cos \theta_1} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{E_0} + \frac{1}{\cos \theta_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{KE_0} \quad (2.16)$$

ou

$$[\epsilon_0] = \frac{K}{\cos \theta_1} \epsilon(E_0) + \frac{1}{\cos \theta_2} \epsilon(KE_0) \quad (2.17)$$

b. *Aproximação de Energia Média.* Quando o comprimento percorrido torna-se apreciável, a Aproximação de Energia de Superfície não serve mais. Uma aproximação melhor pode ser obtida selecionando um valor constante de dE/dx ou ϵ a uma energia \bar{E} intermediária àquelas que a partícula tem nos pontos finais e iniciais de cada trajetória:

$$[\bar{S}] = \frac{K}{\cos \theta_1} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{\bar{E}_{entrada}} + \frac{1}{\cos \theta_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{\bar{E}_{saída}} \quad (2.18)$$

ou

$$[\bar{\epsilon}] = \frac{K}{\cos \theta_1} \epsilon(\bar{E}_{entrada}) + \frac{1}{\cos \theta_2} \epsilon(\bar{E}_{saída}), \quad (2.19)$$

onde $\bar{E}_{entrada} = (E + E_0)/2$ e $\bar{E}_{saída} = (E_1 + KE)/2$.

O valor de E nas equações precedentes é desconhecido, mas pode ser estimado por vários caminhos. Para rápidas estimativas, podemos supor que $\Delta E = KE_0 - E_1$ é conhecida e que esta perda é subdividida simetricamente entre a trajetória de entrada e saída, de forma que $E \simeq E_0 - \Delta E/2$. Quando esses valores são usados, o método é chamado *Aproximação de Energia Média Simétrica*.

A tabela 2.1 faz uma comparação entre as espessuras calculadas de cinco filmes de Pt depositados sobre substratos de Si (Chu et al., 1978: p. 144-145). Os dados foram obtidos de espectros de RBS com um feixe de análise de 2,0 MeV de partículas α 's. Os cálculos foram feitos utilizando-se as duas aproximações.

t(Å)		$\frac{AES-AEM}{AEM}(\%)$
Aprox. de Energia de Sup. (AES)	Aprox. de Energia Média (AEM)	
530	530	0
1170	1150	1,7
2140	2100	1,9
3330	3200	4,1
4540	4320	5,1

Tab. 2.1: Comparação entre Espessuras Determinadas pela Aproximação de Energia de Superfície e pela Aproximação de Energia Média a partir de Espectros de RBS de 2,0 MeV de partículas α 's Espalhadas de filmes de Pt (Chu et al., 1978: p. 144-146).

Concluimos, pois, que as duas aproximações de energia constante (AES e AEM) diferem por menos de 2 % para cada 1000 Å de espessura.

Capítulo 3

CANALIZAÇÃO

3.1 Introdução

Uma grande variedade de fenômenos físicos pode ocorrer, quando um feixe de partículas energéticas incide sobre um alvo sólido, e.g., espalhamento Rutherford, processos de perda de energia, emissão de elétrons secundários, reações nucleares, produção de raios X, etc. Todos esses processos têm probabilidades de ocorrência que dependem do parâmetro de impacto p envolvido em uma colisão com um átomo-alvo individual. Se o alvo material é homogêneo e isotrópico, a distribuição de parâmetros de impacto ($\sim 2\pi p$) é independente da orientação relativa entre a direção do feixe e o alvo. Portanto, contanto que efeitos superficiais possam ser ignorados, esses processos de interação entre feixe e alvo são também independentes de orientação.

Quando o alvo é monocristalino, a situação torna-se bastante diferente. A distribuição de parâmetros de impacto e os processos físicos de interação são fortemente dependentes da orientação relativa entre o feixe e o alvo. Esse efeito é o que se chama de canalização. Pode-se entender qualitativamente o efeito da canalização de íons da seguinte forma. Suponhamos que a direção de incidência de uma partícula carregada sobre a superfície de um cristal encontra-se próxima à direção de um dos eixos principais desse. Então, com probabilidade alta, a partícula sofrerá um espalhamento de pequeno ângulo, quando ela passa através do primeiro plano de átomos do cristal. Por causa da estrutura ordenada do alvo, ela experimentará uma série de colisões suaves de pequeno ângulo de espalhamento. Isso faz com que o íon seja guiado, seguindo (para íons positivos) uma trajetória oscilante através do canal, como é mostrado na figura 3.1. Sob essa condição, processos que ocorrem a baixos parâmetros de impacto, tal como retroespalhamento, sofrem uma redução drástica no número de eventos.

Neste capítulo, abordaremos alguns aspectos experimentais relacionados ao fenômeno de canalização (seção 3.2). Na seção 3.3, desenvolveremos, a partir de primeiros princípios, o modelo do potencial transversal contínuo para canalização axial. Os seus limites de validade, bem como a

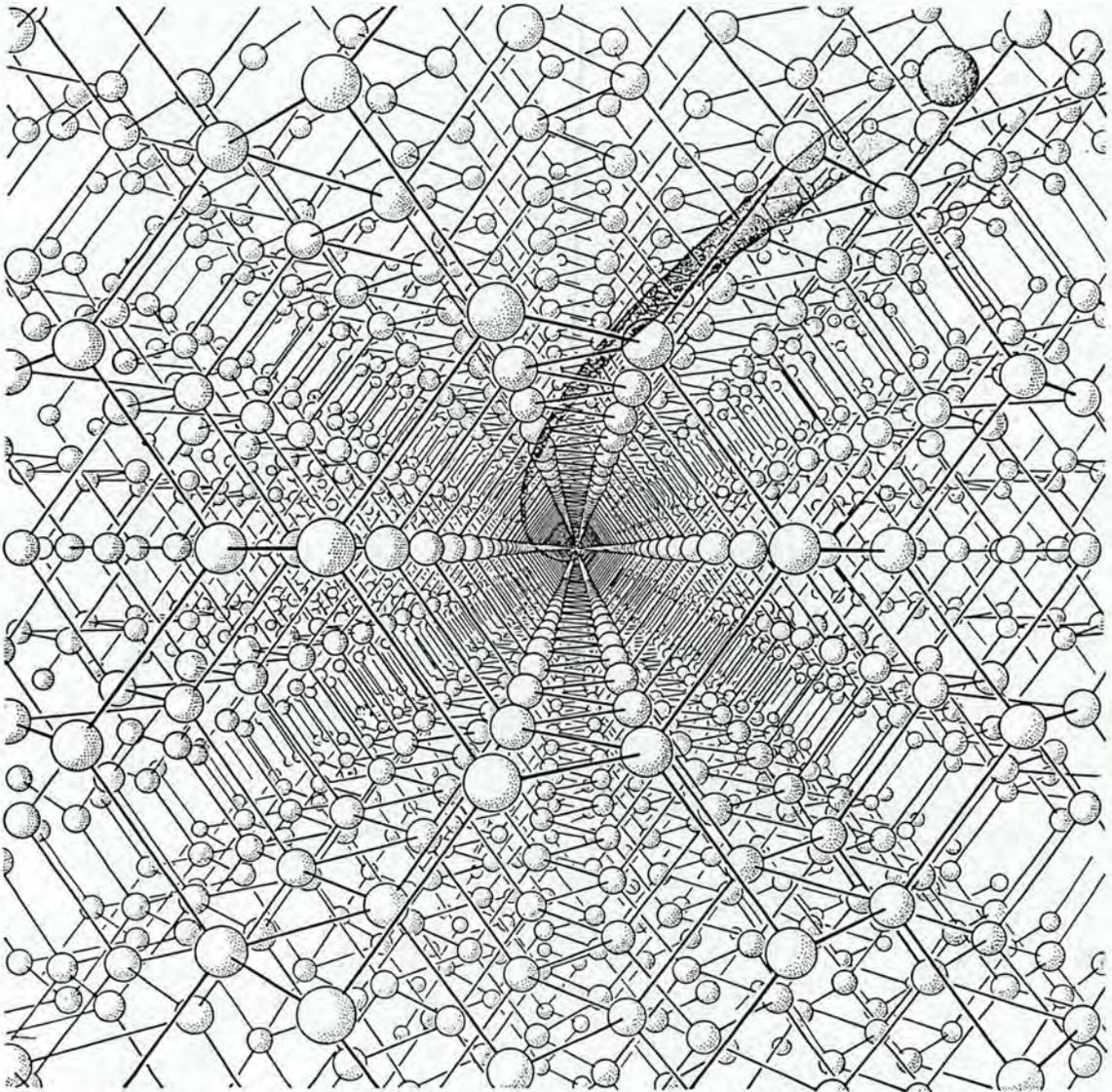


Fig. 3.1: Trajetórias de íons canalizados (Brandt, 1968).

aplicação do mesmo ao cálculo da perda de energia eletrônica de íons canalizados serão também discutidos. Nós nos basearemos na vasta literatura existente sobre o fenômeno de canalização (Lindhard, 1965; Morgan, 1973; Gemmell; 1974, Chu et al., 1978: cap. 8). Nos restringiremos ao estudo da canalização de partículas energéticas positivamente carregadas com massa igual ou superior à do próton. Restringindo-nos a partículas pesadas, efeitos quânticos podem ser desconsiderados. Isso significa que elétrons, pósitrons, múons, píons e mésons não serão considerados aqui.

3.2 Aspectos Experimentais

Nesta seção, descreveremos o procedimento de alinhamento do feixe iônico com um dos eixos de um cristal, bem como introduziremos conceitos experimentais pertinentes à técnica de canalização.

3.2.1 O Efeito da Canalização e Procedimento de Alinhamento de Um Cristal

Na fig. 3.2 é representada a idéia conceitual do efeito da canalização de íons energéticos. Uma estrutura cristalina do tipo da do diamante é vista a partir de três direções diferentes:

- (a) A partir de uma direção arbitrária. Os átomos da rede são vistos como um conjunto quase aleatório de pontos.
- (b) O cristal é visto ao longo de uma direção planar.
- (c) O observador alinha-se com um dos eixos do cristal.

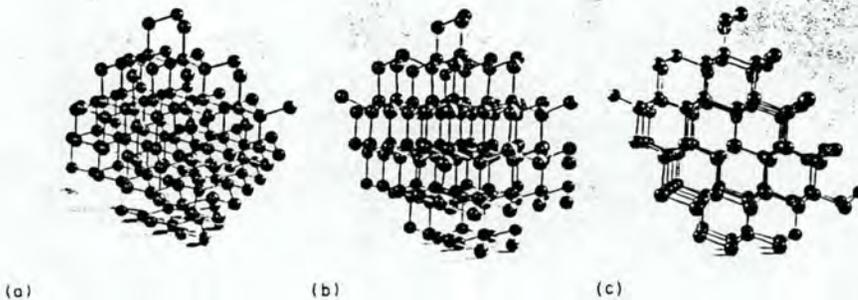


Fig. 3.2: Modelo de rede cristalina mostrando a configuração atômica na rede do tipo da do diamante, vista a partir de três direções: (a) aleatória, (b) planar e (c) axial (Chu et al., 1978: p.224).

Baseados nessa figura, podemos, só por considerações geométricas, imaginar que a variação da orientação relativa entre o cristal e o feixe incidente pode causar mudanças drásticas no número de partículas retroespalhadas.

O procedimento de alinhamento do feixe de íons com um dos eixos do cristal é o primeiro passo em experimentos visando a qualquer uma das aplicações usuais da canalização.

A própria técnica fornece um método de alinhar o cristal. Na fig. 3.3, são mostrados experimentos conceituais de canalização realizados com três tipos diferentes de amostra (Chu et al., 1978: p. 225-226). Em (a), um sólido formado de átomos aleatoriamente distribuídos (amorfo). Em (b), um sólido formado empilhando-se planos atômicos de forma paralela, mas em cada um desses planos,

os átomos estão arranjados de forma aleatória (cristal planar). Em (c), uma amostra composta de duas famílias de planos formando um ângulo reto entre si, ou seja, um cristal cúbico, com filas de átomos ao longo das linhas de intersecção dos planos e átomos nos pontos de intersecção das linhas.

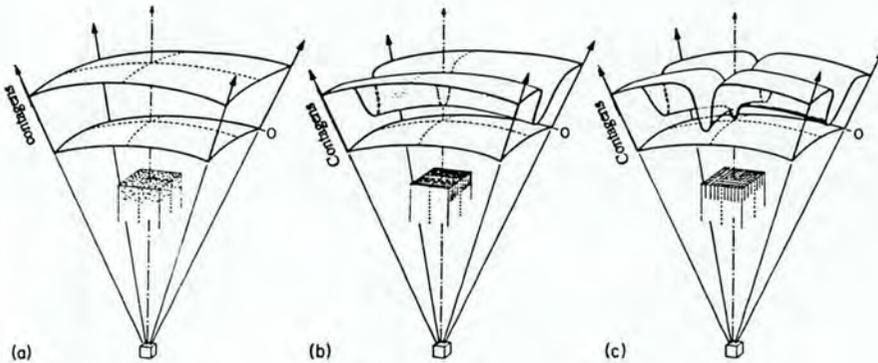


Fig. 3.3: RBS esquemático de (a) um amorfo, (b) de um cristal planar e (c) de um cristal cúbico em função da orientação da amostra com relação ao feixe (Chu et al., 1978, p. 226)

Para a amostra amorfa, não obtemos alteração no número de partículas retroespalhadas, quando variamos a orientação relativa entre o feixe incidente e a amostra.

Para o cristal "planar", a contagem decresce drasticamente, quando a direção do feixe é paralela à dos planos, obtendo-se uma queda no número de partículas retroespalhadas ao longo daquela direção.

No caso da amostra cristalina, obtemos duas depressões nas contagens das partículas retroespalhadas ao longo das direções paralelas aos planos atômicos que formam o cristal. Incidindo o feixe sobre o ponto de intersecção das duas linhas de mínimos, alinhamos o feixe com o eixo do cristal, obtendo um decréscimo adicional no número de partículas retroespalhadas.

Na fig. 3.4, é mostrada uma amostra que, como no caso da fig 3.3(a), também é constituída de duas famílias de planos perpendiculares entre si (Chu et al., 1978: p. 226-227). O eixo do cristal está inclinado de um ângulo θ (fixo) em relação à direção de incidência do feixe iônico. Esse ângulo é chamado de inclinação. Quando o cristal é rotado continuamente ao longo de 360° em torno do seu eixo, obtemos quatro mínimos correspondentes às direções dos dois planos. As duas linhas que passam por mínimos diametralmente opostos interseccionam-se em um ponto que corresponde à direção do eixo do cristal.

Como um exemplo real (Chu et al., 1978: p. 227-228), consideremos o alinhamento de uma

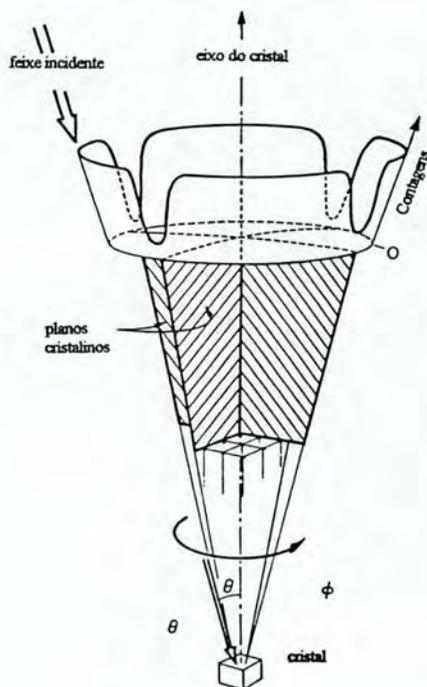


Fig. 3.4: RBS esquemático em função do ângulo de rotação para um cristal cujo eixo está inclinado de um ângulo θ em relação ao feixe incidente (Chu et al., 1978: p. 227).

amostra de Si monocristalina cortada de tal forma que a direção $\langle 100 \rangle$ é perpendicular à superfície da amostra.

Um esquema do experimento é mostrado na parte (a) da fig. 3.5. A amostra é montada sobre um goniômetro, cujo eixo de rotação é inclinado de um certo ângulo θ em relação ao feixe.

Fixa-se arbitrariamente $\theta = 6^\circ$, varia-se ϕ ao longo de 360° e registra-se a dependência do número de partículas retroespalhadas com o ângulo de rotação ϕ . Na fig. 3.5(b), é mostrada uma parte desse gráfico, onde se pode ver três mínimos pronunciados próximos a 40° , 90° e 120° . Ao todo são oito mínimos. As coordenadas desses mínimos são registradas em um diagrama polar (fig. 3.5). No diagrama polar, cada círculo corresponde a uma rotação de 360° com um ângulo de inclinação θ dado.

A seguir, fixa-se um outro ângulo de inclinação ($\theta = 5^\circ$), varia-se ϕ ao longo de 360° e registra-se novamente a dependência do número de partículas retroespalhadas com o ângulo de rotação. Obtém-se oito novos mínimos. Novamente, registramos as coordenadas desses mínimos no diagrama polar. Traçamos, agora, linhas unindo quaisquer quatro pontos alinhados. As linhas obtidas correspondem às direções dos quatro planos atômicos em torno do eixo $\langle 110 \rangle$, a saber: $\{100\}$,

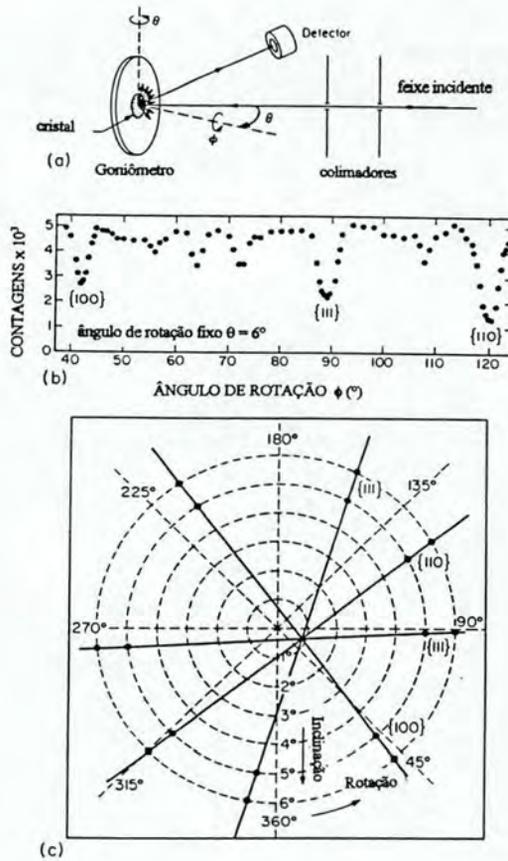


Fig. 3.5: Uso da técnica de canalização para alinhar um monocristal de silício em relação à direção de incidência do feixe de 2 MeV de partículas α : (a) desenho esquemático da geometria de espalhamento; o eixo de inclinação é perpendicular ao feixe incidente e o detector está no plano definido por essas duas linhas que se interseccionam; (b) contagem de partícula retroespalhadas da superfície do cristal em função do ângulo de rotação e (c) posições dos mínimos planares em coordenadas polares para os ângulos de inclinação de 5 e 6° (Chu et al., 1978: p. 228.)

$\{110\}$ e dois planos da família $\{111\}$ (fig. 3.6).

Cada uma das quatro linhas retas que foram traçadas no diagrama polar representa um dos planos que interseccionam o eixo $\langle 110 \rangle$. Logo, para alinhar o feixe de íons com o eixo do cristal ($\langle 110 \rangle$), posiciona-se, então, o eixo do goniômetro nas coordenadas do ponto de intersecção das linhas ($\theta = 0,9^\circ$; $\phi = 60^\circ$).

O número e orientação dos planos em torno de um eixo depende do eixo considerado (fig. 3.7). Os mínimos planares e axiais em ordem decrescente de magnitude para as orientações principais

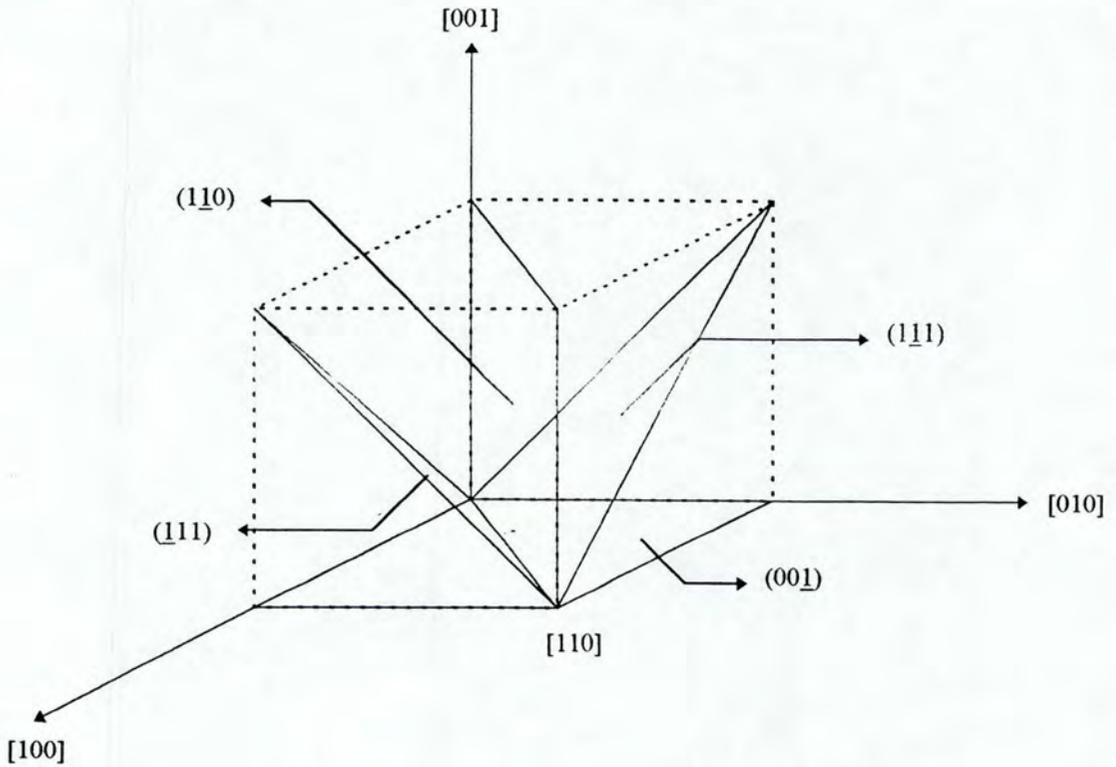


Fig. 3.6: Planos que interseccionam o eixo $\langle 110 \rangle$.

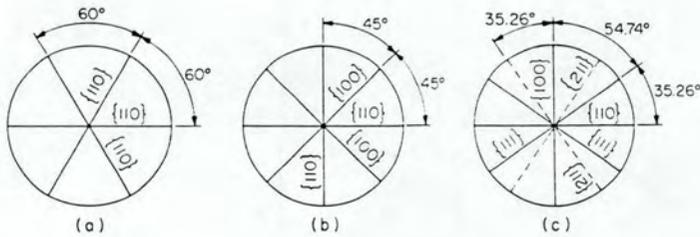


Fig. 3.7: Orientação dos planos principais em torno dos três eixos principais de um cristal cúbico: (a) $\langle 111 \rangle$, (b) $\langle 100 \rangle$ e (c) $\langle 110 \rangle$.

em estruturas cúbicas são mostrados nas Tabs. 3.1 e 3.2.

3.2.2 Semi-ângulo axial $\psi_{1/2}$ e Razão Mínima de Contagens χ_{min}

Na fig. 3.8 são mostrados espectros de RBS para um feixe iônico incidente ao longo de um eixo principal de um cristal (espectro alinhado) e ao longo de uma direção de não-canalização (espectro

diamante	fcc	bcc
110	111	110
111	100	100
100	110	112

Tab. 3.1: Índices de Miller planares para estruturas cúbicas, listados em ordem decrescente da profundidade do perfil angular da probabilidade de retroespalhamento.

diamante	fcc	bcc
110	110	111
111	100	100
100	111	110

Tab. 3.2: Índices de Miller axiais para estruturas cúbicas, listados em ordem decrescente da profundidade do perfil angular da probabilidade de retroespalhamento.

aleatório).

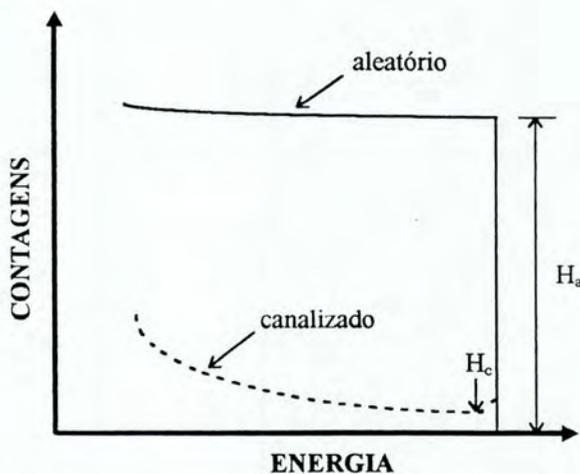


Fig. 3.8: Espectros de RBS para um feixe iônico incidente ao longo de um eixo de um cristal e ao longo de uma direção aleatória.

A razão H_c/H_a das alturas dos dois espectros tomados na região próxima à superfície para a orientação alinhada e aleatória é referida como a razão mínima de contagens χ_{min} . A variação de

H_c com o ângulo de inclinação do feixe em relação ao eixo é mostrada na fig. 3.9.

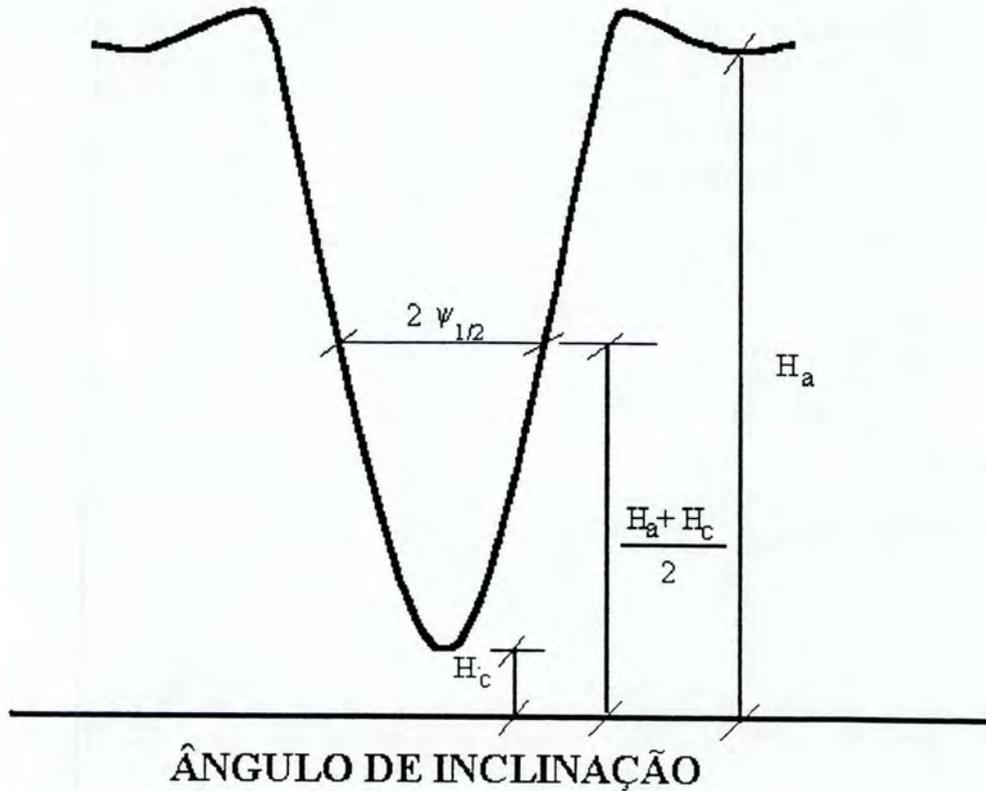


Fig. 3.9: Número de partículas retroespalhadas em função do ângulo de inclinação.

As alturas do espectro são medidas numa região de energia estreita logo abaixo do limiar de alta energia do sinal de RBS da amostra. Na região próxima à superfície de um cristal de Si, os valores de χ_{min} vão de 2 a 4×10^{-2} , para íons de He ao longo dos eixos principais. Abaixo da superfície, χ_{min} aumenta com o aumento da profundidade do retroespalhamento, uma vez que, à medida que o feixe vai penetrando no cristal, partículas canalizadas vão progressivamente sendo desviadas, indo a fazer parte da componente aleatória (decanalizada) do feixe.

Além da razão mínima de contagens, outro parâmetro que pode ser medido é o semi-ângulo $\psi_{1/2}$ para canalização axial. Para obter o valor de $\psi_{1/2}$, pode-se medir as contagens de partículas

retroespalhadas em um intervalo estreito de energia como função do ângulo de inclinação em relação a uma direção axial, mas tomando o cuidado de evitar inclinações ao longo de um plano. Quando o cristal é inclinado até a direção de alinhamento, a contagem cresce até um valor máximo e, então, decresce até o seu valor mínimo. O máximo valor, nos ombros do perfil angular de contagens, ocorre quando o feixe é orientado a um ângulo ligeiramente maior do que aquele necessário para a partícula incidente ficar canalizada. Sob essa configuração geométrica, as partículas incidentes podem sofrer um número maior de interações que resultam em grandes ângulos de espalhamento do que sob condições de incidência aleatória. O semi-ângulo $\psi_{1/2}$ é a meia largura angular do perfil de contagens à meia profundidade do poço, como é indicado na fig. 3.9.

Para íons ^4He com energias na ordem de MeV, $\psi_{1/2}$ é da ordem de 1° , dependendo do valor da energia, do canal e fracamente da temperatura. Como no caso do χ_{min} , $\psi_{1/2}$ depende da profundidade e é normalmente determinado para energias correspondentes a regiões próximas à superfície.

3.3 Teoria Clássica de Canalização

3.3.1 Introdução

Nesta seção, desenvolveremos o modelo do potencial transversal contínuo para eixos a partir de primeiros princípios. Descreveremos as suas limitações em termos de ângulos e forneceremos uma aplicação do mesmo.

O modelo do potencial transversal contínuo reflete como o movimento guiado de um íon ao longo de um canal ou de um plano de um cristal está relacionado com as interações básicas entre o íon e a estrutura cristalina. O primeiro tratamento abrangente desse modelo foi dado por Lindhard em 1965. A simplificação essencial desse modelo é fazer a média do potencial de interação íon-átomo ao longo de um eixo ou plano, de forma que o movimento é reduzido de três para duas ou uma dimensão, respectivamente. A grande vantagem do modelo, entretanto, é que ele nos possibilita descrever propriedades médias de uma dada trajetória ou, alternativamente, descrever propriedades médias de um feixe de íons.

3.3.2 O Modelo do Potencial Transversal Contínuo de uma Corda de Átomos

Uma partícula pode ser considerada canalizada, se ela incide sobre uma cadeia de átomos com um ângulo ψ suficientemente pequeno. Dessa forma, ela é refletida por uma seqüência (que pode

ser considerada infinita) de colisões suaves com os átomos regularmente distribuídos ao longo da cadeia. Cada encontro resulta num espalhamento com um pequeno ângulo de desvio. Quando o ângulo de incidência aumenta, a partícula começa a chegar tão próximo dos átomos que compõe a cadeia que, ao ultrapassar um certo ângulo crítico ψ_{crit} , ela não pode permanecer canalizada. Em vez disso, a partícula começa a interagir com cada átomo em individual e é espalhada para fora do canal por um única colisão ou, no máximo, um par de colisões.

Logo, a idéia de que uma partícula canalizada tem a sua trajetória traçada por espalhamentos sucessivos de pequenos ângulos e que ela não "sente" os átomos individualmente é central em qualquer modelo clássico de canalização. Sob essas condições, dentro de uma ótima aproximação, o movimento de partículas canalizadas é determinado por um potencial contínuo, obtido através da substituição do potencial periódico real da cadeia ou plano de átomos por um potencial mediado sobre a direção paralela à cadeia ou plano.

Ao longo da seção, faremos quatro hipótese básicas:

Primeiro, o movimento da partícula canalizada é bem descrito por órbitas clássicas.

Segundo, a rede cristalina e a cadeia de átomos são tratadas como sendo perfeitas. Isso implica que efeitos tais como vibrações térmicas são excluídos.

Terceiro, as colisões sofridas pela partícula resultam em pequenos ângulos de espalhamento $\Delta\psi$.

Quarto, o ângulo instantâneo ψ formado pela velocidade do íon e o eixo do canal (fig. 3.1) é muito pequeno (se não fosse assim, a partícula não permaneceria canalizada). Esse fato leva à ocorrência de colisões fortemente correlacionadas entre o íon energético incidente e os átomos que compõe as cadeias, pois o íon, ao se aproximar de um átomo da cadeia, aproxima-se também do vizinho desse e assim por diante. Esse efeito conduz-nos ao conceito de uma corda de átomos.

Quando, no decorrer do texto, usamos o termo cadeia, queremos enfatizar a natureza discreta da distribuição de átomos ao longo de um canal. Por outro lado, ao usarmos o termo corda de átomos, ou simplesmente corda, supomos ser válida a aproximação de substituir essa distribuição discreta de átomos por uma contínua.

Em princípio, o íon interage com todos os átomos que compõe a cadeia. A energia potencial total de interação é $\sum_i u_1(\sqrt{(z - z_i)^2 + \rho^2})$, onde $(\vec{\rho}, z)$ e $(\vec{0}, z_i)$ são as coordenadas do íon e do i -ésimo átomo da cadeia, respectivamente.

Para partículas canalizadas, colisões correlacionadas com muitos átomos ao mesmo tempo preponderam sobre interações com átomos individuais. Nessa condição, substituímos o potencial

real da cadeia de átomos por um potencial transversal contínuo médio $U_1(\rho)$:

$$\begin{aligned} U_1(\rho) &= \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \sum_{i=1}^M u_1(\sqrt{(z - z_i)^2 + \rho^2}) dz \\ &= \frac{1}{Md} \sum_{i=1}^M \int_{-L/2 - z_i}^{L/2 - z_i} u_1(\sqrt{z'^2 + \rho^2}) dz', \end{aligned} \quad (3.1)$$

sendo M o número de átomos em uma distância L da cadeia e d , a distância de separação entre os mesmos.

Uma vez que o potencial u_1 tipicamente cai a zero muito rapidamente, podemos considerar $L \rightarrow \infty$. Por isso

$$\begin{aligned} U_1(\rho) &\simeq \frac{1}{Md} \sum_{i=1}^M \int_{-\infty}^{\infty} u_1(\sqrt{z'^2 + \rho^2}) dz' \\ &= \frac{1}{d} \int_{-\infty}^{\infty} u_1(\sqrt{z'^2 + \rho^2}) dz'. \end{aligned} \quad (3.2)$$

A aproximação acima é conhecida como **modelo do potencial transversal contínuo de uma corda de átomos**, ou, simplesmente, **aproximação contínua** ou **modelo do contínuo**.

Substituindo u_1 por uma expressão de energia potencial blindada da forma

$$u_1(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi(r/a), \quad (3.3)$$

obtemos

$$U_1(\rho) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{d} \xi(\rho/a), \quad (3.4)$$

onde

$$\xi(x) \equiv \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{du}{\sqrt{u^2 + x^2}} \phi(\sqrt{u^2 + x^2}). \quad (3.5)$$

Um potencial bastante empregado em cálculos relacionados à canalização é o potencial de Moliere (apêndice A):

$$\phi = \sum_{i=1}^3 a_i \exp(-b_i r/a). \quad (3.6)$$

Substituindo-o na eq. 3.5, chegamos a

$$\xi(\rho/a) = \sum_{i=1}^3 a_i K_0(b_i \rho/a), \quad (3.7)$$

onde K_0 é a função de Bessel modificada de ordem zero.

A energia potencial de interação $U(\vec{\rho})$ de um íon com todas as cadeias de átomos que constituem o canal é dada por

$$U(\vec{\rho}) = \sum_i U_1(\rho_i) - U_0, \quad (3.8)$$

onde $\vec{\rho}$ é a coordenada vetorial da partícula no plano transversal, ρ_i , a distância instantânea do íon à i -ésima corda e U_0 , uma constante escolhida de tal forma que o mínimo de U seja igual a zero. Na fig. 3.10, é mostrada a energia potencial de um íon He^{2+} no campo elétrico gerado pelo conjunto das quatro linhas de átomos simetricamente dispostas através do plano transversal ao canal $\langle 100 \rangle$ do Si. Para calcular o potencial de cada corda de átomos, foi utilizado o modelo de Moliere.

O hamiltoniano de um íon de massa M_1 , movendo-se no espaço submetido ao potencial gerado por uma corda de átomos, é dado por

$$H = U(x, y) + \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2M_1}. \quad (3.9)$$

O hamiltoniano acima é cíclico na coordenada z . Por conseguinte, o momento ao longo dessa direção é uma constante do movimento. Portanto, podemos restringir nosso estudo ao plano transversal à direção do canal (chamado doravante somente plano transversal), cujo hamiltoniano é o seguinte:

$$H_{\perp} = U(x, y) + \frac{p_x^2 + p_y^2}{2M_1}. \quad (3.10)$$

Uma vez que a energia potencial U não depende explicitamente da velocidade nem do tempo, segue que a energia associada ao movimento transversal E_{\perp} (chamada freqüentemente de energia transversal) é uma constante do movimento. Em outras palavras, o movimento no plano transversal é conservativo. Das observações acima, inferimos a existência de uma região de área $A(E_{\perp})$ do plano transversal permitida para o movimento das partículas. Essa região é aquela onde $U(\vec{\rho}) \leq E_{\perp}$.

Depois que o feixe atravessou uma profundidade suficientemente grande do alvo, de tal modo que o equilíbrio estatístico (v. subseção 3.3.4) foi atingido, a distribuição de partículas no plano transversal é dada por

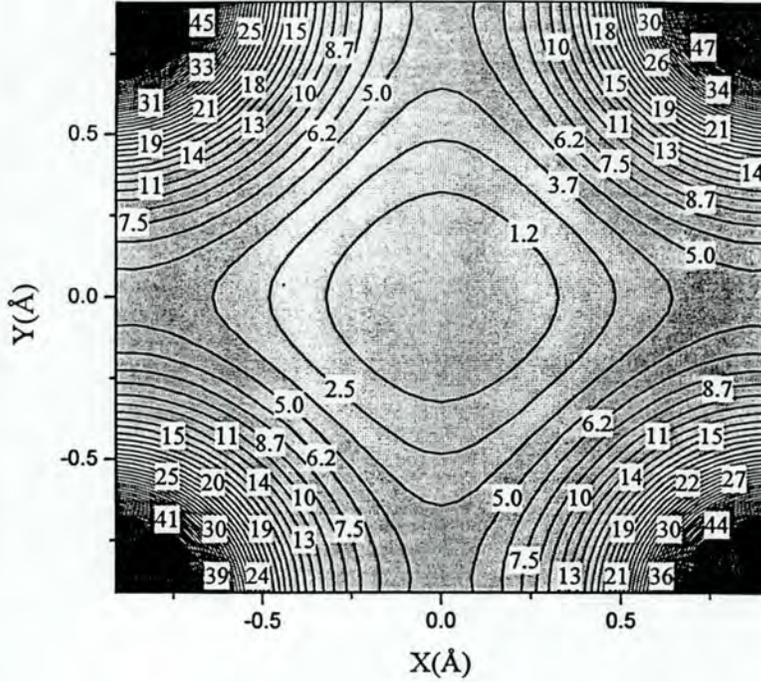


Fig. 3.10: Linhas equipotenciais através do canal $\langle 100 \rangle$ do Si, para íons de He^{2+} incidentes paralelamente ao eixo do canal. Para calcular o potencial de cada corda de átomos foi utilizado o modelo de Moliere. Os vértices do quadrado correspondem às intersecções das cadeias de átomos com o plano transversal ao eixo.

$$P_0(E_{\perp}, \vec{\rho}) = \begin{cases} 1/A(E_{\perp}), & \text{se } U(\vec{\rho}) \leq E_{\perp} \\ 0, & \text{se } U(\vec{\rho}) > E_{\perp}. \end{cases} \quad (3.11)$$

Após penetrar uma profundidade suficientemente grande para atingir o equilíbrio estatístico, as partículas que entraram sobre uma linha equipotencial de um dado valor podem ser encontradas em qualquer lugar dentro da porção do canal limitada por essa linha. Esse mesmo argumento para outros contornos leva a um fluxo de partículas substancialmente maior na região central do canal do que nos cantos interceptados pelas linhas de átomos. Esse efeito é chamado concentração de fluxo ("flux peaking").

3.3.3 Condição para a Validade da Aproximação Contínua e Ângulos Críticos

O modelo do contínuo somente é válido para íons relativamente longe das cadeias atômicas e a baixos ângulos em relação às mesmas. A aproximação falha, quando um íon tem suficiente energia para penetrar no caroço da cadeia, onde ele pode sofrer espalhamentos a grandes ângulos devido a interações com átomos, individualmente. A condição limitante da validade da aproximação contínua pode ser expressa em duas formas equivalentes: pela distância mínima de aproximação crítica ρ_{crit} ou, alternativamente, como o ângulo crítico ψ_{crit} . Nesta subseção, encontraremos uma condição de validade do modelo do contínuo.

Analiseemos, agora, a colisão de um íon com um corda isolada de átomos. Queremos encontrar qual é o ângulo máximo ψ_{crit} com o qual o íon pode incidir sobre a corda sem deixar de estar canalizado. O valor desse ângulo ψ_{crit} está relacionado com a distância mínima de aproximação ρ_{min} com a corda de átomos.

Lindhard (1965) determinou uma estimativa ψ_1 para ψ_{crit} :

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{2r_0}{d}} = \sqrt{\frac{E_1}{E}}, \quad (3.12)$$

onde $E_1 \equiv \frac{2Z_1Z_2e^2}{d}$ e $r_0 \equiv \frac{Z_1Z_2e^2}{E}$ é o chamado raio de Lindhard. Essa estimativa é válida desde de que a energia E do projétil seja suficientemente alta e $\psi_1 < \frac{a}{d}$. O ângulo ψ_1 é chamado ângulo crítico de Lindhard. Da equação 3.12 segue imediatamente que $E_1 = E\psi_1^2$.

Na verdade, ao valor do ângulo crítico ψ_{crit} está relacionado um valor crítico da distância mínima de aproximação ρ_{crit} :

$$\psi_{crit} = \sqrt{\frac{U_1(\rho_{crit})}{E}} = \sqrt{\xi(\rho_{crit}/a)}\psi_1, \quad (3.13)$$

onde a última igualdade segue da substituição da expressão da energia potencial blindada $U_1(\rho_{crit})$ (equação 3.4) e do valor do ângulo crítico de Lindhard (equação 3.12). Vemos que $\psi_{crit} \approx \psi_1$.

Lindhard (1965), utilizando a aproximação de impulso, demonstrou que a condição de validade da aproximação contínua é dada por

$$E > \frac{1}{8}d^2U_1''(\rho_{crit}), \quad (3.14)$$

onde ' significa derivada com relação a ρ . Através de simulações computacionais, Morgan e Van Vliet (1971) determinaram que $U_1''(\rho_{crit}) \simeq \frac{5E}{d^2}$. Por outro lado, a solução numérica da equação 3.13, para o potencial de Moliere, fornece o seguinte resultado (Morgan, 1973: p.48)

$$\frac{\rho_{crit}}{a} \simeq \frac{2}{3} \sqrt{\alpha} \left(1 - \frac{\sqrt{\alpha}}{19} + \frac{\alpha}{700} \right), \quad (3.15)$$

onde $\alpha \equiv \frac{\psi_1^2 d^2}{2a^2}$.

O ângulo crítico ψ_{crit} é o ângulo máximo para o qual vale a aproximação contínua, ou seja, até onde o movimento do íon é guiado por sucessões de colisões suaves correlacionadas com a cadeia de átomos, idéia essa que é a essência do fenômeno de canalização. Por conseguinte, ψ_{crit} também dá o ângulo limite para o qual a canalização de partículas energéticas toma lugar.

Esse ângulo é difícil de medir. O que se mede ordinariamente em experiências de canalização é o semi-ângulo axial $\psi_{1/2}$. O mesmo está relacionado ao ângulo crítico ψ_1 de Lindhard através de uma proporcionalidade (Gemmell, 1974):

$$\psi_{1/2} = \alpha_R \psi_1, \quad (3.16)$$

com $\alpha_R \in [1, 2]$.

3.3.4 Tratamento Estatístico

Uma vez que conhecemos a distribuição de equilíbrio dos íons no plano transversal em função da energia do movimento projetado sobre esse plano, podemos determinar a média de qualquer propriedade da trajetória da partícula, tal como a perda de energia específica (elástica e inelástica).

O estudo, obviamente, pode ser confinado a uma única célula do plano transversal contendo uma corda (célula unitária).

A seguir, estudaremos o procedimento para calcular a média estatística sobre o movimento transversal de qualquer função dependente da trajetória do íon canalizado.

Médias Estatísticas sobre o Movimento Transversal

Para calcular a média de uma função $f(\vec{p}_\perp, \vec{\rho})$ sobre o movimento transversal, procedemos da forma que será descrita a seguir.

(i) Efetuamos a média espacial dentro de uma região limitada por uma linha equipotencial:

$$f(E_\perp) = \frac{1}{A(E_\perp)} \int_{U(\vec{\rho}) \leq E_\perp} d\vec{\rho} f(\vec{p}_\perp, \vec{\rho}). \quad (3.17)$$

(ii) Calculamos a média sobre a energia transversal E_\perp :

$$\langle f \rangle = \int g(E_{\perp}) f(E_{\perp}) dE_{\perp}, \quad (3.18)$$

onde $g(E_{\perp})dE_{\perp}$ é o número de partículas com energia transversal entre E_{\perp} e $E_{\perp} + dE_{\perp}$.

Capítulo 4

PROCEDIMENTO E RESULTADOS

A perda de energia de íons He e B canalizados em Si foi medida utilizando alvos do tipo SIMOX (Separation by **IM**planted **OX**ygen) (Izumi et al., 1978) através da técnica de Espectrometria de Retroespalhamento de Rutherford (RBS).

As amostras SIMOX empregadas no presente estudo consistiram de uma camada monocristalina de silício $< 100 >$ sobre uma camada de $\approx 5000 \text{ \AA}$ de SiO_2 , por sua vez, sobre uma camada $< 100 >$ de Si monocristalino. Um desenho esquemático de uma estrutura SIMOX é mostrado na fig. 4.1 e espectros de RBS típicos em direção alinhada e aleatória de uma amostra desse tipo com camada de Si cristalina superficial de 1800 \AA são mostrados na fig. 4.2. Nesses espectros, o intervalo de energia relacionado ao número dos canais exibidos corresponde a toda a espessura da amostra.

4.1 Procedimento Experimental

4.1.1 Preparação das Amostras

Para produzir as estruturas do tipo SIMOX, íons de oxigênio com energia tipicamente entre 150 e 200 keV ($R_p \approx 400 \text{ nm}$) são implantados em alvos monocristalinos de Si a altas doses ($1,4 \text{ a } 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}$). Recozimentos posteriores a altas temperaturas (1200 a 1400 °C) levam à formação de uma camada enterrada contínua de SiO_2 , de forma que a estrutura obtida exibe excelentes propriedades físicas [interface bem definida e densidade de discordâncias virtualmente nula] e elétricas.

As presentes amostras foram preparadas no centro de pesquisa T. J. Watson da IBM, em Nova Iorque, e análise de microscopia eletrônica de transmissão mostraram a boa qualidade da interface: menos de 50 \AA de rugosidade.

Algumas das amostras foram afinadas através de oxidação térmica e decapamento ("etching")

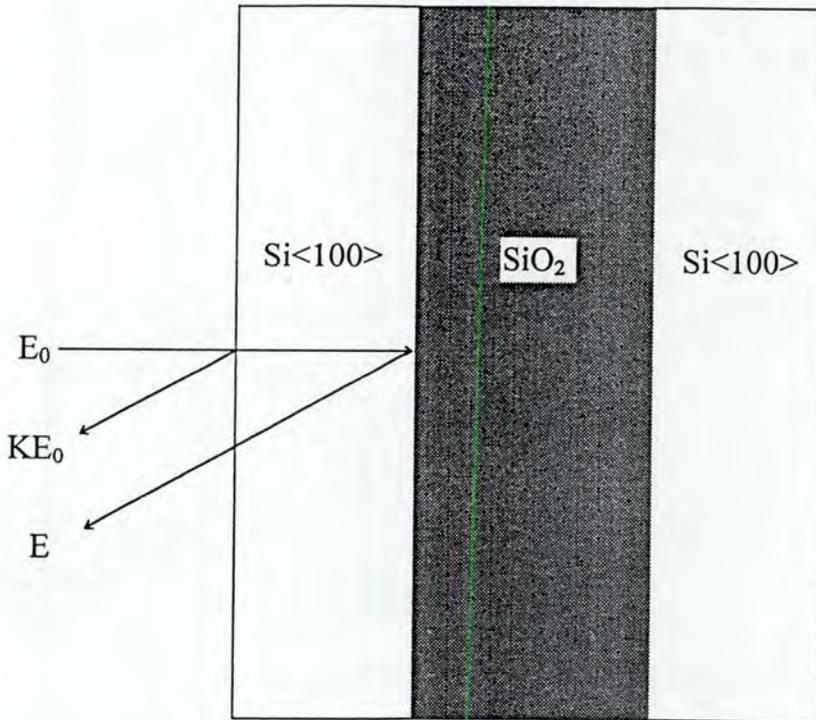


Fig. 4.1: Feixe de íons de energia E_0 incidindo sobre uma estrutura SIMOX. E é a energia com que uma partícula retroespalhada na interface Si/SiO₂ é detectada.

químico. Isso foi feito com os seguintes objetivos: (a) investigar o efeito da espessura da amostra sobre a perda de energia medida e (b) adequar a espessura da amostra à energia e ao tipo do íon cujo poder de freamento desejava-se medir. Com isso, dispomos de quatro conjuntos de amostras SIMOX com espessura da camada cristalina superficial de 300, 800, 1500 e 1800 Å.

Antes de cada experimento de RBS, a amostra a ser utilizada sofreu um processo de limpeza que consistiu dos seguintes passos:

- 1.º. A amostra é fervida durante 10 min em uma solução 20% água oxigenada (H₂O₂) e 80% ácido sulfúrico (H₂SO₄), a fim de remover compostos orgânicos depositados sobre a superfície.
- 2.º. Lavagem em água deionizada corrente durante 5 min.
- 3.º. A amostra foi deixada em solução 10% ácido fluorídrico (HF) e 90% álcool isopropílico durante 1 min, a fim de remover a camada de óxido de silício superficial.
- 4.º. Lavagem da amostra com álcool isopropílico.

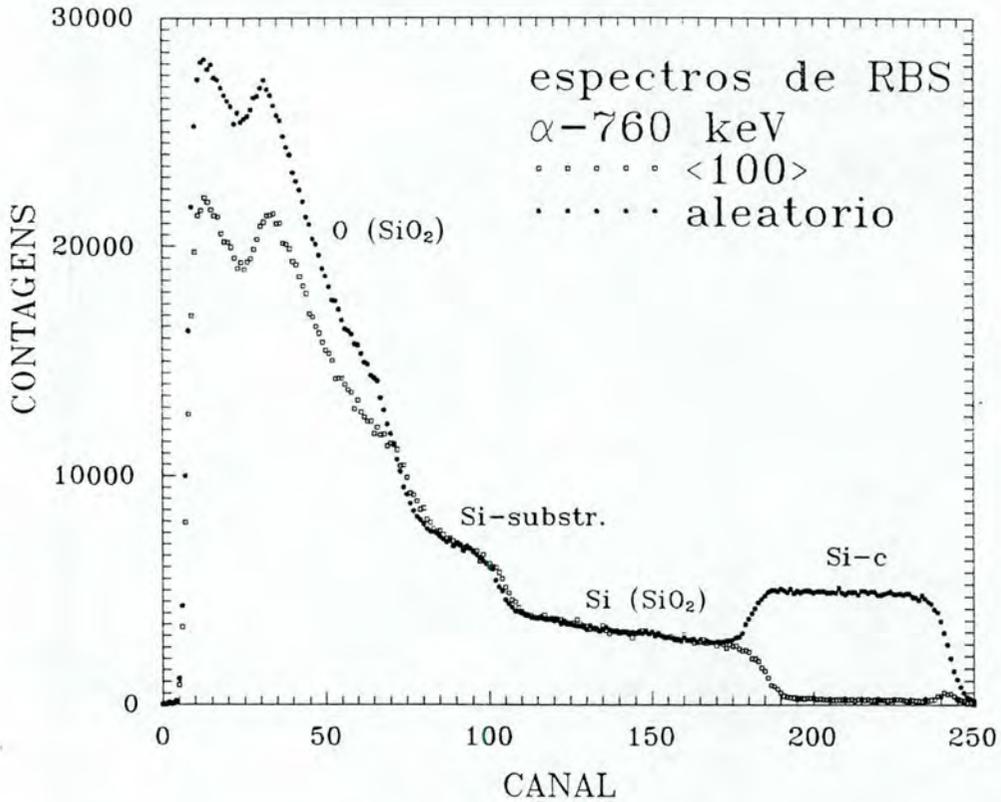


Fig. 4.2: Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons He^{2+} de 760 keV. O intervalo de energia relacionado ao número dos canais exibidos corresponde a toda a espessura da amostra. O rótulo Si-c identifica o sinal proveniente das partículas retroespalhadas na camada superficial de Si cristalino; Si(SiO_2), o sinal dos íons retroespalhados por átomos de Si da camada enterrada de SiO_2 ; O(SiO_2) tem o mesmo significado, mas para átomos espalhadores de O e Si-substr. corresponde ao sinal das partículas do feixe retroespalhadas por átomos de Si do substrato.

Usualmente, no 4.º passo, a lavagem é feita com água deionizada. A lavagem com álcool, contudo, retarda a o crescimento da camada de SiO_2 nativa (Stedile, 1993).

4.1.2 Detalhes Experimentais

Para energias de até 800 keV, o feixe de íons foi produzido pelo implantador de íons de 400 kV de Porto Alegre, enquanto que, para energias mais altas, foi utilizado o acelerador Tandem de 3MV do Instituto Max Planck de Física Nuclear de Heidelberg (Alemanha).

Em todos os casos, o feixe de íons foi colimado a uma divergência máxima de $0,03^\circ$.

As amostras foram montadas, em ambos os casos, sobre um goniômetro de três eixos com uma precisão de $0,005^\circ$.

As partículas retroespalhadas foram detectadas por um detector de silício de barreira de superfície. A resolução global do sistema de detecção (FWHM) tanto em Porto Alegre quanto em Heidelberg foi menor do que 13 keV para o hélio e menor do que 25 keV para o boro.

4.2 Medição da Perda de Energia Canalizada em Função da Energia do Projétil

As medições da perda de energia foram realizadas incidindo o feixe de íons sobre a amostra SIMOX segundo direções aleatórias e alinhada. Definimos como sistema de referência o ângulo azimutal (ou de rotação) ϕ e o de inclinação θ . O ângulo ϕ é medido em relação ao plano $\{100\}$ e o ângulo θ em relação ao eixo $\langle 100 \rangle$. Baseados em um estudo recente (Dygo et al., 1994b), escolhemos como sendo uma direção aleatória aquela definida por $\theta = 6^\circ$ e $\phi = 15^\circ$.

A diferença entre as energias das partículas retroespalhadas na interface Si/SiO₂ em uma incidência alinhada e em uma incidência aleatória fornece-nos - como veremos em seguida - a informação necessária para determinar o poder de freamento canalizado.

4.2.1 Análise de Dados

Espectros de RBS típicos tomados em direções aleatórias e alinhadas são mostrados nas figuras 4.3, 4.5, 4.6, 4.8 e 4.9. E_c e E_r são as energias detectadas das partículas retroespalhadas na interface Si/SiO₂ para uma incidência alinhada e aleatória, respectivamente.

Os espectros canalizados mostram várias características. Primeiro: a razão mínima de contagens χ_{min} (v.cap. 3) correspondente à região superficial vale tipicamente 3 %. Segundo: o valor de χ_{min} relacionado com a região próxima à interface Si/SiO₂ é 4 %. Terceiro: a região próxima à interface Si/SiO₂ não mostra indicações da existência de defeitos estendidos à níveis significantes. O limiar (edge) de trás do sinal do Si apresenta uma largura que é aproximadamente igual àquela do limiar da frente, levando-se em conta a dispersão em energia das partículas que atravessam o filme. Todas essas características indicam que: (a) o filme de Si cristalino é de muito boa qualidade; b) a região próxima à superfície é bem definida e sem um nível significativo de defeitos lineares. Ambas as observações estão em concordância com os resultados de microscopia eletrônica de transmissão dados pelo fornecedor (v. 4.1.1).

As energias detectadas [usando a *aproximação de energia média* (cf. cap. 2)] podem ser ex-

pressas como:

$$E_c = K[E_0 - \frac{dE}{dx}|_{\bar{E}_{entr}}^c l_{entr}] - \frac{dE}{dx}|_{\bar{E}_{saida}}^r l_{saida} \quad (4.1)$$

e

$$E_r = K[E_0 - \frac{dE}{dx}|_{\bar{E}'_{entr}}^r l'_{entr}] - \frac{dE}{dx}|_{\bar{E}'_{saida}}^r l'_{saida}, \quad (4.2)$$

onde o apóstrofe ' refere-se a uma incidência aleatória, K é o fator cinemático, E_0 , a energia do feixe incidente, $\frac{dE}{dx}|^c$, a perda de energia específica canalizada (a ser determinada) e $\frac{dE}{dx}|^r$, a aleatória. \bar{E}_{entr} e l_{entr} (\bar{E}_{saida} e l_{saida}) são a energia média e o comprimento referentes ao caminho de entrada (saída).

Combinado as equações 4.1 e 4.2, obtemos

$$\frac{dE}{dx}|_{\bar{E}_{entr}}^c = \left[\frac{KE_0 - E_c}{KE_0 - E_r} \left(\beta_1 + \frac{\cos\theta_1}{\cos\theta'_1} \right) - \beta_2 \right] \frac{dE}{dx}|_{\bar{E}'_{entr}}^r, \quad (4.3)$$

com

$$\beta_1 \equiv \frac{\frac{dE}{dx}|_{\bar{E}'_{saida}}^r \cos\theta_1}{K \frac{dE}{dx}|_{\bar{E}'_{entr}}^r \cos\theta'_2}, \quad (4.4)$$

$$\beta_2 \equiv \frac{\frac{dE}{dx}|_{\bar{E}_{saida}}^r \cos\theta_1}{K \frac{dE}{dx}|_{\bar{E}'_{entr}}^r \cos\theta_2}, \quad (4.5)$$

onde θ_1 e θ_2 são os ângulos entre o feixe e a normal da amostra e entre a normal da amostra e a direção do detector, respectivamente.

Pode-se notar que, de acordo com as eqs. 4.3, 4.4 e 4.5, a determinação da espessura da camada cristalina superficial do Si não é necessária. A perda de energia das partículas canalizadas é obtida a partir das energias detectadas E_c e E_r , da perda de energia específica em direção aleatória e de fatores geométricos.

As energias E_c e E_r correspondentes à interface Si/SiO₂ foram determinadas ajustando-se os espectros canalizado e aleatório com um algoritmo que, além da função erro [que leva em conta a dispersão em energia da partícula incidente ("straggling") e a resolução do detector], contém a dependência com a energia da seção de choque diferencial de Rutherford. Esse algoritmo consiste da seguinte função de ajuste:

$$f(x) = A_1 f_1(x) + A_2 f_2(x), \quad (4.6)$$

onde:

$$f_1(x) = \frac{1}{2}[1 - 2E_1(x - C)][1 + \operatorname{erf}(z)] - \frac{E_1 D}{\sqrt{\pi}} \exp(-z^2) \quad (4.7)$$

e

$$f_2(x) = \frac{1}{2}[1 - 2E_2(x - C)][1 - \operatorname{erf}(z)] + \frac{E_2 D}{\sqrt{\pi}} \exp(-z^2), \quad (4.8)$$

sendo

$$z \equiv \frac{x - C}{D}. \quad (4.9)$$

Os parâmetros livres são A_1 , A_2 , C , D , E_1 e E_2 ; sendo A_1 e A_2 as alturas dos sinais do Si e do SiO_2 na interface, respectivamente, C , a posição da interface, $D = \sqrt{2} \times \Omega_{r+s}$, onde Ω_{r+s} é a largura da gaussiana (desvio padrão) que contém a dispersão em energia das partículas e a resolução do sistema, e E_1 e E_2 estão relacionados com a perda de energia específica na camada superficial de Si e na camada enterrada de SiO_2 , respectivamente.

As eqs.4.6, 4.7 e 4.8 resultam da convolução de um gaussiana com uma função do tipo

$$F(x) = \begin{cases} \frac{N_1}{(1-a_1x)^2}, & \text{em } (0, t) \\ \frac{N_2}{(1-a_2x)^2}, & \text{em } (t, \infty) \end{cases}, \quad (4.10)$$

onde a_1 e a_2 são constantes positivas que estão relacionadas com a perda de energia dos íons na camada de Si cristalina superficial e no SiO_2 , respectivamente. N_1 e N_2 são fatores de normalização relacionados com as densidades e seções de choque nas duas camadas mencionadas. No cálculo da integral de convolução, fizemos uso da aproximação $\frac{1}{(1+x)^2} \simeq 1 - 2x$.

De acordo com o procedimento descrito acima, mediu-se a perda de energia para íons canalizados ao longo dos eixos $\langle 110 \rangle$ (He) e $\langle 100 \rangle$ (He e B).

4.2.2 Resultados da Perda de Energia de Íons de He sob Canalização

Em Porto Alegre utilizou-se um detector colocado a 165° em relação à direção do feixe incidente. Em Heidelberg, três detectores diferentes foram simultaneamente utilizados. Esses detectores estavam posicionados a diferentes geometrias, mas sempre subentendendo um ângulo de 165° em relação ao feixe de íons.

Ao longo da Direção $\langle 110 \rangle$ do Si

A perda de energia de íons de He ao longo da direção $\langle 110 \rangle$ foi medida com o fim de testar o nosso arranjo experimental bem como o algoritmo desenvolvido para a análise dos dados experimentais (eqs. 4.3 e 4.6). Os experimentos foram realizados num intervalo de energia de 380 a 800 keV. Os resultados obtidos foram comparados com os de Eisen et al. (1972).

Espectros de RBS típicos para uma incidência aleatória e canalizada ao longo da direção $\langle 110 \rangle$ são mostrados na figura 4.3. Esses espectros foram medidos com íons He^{2+} de 760 keV. As razões de contagem mínima (χ_{\min}) foram tipicamente de 2,5 %, o que pode ser considerado um resultado excelente, já que os valores de χ_{\min} para canalização axial variam entre 2,5 e 5%, dependendo do canal.

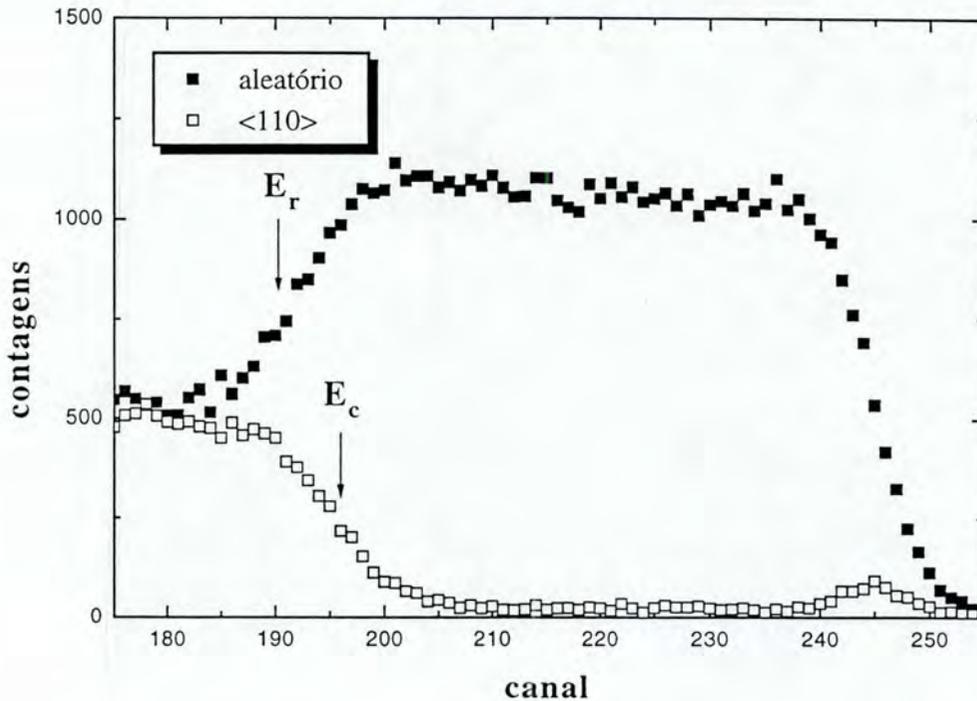


Fig. 4.3: Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 110 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons He^{2+} de 760 keV.

Na figura 4.4 mostramos os resultados de poder de freamento canalizado obtidos no presente experimento (círculos cheios) junto com os resultados previamente obtidos por Eisen et al.(1972)

(asteriscos). Os resultados de Eisen et al. (1972) correspondem ao pico do espectro de energia dos íons transmitidos através do monocristal de silício.

A figura 4.4 mostra que ambos os métodos de determinação da perda de energia canalizada são equivalentes, se consideramos a perda de energia correspondente ao pico do espectro de energia dos íons transmitidos. Esse resultado mostra que tanto o arranjo experimental quanto o método de análise de dados fornecem resultados consistentes com o método de transmissão.

Entretanto, pode-se observar uma diferença na ordem de $\approx 4\%$ entre os presentes valores e aqueles de Eisen et al. (1972). Essa diferença pode ser oriunda de um eventual erro sistemático no poder de freamento eletrônico de He em direção aleatória do Si medido por Niemann et al. (1993), o qual foi utilizado por nós no cálculo da razão α .

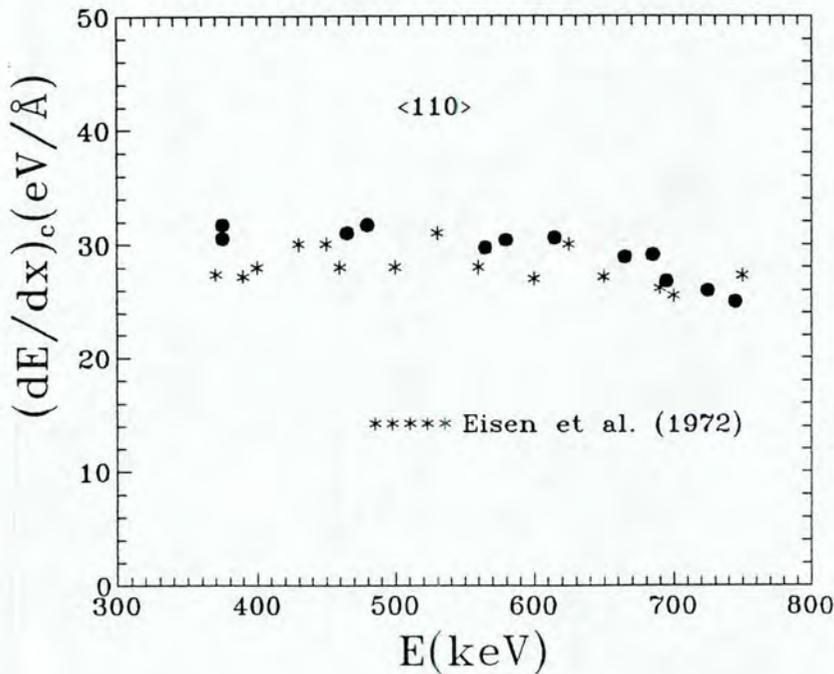


Fig. 4.4: Valores de poder de freamento canalizado em função da energia do íon He^{2+} para a direção $\langle 110 \rangle$ do Si (círculos cheios). Por comparação, mostramos também os resultados de Eisen et al. (1972) (asteriscos).

A principal fonte de erros dos presentes resultados vem da determinação das energias E_c e E_r .

Ao longo da Direção $\langle 100 \rangle$ do Si

Nesta seção descreveremos os resultados de poder de freamento de íons de He ao longo do

eixo $\langle 100 \rangle$ do Si com energias compreendidas entre 500 keV e 4,5 MeV. Os experimentos com energias do projétil entre 200 e 800 keV foram realizados em Porto Alegre, enquanto que as medições a energias mais altas - 800 keV a 4,5 MeV - foram feitas no Instituto Max Planck de Física Nuclear, Heidelberg (Alemanha).

Espectros de RBS típicos para incidências aleatórias e alinhadas ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ são mostrados nas figuras 4.5 e 4.6. Esses espectros foram medidos com íons He^{2+} de 760 keV e 4 MeV, respectivamente. Neste conjunto de experimentos, as razões de contagem mínima (χ_{\min}) variaram entre 2,5 e 5,0 %.

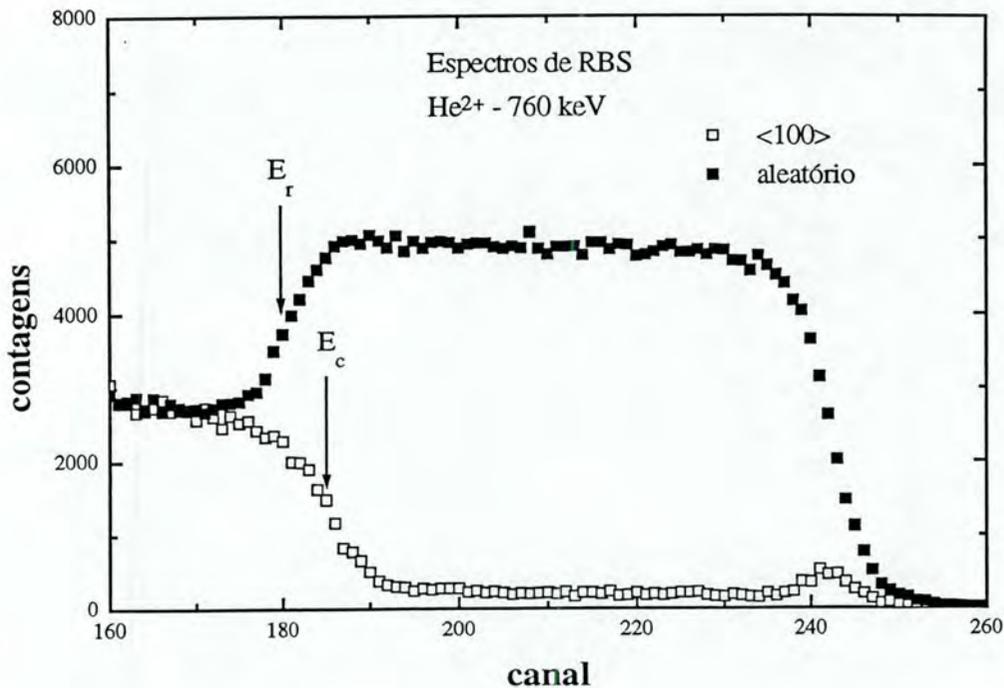


Fig. 4.5: Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons He^{2+} de 760 keV.

Na figura 4.7, mostramos os resultados de perda de energia canalizada obtidos no presente experimento. A dispersão dos pontos é de cerca de 4%, a qual é consistente com o nosso erro experimental. O poder de freamento canalizado tem um máximo largo em torno de 500 keV e decresce rapidamente quando a energia aumenta, indo de $30 \text{ eV}/\text{\AA}$ em 550 keV até $8 \text{ eV}/\text{\AA}$ a 4,5

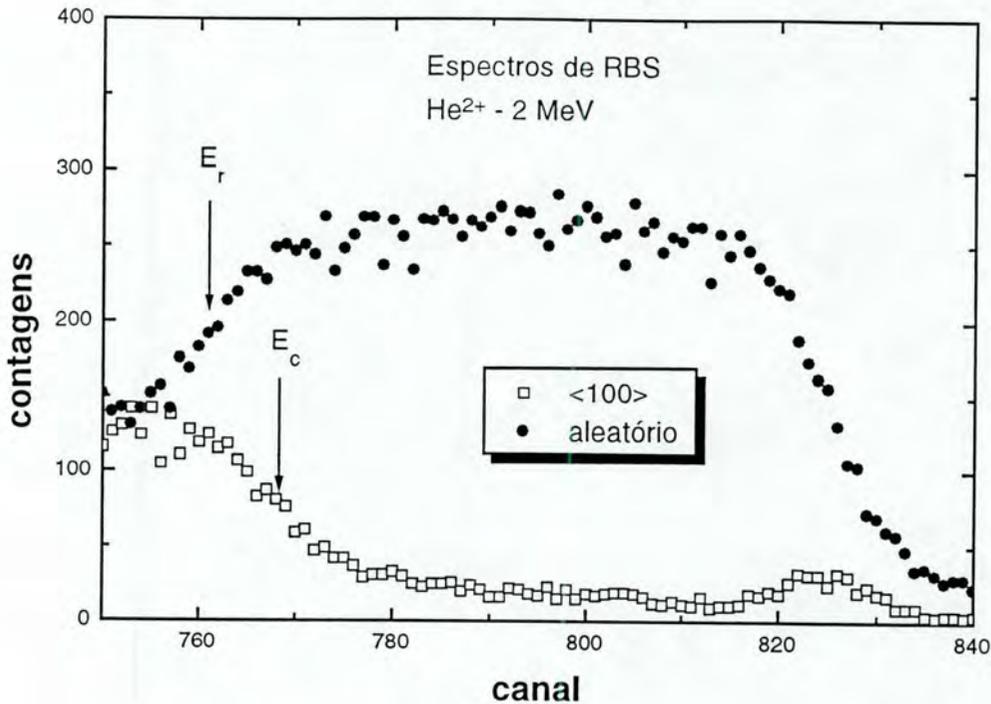


Fig. 4.6: Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons He²⁺ de 2 MeV.

MeV. Uma inspeção da figura 4.7 também mostra que o poder de freamento canalizado quase coincide com o aleatório (Niemann et al., 1993) em torno de 450 keV.

4.2.3 Resultados da Perda de Energia de Íons ¹⁰B ao longo da Direção $\langle 100 \rangle$ do Si

Nesta seção descreveremos os resultados de poder de freamento de íons de B ao longo do eixo $\langle 100 \rangle$ do Si com energias compreendidas entre 500 keV e 9 MeV. Os experimentos com energias do projétil entre 500 e 800 keV foram realizados em Porto Alegre, enquanto que as medições a energias mais altas - 800 keV a 9 MeV - foram feitas no Instituto Max Planck de Física Nuclear, Heidelberg (Alemanha).

Em Porto Alegre, as medições foram realizadas utilizando-se três geometrias diferentes de retroespalhamento, com o detector a 120, 130 e 165° em relação à direção do feixe incidente. Em Heidelberg, três detectores diferentes foram usados simultaneamente. Esses detectores estão

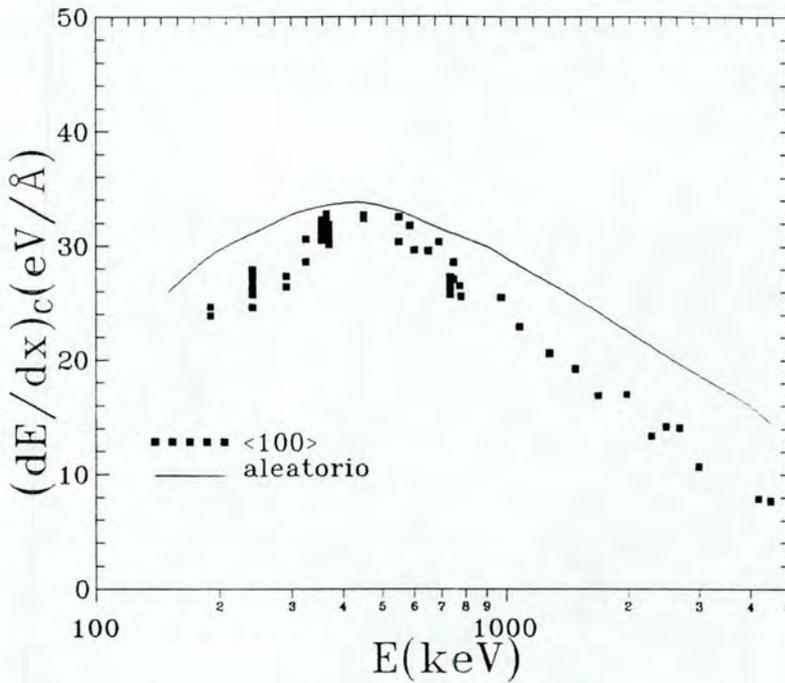


Fig. 4.7: Valores de poder de freamento canalizado em função da energia do íon He^{2+} para a direção $\langle 100 \rangle$ do Si. A linha sólida corresponde ao poder de freamento aleatório tomado de Niemann et al. (1993).

colocados a diferentes geometrias, mas sempre subentendendo um ângulo de 165° em relação ao feixe de íons.

Espectros de RBS típicos para uma incidência aleatória e canalizada de íons ^{10}B ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ são mostrados nas figuras 4.8 e 4.9. Esses espectros foram medidos com íons $^{10}\text{B}^{2+}$ de 800 keV e 8 MeV, respectivamente. As razões de contagem mínima (χ_{min}) variaram tipicamente entre 3 e 8%.

Na figura 4.10 mostramos os resultados de perda de energia de B canalizado em Si obtidos no presente experimento. Como se pode observar, o poder de freamento canalizado aumenta de $42,4 \text{ eV}/\text{\AA}$ em cerca de 50 keV/uma até $79,7 \text{ eV}/\text{\AA}$ em torno de 500 keV/uma. Então ele decresce até $62 \text{ eV}/\text{\AA}$ em 900 keV/uma.

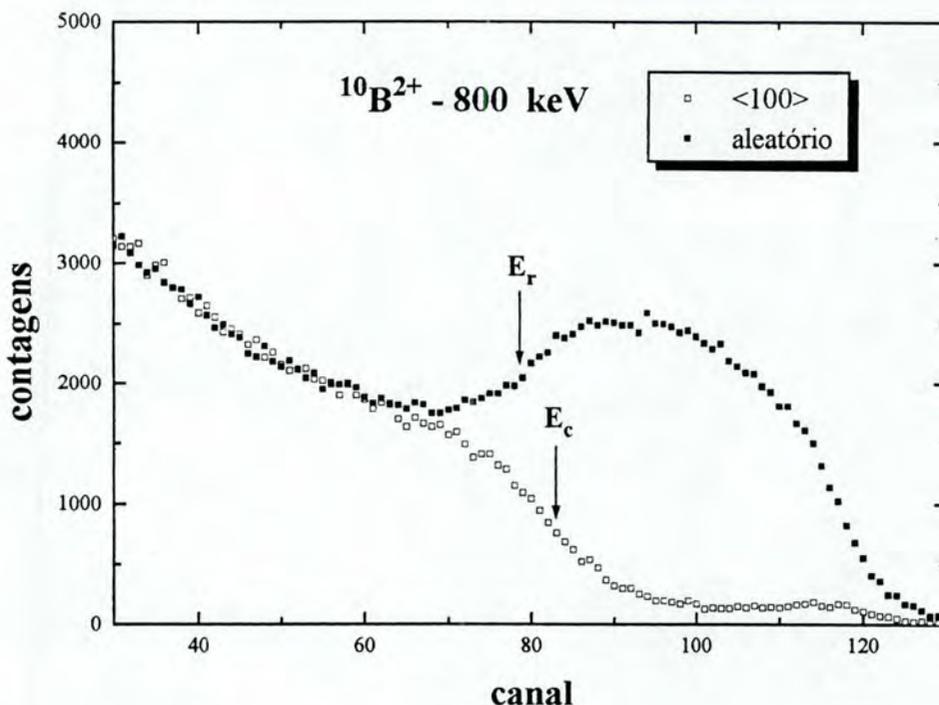


Fig. 4.8: Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons $^{10}\text{B}^{2+}$ de 800 keV.

4.3 Distância de Equilibração de Carga de Íons He ao longo do Canal $\langle 100 \rangle$ do Si.

4.3.1 Medições de Equilibração de Carga

O estado de carga de íons de He que atravessam um alvo flutua de acordo com as probabilidades de perda e captura de elétrons, as quais dependem da velocidade do íon. Depois de uma curta distância atravessada, um estado de equilíbrio médio é atingido. Em uma direção aleatória (para os valores de energia estudados), o processo de alcance do equilíbrio requer a passagem através de umas poucas camadas atômicas (Jans et al., 1993). Entretanto, em uma direção alinhada, o equilíbrio pode ser atingido a profundidades maiores. Nesse trabalho, medimos a perda de energia de pré-equilíbrio, i.e., a perda de energia que ocorre durante o processo em que o equilíbrio de carga é atingido. Esse efeito pode ser medido usando-se He em dois estados de carga diferentes - He^+ e He^{2+} - sob condições de canalização. Os experimentos de troca de carga foram executados com

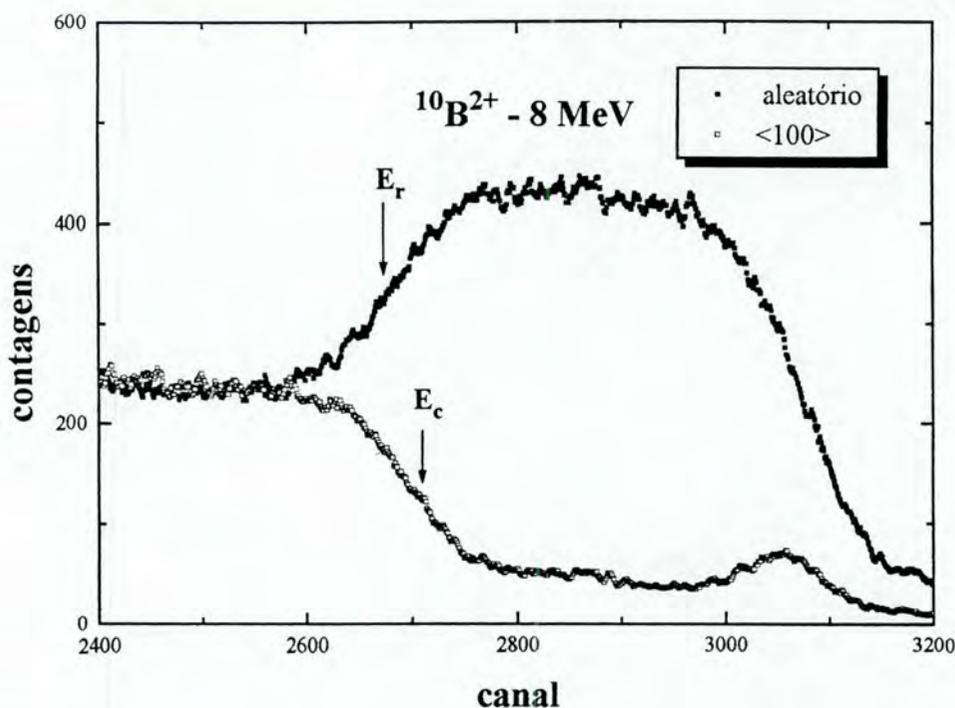


Fig. 4.9: Espectros de RBS aleatório e canalizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX medidos com íons $^{10}\text{B}^{2+}$ de 8 MeV.

íons He^+ e He^{2+} a 380 keV usando-se a técnica de retroespalhamento de Rutherford em direções aleatórias e alinhada ao longo do eixo $\langle 100 \rangle$. As posições dos limiares frontais do sinal de RBS correspondente à camada de SiO_2 foram determinadas com He^+ e He^{2+} . A diferença entre esses dois valores fornece a informação necessária para determinar a diferença entre os poderes de freamento e, por conseguinte, a distância requerida para que esses íons atinjam o equilíbrio de carga.

Não foi efetuado limpeza adicional da amostra após ela ter sido colocada em vácuo. Assim, é possível que a deposição de hidrocarbonetos poderia influenciar a medida do poder de freamento de pré-equilíbrio. A fim de atenuar esse problema, para cada medida, o ponto de batida do feixe sobre o alvo foi transladado. Para cada experimento, uma seqüência de medições com feixe de He^+ , He^{2+} , He^+ e He^{2+} foi executada, a fim de monitorar mudanças na superfície do filme. Além disso, várias ciclos de medições foram feitos sobre diferentes amostras (800 e 1800 Å de espessura).

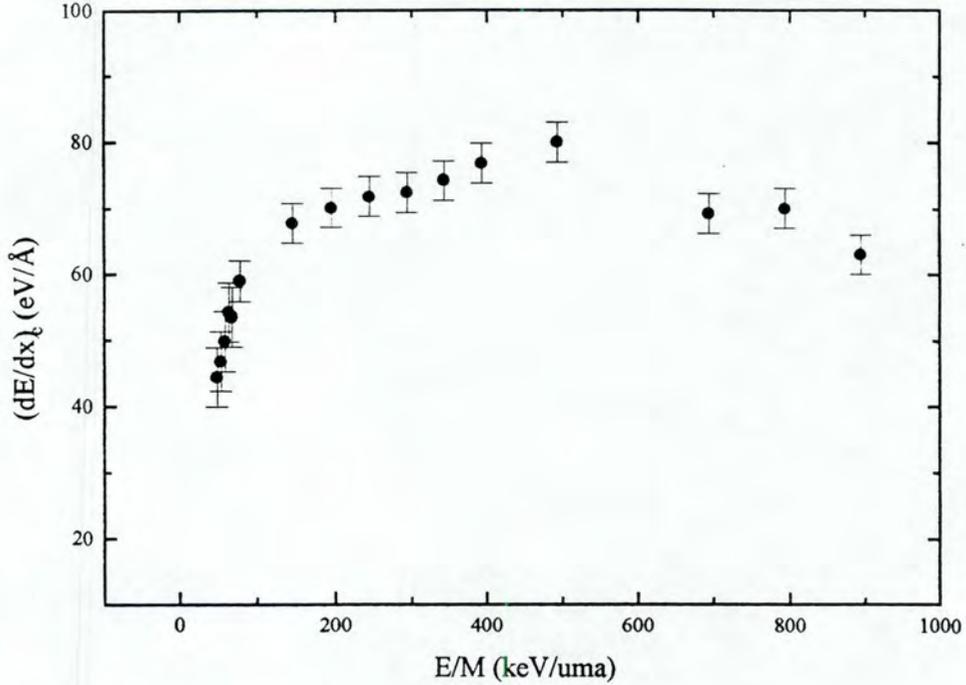


Fig. 4.10: Valores de poder de freamento canalizado em função da energia do íon $^{10}\text{B}^{2+}$ para a direção $\langle 100 \rangle$ do Si.

Os resultados encontrados são reproduzíveis a um nível de 20%. O poder de freamento de pré-equilíbrio foi obtido da expressão:

$$\begin{aligned} \Delta E_{pre} &= \Delta E(\text{He}^{++}) - \Delta E(\text{He}^+) \\ &= \frac{E_c(\text{He}^+) - E_c(\text{He}^{++})}{K} \end{aligned} \quad (4.11)$$

onde $\Delta E(\text{He}^{++})$ e $E_c(\text{He}^{++})$ [$\Delta E(\text{He}^+)$ e $E_c(\text{He}^+)$] são a energia perdida no caminho de entrada e a energia detectada para He^{2+} (He^+) a 380 keV.

4.3.2 Resultados

Após várias medições usando He^+ e He^{2+} alternadamente ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ do Si, observamos que a perda de energia para He^{2+} excede a de He^+ por cerca de 500 eV. Esse efeito

origina-se do fato que, a esse valor de energia, o poder de freamento eletrônico de He^{2+} é maior do que o de He^+ . A diferença entre os poderes de freamento médios para os dois tipos de íons de diferentes estados de carga iniciais dura até que o equilíbrio seja atingido.

Supomos como possíveis somente os estados de carga He^+ e He^{2+} , pois para essa energia, a fração de He^0 pode ser desprezada. As frações de He^+ e He^{2+} presentes no feixe podem ser relacionadas com as seções de choque para captura e perda de elétrons.

Sejam $\phi^{(+)}$ e $\phi^{(2+)}$, respectivamente, as frações de He^+ e He^{2+} presentes no feixe a uma profundidade variável x do alvo. N denota a densidade atômica volumétrica, enquanto σ_c e σ_l são as seções de choque de captura e de perda de elétrons, respectivamente. Então, podemos escrever a seguinte equação para a mudança na composição do feixe, quando ele atravessa uma espessura dx do alvo:

$$\frac{d\phi^{(2+)}}{dx} = -N(\sigma_c\phi^{(2+)} - \sigma_l\phi^{(+)}) \quad (4.12)$$

e

$$\frac{d\phi^{(+)}}{dx} = -N(\sigma_l\phi^{(+)} - \sigma_c\phi^{(2+)}). \quad (4.13)$$

Resolvemos as equações acima com o vínculo $\phi^{(+)} + \phi^{(2+)} = 1$. Temos dois conjuntos de solução diferentes - $\{\phi_1^{(+)}, \phi_1^{(2+)}\}$ e $\{\phi_2^{(+)}, \phi_2^{(2+)}\}$, conforme: (i) o feixe incidente seja composto de íons He^+ ou (ii) de íons He^{2+} , respectivamente. A diferença entre os poderes de freamento eletrônico de pré-equilíbrio no caso de feixe incidente de He^{2+} e no caso de feixe incidente de He^+ será dada por:

$$\begin{aligned} \Delta S &= \left[\left(\frac{dE}{dx} \right) (\text{He}^{2+}) \phi_2^{(2+)} + \left(\frac{dE}{dx} \right) (\text{He}^+) \phi_2^{(+)} \right] \\ &- \left[\left(\frac{dE}{dx} \right) (\text{He}^{++}) \phi_1^{(2+)} + \left(\frac{dE}{dx} \right) (\text{He}^+) \phi_1^{(+)} \right] \\ &= \left[\left(\frac{dE}{dx} \right) (\text{He}^{2+}) - \left(\frac{dE}{dx} \right) (\text{He}^+) \right] \exp[-(\sigma_c + \sigma_l)Nx]. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Por sua vez, a diferença entre as energias perdidas devido aos diferentes estados de carga iniciais pode ser calculada através da seguinte relação:

$$\Delta E(\text{He}^{++}) - \Delta E(\text{He}^+) = \int_0^\infty \Delta S dx$$

$$\begin{aligned}
&= \left[\left(\frac{dE}{dx} \right) (He^{++}) - \left(\frac{dE}{dx} \right) (He^+) \right] \\
&\times \Delta l_{equil}.
\end{aligned} \tag{4.15}$$

com

$$\Delta l_{equil}. = \frac{1}{N(\sigma_c + \sigma_l)} \tag{4.16}$$

onde σ_c e σ_l são as seções de choque para captura e perda de elétrons, respectivamente, e N é a densidade de átomos em uma direção cristalina.

Deve ser destacado que a análise teórica desenvolvida acima não é específica para a situação de canalização. De fato, para íons canalizados, probabilidades de perda e captura de elétrons dependentes do parâmetro de impacto deveriam ser consideradas.

Usando a Aproximação de Born de Onda Plana (PWBA) (Bates e Griffing, 1953) para calcular a perda de energia devido à ionização dos elétrons de valência, determinamos a razão entre os poderes de freamento correspondentes a cada estado de carga, a saber: $\left(\frac{dE}{dx} \right) (He^{++}) / \left(\frac{dE}{dx} \right) (He^+) = 2.4$. Nessa estimativa, considerou-se que o papel do elétron carregado pelo íon He^+ é somente o de blindagem do núcleo do He. Efeitos de anti-blindagem ("antiscreeening") (Montenegro e Meyerhof, 1991) modificariam esse resultado em apenas 10 %.

Então, a distância necessária para que o equilíbrio de carga seja atingido é

$$\frac{500 \text{ eV}}{\left(1 - \frac{1}{2.4}\right) 30 \text{ eV/\AA}} \approx 30 \text{ \AA}. \tag{4.17}$$

Devemos ressaltar, contudo, que esse valor encontra-se no limite de resolução em profundidade da técnica de RBS.

4.4 Dependência Angular da Perda de Energia de Íons de He em torno da Direção $\langle 100 \rangle$ do Si.

Realizamos medições da perda de energia em função do ângulo de incidência para íons de He em Si em torno do eixo cristalográfico $\langle 100 \rangle$. A motivação para esse estudo foi a de obter resultados experimentais sensíveis à dependência da perda de energia eletrônica com o parâmetro de impacto. Cálculos baseados no método de canais acoplados realizados por Grande e Schiwietz (dos Santos et al., 1997 e ref. 4 no apêndice D) foram, então, bem sucedidos em reproduzir o perfil angular da perda de energia de íons de He de 800 keV em torno da direção $\langle 100 \rangle$ do Si.

As medições foram realizadas com o feixe incidindo sobre a amostra segundo direções aleatórias e de canalização. Para a direção $\langle 100 \rangle$ do Si, espectros de RBS foram medidos para vários ângulos θ entre $-1,5^\circ$ e $+1,5^\circ$ variando em passos de $0,1^\circ$. Além disso, a fim de eliminar efeitos devido à canalização planar, repetimos as medições a cinco ângulos azimutais diferentes ($\phi = 15, 26, 37, 56$ e 67°). Após isso, tomamos o valor médio correspondente a cada valor de θ .

As partículas retroespalhadas foram detectadas por um detector de barreira de superfície colocado a 165° em relação ao feixe incidente.

Espectros de RBS típicos tomados com um feixe de He^{2+} de 800 keV para ângulos θ de $0,0$ (canalizado), $0,5$, $0,7$ e 6° (aleatório) são mostrados na fig. 4.11.

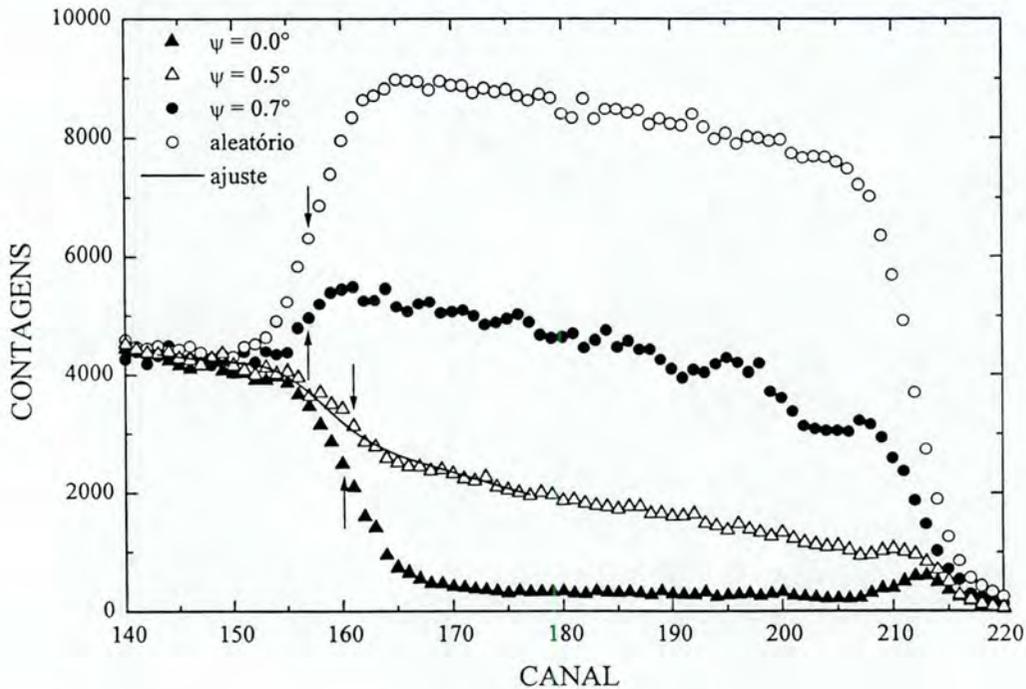


Fig. 4.11: Espectros de RBS aleatório e canalizado para um feixe de ${}^4\text{He}^{2+}$ de 800 keV a ângulos de inclinação θ de $0,0$, $0,5$ e $0,7^\circ$ em torno do eixo $\langle 100 \rangle$ de um alvo do tipo SIMOX.

As posições dos limiares correspondentes à interface são mostradas por flechas. O procedimento empregado até aqui para determinar a perda de energia (ver 4.2.1) não mostrou-se acurado no

estudo da dependência angular do poder de freamento eletrônico. Isso resulta do fato de que, à medida que o ângulo de inclinação aumenta, a parte decanalizada do feixe torna-se maior, distorcendo o perfil dos íons canalizados retroespalhados na interface Si/SiO₂. De fato, o espectro de energia de íons retroespalhados corresponderá à soma de íons canalizados e decanalizados, de forma que uma análise simples considerando somente as posições dos limiares do sinal de RBS não fornece resultados precisos. Por exemplo, de acordo com a fig. 4.11, a perda de energia para $\theta = 0,5^\circ$ parece ser menor do que aquela para $\theta = 0^\circ$. A fim de contornar esse problema, determinamos o perfil de decanalização e eliminamos o mesmo do espectro de RBS original. Esse procedimento é descrito a seguir e no apêndice C.

4.4.1 Análise de Dados

O retroespalhamento de uma partícula que entra em um canal com uma energia E_0 e um ângulo de incidência θ em relação ao eixo do canal será dominado por dois tipos de espalhamento diferentes:

(a) Ela pode mover-se ao longo do canal $< 100 >$ e, então, ser retroespalhada a uma profundidade x' por defeitos no canal ou por átomos de Si ou O na camada de SiO₂. Ela emergirá da amostra a um ângulo θ_{out} com uma energia $E_c(x')$ (ver fig. 4.12).

(b) Ela pode mover-se dentro do canal até uma distância entre x'' e $x'' + dx''$ e, então, ser decanalizada. Ela ainda pode avançar em uma direção quase paralela ao eixo do canal e, finalmente, como mostrado na fig. 4.12, ser retroespalhada a uma distância x , emergindo da amostra com o mesmo ângulo θ_{out} e energia $E(x, x'')$.

A fração total de partículas detectadas com uma energia E_1 é dada pela contribuição das partículas retroespalhadas dentro do canal mais a daquelas que são primeiro decanalizadas, provavelmente em uma direção aleatória, e, então, retroespalhadas:

$$f(E_1) = f_c(E_1) + f_d(E_1), \quad (4.18)$$

com:

$$f_c(E_1) = \int_0^\infty dx' [1 - \chi(x')] P_{sc}^c(x') \delta(E_1 - E_c(x')), \quad (4.19)$$

e

$$f_d(E_1) = \int_0^\infty dx \int_0^x d\chi(x'') P_{sc}(x, x'') \delta(E_1 - E(x, x'')), \quad (4.20)$$

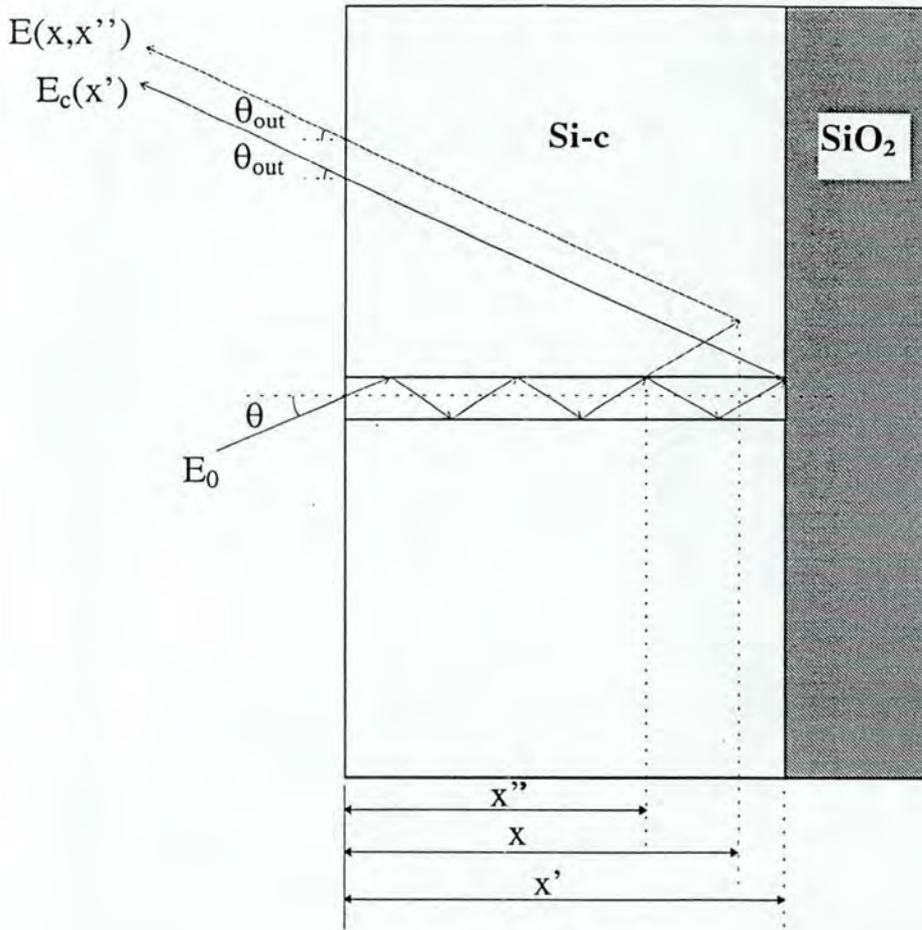


Fig. 4.12: Representação esquemática das duas contribuições mais importantes para o espectro de RBS. Partículas que são retroespalhadas na interface Si/SiO₂ e partículas que são decanalizadas antes de ser retroespalhadas podem ter a mesma energia detectada.

onde $\chi(x')$ é a fração de partículas decanalizadas à profundidade x' e $d\chi(x'')$, a fração de partículas decanalizadas a uma profundidade entre x'' e $x'' + dx''$. $P_{sc}(x, x'')$ é a probabilidade da partícula decanalizada ser retroespalhada com um grande ângulo de desvio a uma profundidade x , emergindo da amostra com uma energia $E(x, x'')$ a um ângulo θ_{out} em relação à normal à superfície do alvo. $P_{sc}^c(x')$ é a probabilidade de uma partícula ser retroespalhada dentro do canal ou na camada de SiO₂ a uma profundidade x' da superfície e ser detectada a um ângulo θ_{out} com uma energia $E_c(x')$. A eq.(4.18) foi avaliada supondo um decrescimento exponencial da fração canalizada ($1 - \chi(x') = \exp(-\lambda x)$) (Morita e Itoh, 1971) e usando as probabilidades de retroespalhamento P_{sc} and P_{sc}^c em termos das densidades atômicas e da seções de choque de Rutherford (Chu et al., 1978: p. 26). A fim de determinar $E_c(x')$ e $E(x, x'')$ em função de x' , x e x'' usamos os

poderes de freamento de He em Si e SiO₂ dados por Niemann et al. (1993) e Ziegler et al. (1985), respectivamente. Então, ajustamos os espectros experimentais com a função $f(E_1)$ [após levar em conta a flutuação em energia das partículas do feixe ("energy straggling") e a resolução do sistema de detecção]. Com esse procedimento obtemos: (a) a fração do feixe constituída de partículas decanalizadas e (b) a perda de energia no caminho de entrada. Para maiores detalhes, ver apêndice C.

Deve-se ressaltar que, no procedimento de ajuste descrito acima, há somente dois parâmetros livres: (a) o poder de freamento canalizado $\left(\frac{dE}{dx}\right)^c$ e (b) a taxa de decanalização λ . Além disso, gostaríamos de mencionar que, sempre que a fração das partículas decanalizadas é menor do que $\sim 15\%$, a presente análise produz os mesmos valores de perda de energia do que aquela dada pelo método anteriormente descrito - ver 4.2.1.

A linha sólida na fig. 4.11 mostra o resultado do procedimento de ajuste aplicado ao espectro de RBS correspondente ao ângulo $\theta = 0,5^\circ$. Dessa forma, obtemos o poder de freamento de partículas de He em função do ângulo θ e fizemos a média sobre o ângulo azimutal. A figura 4.13 mostra os resultados finais. Como pode ser observado, a razão α tem uma semi-largura de cerca de $0,4^\circ$, a qual é quase a metade do correspondente valor do perfil de decanalização ($0,7^\circ$), o qual também é mostrado na fig. 4.13. Isso significa que, a grandes ângulos de incidência, íons canalizados perdem tanta energia quanto em direção aleatória. Essa característica é uma consequência das diferentes dependências com o parâmetro de impacto das transferências de energia eletrônica e nuclear, a qual está relacionada com a distribuição espacial e a baixa massa dos elétrons.

Como já foi dito anteriormente, Grande e Schiwietz (dos Santos et al., 1997 e artigo n.º 4 do apêndice D) realizaram cálculos de primeiros princípios em conexão com o presente estudo da perda de energia eletrônica de íons de He em torno do eixo $\langle 100 \rangle$ do Si. Esses cálculos serão descritos a seguir.

4.4.2 Procedimento Teórico

A dependência angular do poder de freamento eletrônico mostrada na fig. 4.13 é uma consequência direta da dependência com o parâmetro de impacto da perda de energia eletrônica. Seja θ o ângulo de entrada do feixe de He. Então, a energia média perdida pelo projétil após ele ter atravessado uma espessura t do cristal de Si é dada por

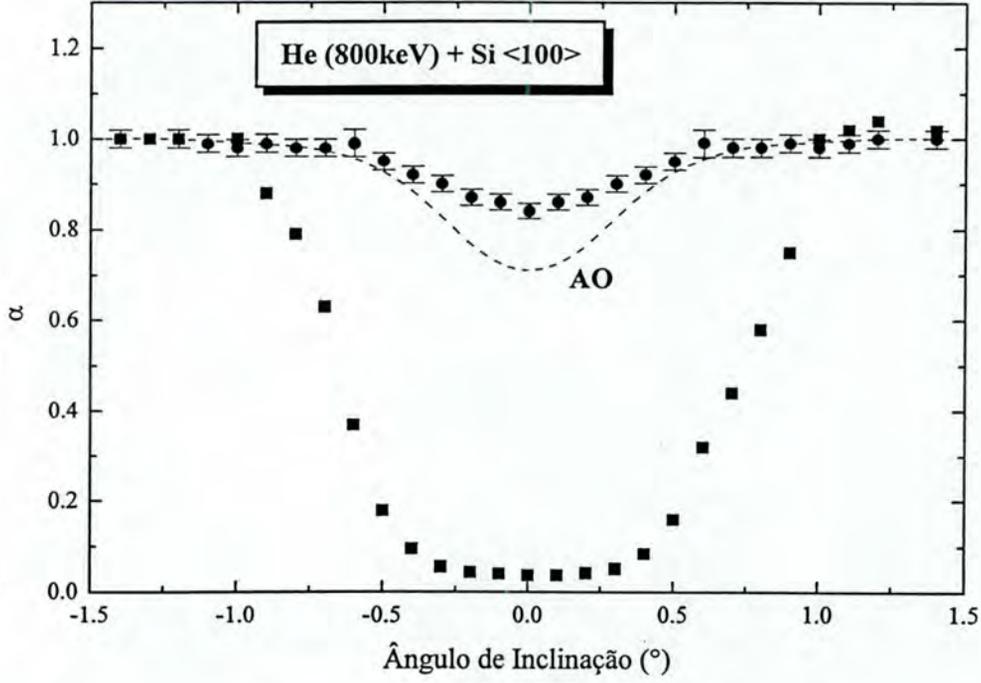


Fig. 4.13: Razão α entre os poderes de freamento canalizado e aleatório para íons de He de 800 keV em torno da direção $\langle 100 \rangle$ do Si em função do ângulo de inclinação. Os círculos cheios são os presentes resultados experimentais. Na mesma escala (quadrados cheios) representamos o perfil de decanalização. Alinha tracejada representa os resultados dos cálculos baseados no método de canais acoplados.

$$\Delta E(\theta) = \frac{\int_{\mathcal{A}} d^2\rho \int_0^t dx \frac{dE}{dx}(\vec{\rho}) \Phi(\theta, \vec{\rho}, x)}{\int_{\mathcal{A}} d^2\rho \int_0^t dx \Phi(\theta, \vec{\rho}, x)} \quad (4.21)$$

onde \mathcal{A} é a área transversal do canal $\langle 100 \rangle$ do Si, $\vec{\rho}$ é a distância transversal e Φ é a distribuição de fluxo à distância $\vec{\rho}$ e profundidade x . A perda de energia por distância atravessada $dE/dx(\vec{\rho})$ pode ser dividida em três contribuições:

$$\frac{dE}{dx}(\vec{\rho}) = \left(\frac{dE}{dx}(\vec{\rho})\right)_{inner} + \left(\frac{dE}{dx}(\vec{\rho})\right)_{valence} + \left(\frac{dE}{dx}(\vec{\rho})\right)_{proj.-e} \quad (4.22)$$

A primeira contribuição corresponde à perda de energia devido aos elétrons das camadas internas dos átomos de Si. Uma vez que esses elétrons são altamente localizados, a correspondente

perda de energia depende fortemente da distância transversal e pode ser calculada acuradamente considerando-se a contribuição de cada átomo de Si (Schiwietz e Grande, 1994b). Então, desprezando qualquer efeitos de estado sólido, o primeiro termo da eq.(4.22) pode ser avaliado como

$$\left(\frac{dE}{dx}(\vec{\rho})\right)_{inner} = \frac{Q(p_1) + Q(p_2) + Q(p_3) + Q(p_4)}{d} \quad (4.23)$$

onde $Q(p)$ é a energia média transferida aos elétrons internos do átomo de Si (camadas K e L). A distância d corresponde à distância interatômica ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ do Si (5.43 Å) e p_1, p_2, p_3 e p_4 são os parâmetros de impacto relativos aos quatro átomos de Si equidistantes do centro do canal $\langle 100 \rangle$. As contribuições dos outros átomos de Si são desprezadas, uma vez que elas são próximo de zero.

O segundo termo da eq. 4.22 é devido aos elétrons de valência do Si (camada M). Esses elétrons são quase homogeneamente distribuídos. Supomos que essa contribuição é independente da posição transversal do íon $\vec{\rho}$. Usando a aproximação de densidade local, a variação espacial da contribuição dos elétrons de valência foi calculada por Dygo et al. (1995) para as direções $\langle 100 \rangle$ e $\langle 110 \rangle$ do Si. De acordo com esse trabalho, a perda de energia através do canal $\langle 100 \rangle$ do Si é independente da posição transversal do íon $\vec{\rho}$ dentro de 15%, levando a uma variação de menos de 3% para a razão α mostrada nas figs. 4.13 e 4.16. Essa situação é diferente para o canal mais largo $\langle 110 \rangle$, onde a dependência com a posição da perda de energia eletrônica devido aos elétrons de valência tem de ser considerada (Dygo et al., 1995).

Finalmente, o último termo na eq. 4.22 corresponde à perda de energia devido à ionização e/ou excitação do projétil. O íon incidente He^{2+} pode capturar elétrons do Si. Esse processo leva à formação de He^+ . A perda de energia decorrente desse processo de captura já é levada em conta nos primeiros dois termos da eq. 4.22. Entretanto, para projéteis que carregam elétrons, além da captura, a excitação e/ou ionização do projétil também é uma fonte de perda de energia. A transferência de energia em virtude da excitação e ionização do projétil depende fortemente do parâmetro de impacto da colisão He-Si. Conseqüentemente, a perda de energia por distância atravessada, $\left(\frac{dE}{dx}(\vec{\rho})\right)_{proj.-e}$, pode também ser determinada em termos da perda de energia média em função do parâmetro de impacto b , similarmente à eq. 4.23. O raio orbital do íon He^+ no estado fundamental (a principal fração dos íons He^+) é pequeno comparado com a distância interatômica em Si. Uma vez que a velocidade é suficientemente baixa, espera-se que efeitos de coerência devidos à distribuição periódica dos átomos do alvo ao longo do canal sejam de menor importância.

O elétron do íon He^+ pode ser removido através de interações coulombianas com os átomos

de Si, produzindo He^{2+} . Após repetidos eventos de troca de carga (depois de atravessar algumas monocamadas), uma distribuição de estados de carga de equilíbrio é alcançada. Os valores das frações de estado de carga para íons de He de 800 keV canalizados em Si podem ser encontrados em Petty e Dearnaley (1974). A fração de íons de He duplamente ionizados, f_{++} , é $\approx 0,65$ e a de simplesmente ionizados, f_+ , 0,35. A fração de He^0 , f_0 , pode ser desprezada.

A fig. 4.14 mostra um esquema dos processos básicos de perda de energia de um íon de He penetrando em Si, a saber: (a) a excitação e/ou ionização de um átomo de Si pelo impacto de um íon He^{2+} ou He^+ ; (b) a excitação e/ou ionização do projétil através de interações coulombianas com o núcleo de um átomo de Si e os elétrons e (c) captura dos elétrons do Si em estados desocupados dos íons He.

A altas energias, o processo dominante é a ionização e excitação dos átomos de Si pelo impacto de He^{2+} , o qual pode ser acuradamente descrito por teoria de perturbação de primeira ordem. Entretanto, no presente caso (200 keV/uma), somente cálculos não-perturbativos fornecem valores realistas da perda de energia. No caso da ionização do projétil, cálculos de primeira ordem superestimam a seção de choque de perda por um fator 3 (para colisões com átomos de Ne a 1000 keV) (Sant'Anna et al., 1995; Grande et al., 1996), porque as probabilidades de ionização excedem 100% no caso de alvos pesados.

A fim de obter a distribuição do fluxo dos íons, usamos o modelo do potencial transversal contínuo de uma corda de átomos (v. cap. 3). Conseqüentemente, somente o movimento transversal (através do canal $\langle 100 \rangle$) tem de ser determinado. Para canalização ao longo do eixo $\langle 100 \rangle$ do Si, quatro potenciais de corda de Moliere (v. cap. 3) foram adicionados, para calcular a energia potencial em função da posição \vec{r} (fig. 3.10). Resolvemos numericamente as equações de movimento de Newton para um "ensemble" de íons incidindo com um ângulo de entrada θ sobre o canal. Então o movimento transversal bidimensional e a distribuição de fluxo dos íons Φ foram determinados em função da profundidade penetrada. A distribuição de fluxo dos íons poderia também ser calculada lançando-se mão da suposição de equilíbrio estatístico (v. cap. 3). Entretanto, a comparação com a densidade de fluxo determinada a partir da solução numérica das Equações de Newton mostra que o equilíbrio estatístico não é atingido para a espessura da amostra utilizada neste experimento.

A razão α pode ser escrita como

$$\alpha = \frac{\langle \Delta E \rangle (\theta)}{\Delta E_{\text{aleatório}}} \quad (4.24)$$

onde $\langle \Delta E \rangle$ é obtido da eq.(4.21) após fazer a média da perda de energia por distância atraves-

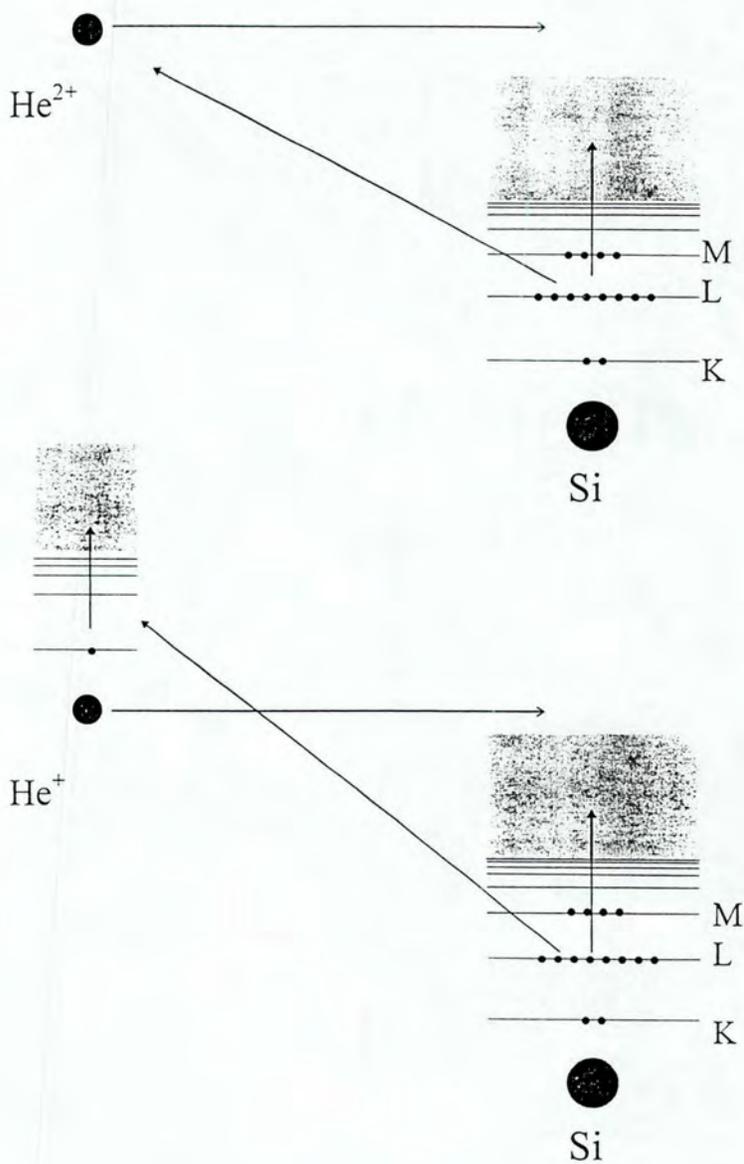


Fig. 4.14: Representação diagramática dos processos básicos de perda de energia de um feixe de íons de He colidindo com átomos de Si.

sada para cada distribuição de estado de carga f_+ and f_{++} . Aqui, supomos que a distribuição de fluxo dos íons Φ é independente do estado de carga do projétil para os íons He^{2+} e He^+ , uma vez que as trajetórias dos íons são basicamente determinadas pelo potencial blindado dos átomos de

Si. $\Delta E_{aleatório}$ corresponde à energia perdida pelo projétil após atravessar a espessura t da camada superficial cristalina do Si em trajetória aleatória, a qual foi calculada tomando-se os poderes de freamento de He em Si de Niemann et al. (1993).

No que segue, descreveremos o cálculo das contribuições para a perda de energia eletrônica envolvendo os elétrons das camadas internas do Si e o elétron do projétil (para a fração de He^+), as quais são responsáveis pela dependência angular da perda de energia canalizada. A perda de energia decorrente de interação do projétil com os elétrons de valência foi obtida a partir dos valores de poder de freamento de Niemann et al. (1993), através da subtração das contribuições de outros processos.

Método dos Canais Acoplados

Usualmente, supõe-se que excitações atômicas através dos elétrons internos podem ser tratadas adequadamente como eventos atômicos localizados. Foi mostrado em termos teóricos por Schiwietz e Grande (1994b) que todas as excitações de alta energia (ionizações atômicas envolvendo elétrons de camadas internas e externas) podem ser tratadas usando-se modelos de colisões atômicas e que o modelo de átomo livre é suficiente para descrever perdas de energia para íons incidentes com energia superior a ≈ 10 keV/uma, mesmo quando a perda de energia é dominada pela contribuição oriunda da interação com elétrons da banda de condução. Aqui, focaremos nossa atenção sobre tratamentos atômicos do processo de transferência de energia, deixando de lado transições intra-banda e excitações coletivas tais como plásmos em volume (bulk) e na superfícies de alvos sólidos.

Esses cálculos foram baseados no método de canais-acoplados descrito no cap. 1.

Para projéteis He^{2+} , a perda de energia eletrônica média é escrita como:

$$Q_{++}(p) = \sum_i 2 \times Q_i^{He^{2+} \rightarrow Si}(p), \quad (4.25)$$

onde $Q(p)$ é calculada de acordo com a eq. 1.82 os estados iniciais i correspondem às camadas K e L ($i = 1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$). O fator dois corresponde ao número de elétrons no orbital inicial i . Para o caso de He simplesmente ionizado, origina-se não somente dos elétrons das camadas internas, mas também da excitação e ionização do projétil. Conseqüentemente, a perda de energia média para a fração do feixe composta de He^+ é

$$Q_+(p) = \sum_i 2 \times Q_i^{He^+ \rightarrow Si}(p) + Q_{1s}^{Si \rightarrow He^+}(p) \quad (4.26)$$

e a média da perda de energia sobre a distribuição de estados de carga é dada por

$$\langle Q \rangle (p) = f_+ Q_+(p) + f_{++} Q_{++}(p), \quad (4.27)$$

a qual, em conexão com as eqs. 4.22, 4.23) e 4.24, fornece a dependência angular do poder de freamento sob condições de canalização. Para o caso de íons nus, a interação entre o projétil e o elétron ativo é descrita exatamente pela energia potencial coulombiana. No caso onde o projétil carrega elétrons, o potencial "visto" pelo elétron ativo contém não somente a parte coulombiana devido à carga nuclear do projétil, mas também o potencial estático produzido pelos elétrons do projétil que blindam a carga nuclear desse. Deve ser enfatizado que os cálculos da perda de energia devido ao elétron do projétil são executados num sistema de referência onde o projétil está em repouso. Então a partícula perturbativa que chega é o átomo de Si neutro.

Nos presentes cálculos de canais acoplados foram usados um grande número de pacotes de onda contínuos (até 350 estados "gerade" com ondas parciais até $l = 8$, uma vez que o cálculo do poder de freamento eletrônico demanda alta acurácia para o espectro de energia dos elétrons emitidos. Além disso, a perda de energia devido à captura em estados do projétil é incluída naturalmente em um cálculo com uma base grande de estados. Detalhes adicionais dos cálculos, e.g., o tratamento numérico dos estados de contínuo, base adotada, tratamento dos projéteis blindados, etc. podem ser encontrados em Schiwietz (1990), Schiwietz e Grande (1992) e Grande et al. (1993 e 1996).

Fluxo dos Íons Canalizados

A distribuição do fluxo de íons calculada para um incidência normal $\theta = 0$ e integrada ao longo dos 1500 Å de espessura do alvo é apresentada na fig. 4.15. A concentração de fluxo no centro do canal ("flux peaking", v. cap. 3) é responsável pelo decréscimo do poder de freamento canalizado, uma vez que a perda de energia por distância atravessada tem um mínimo no centro do canal. Aumentando-se o ângulo de incidência θ , a densidade de partículas torna-se mais uniforme. Para grandes ângulos, a distribuição de partículas através do canal é constante como no caso de uma incidência aleatória. Com a distribuição de fluxo dependente do ângulo e a perda de energia média por distância atravessada, obtemos a perda de energia em função do ângulo de incidência.

A razão α de perda de energia foi, então, calculada levando em conta correções experimentais (deposição de hidrocarbonetos e formação de uma camada de óxido nativo) e teóricas (correções no modelo de partícula independente e exclusão de processos de captura múltipla). Detalhes

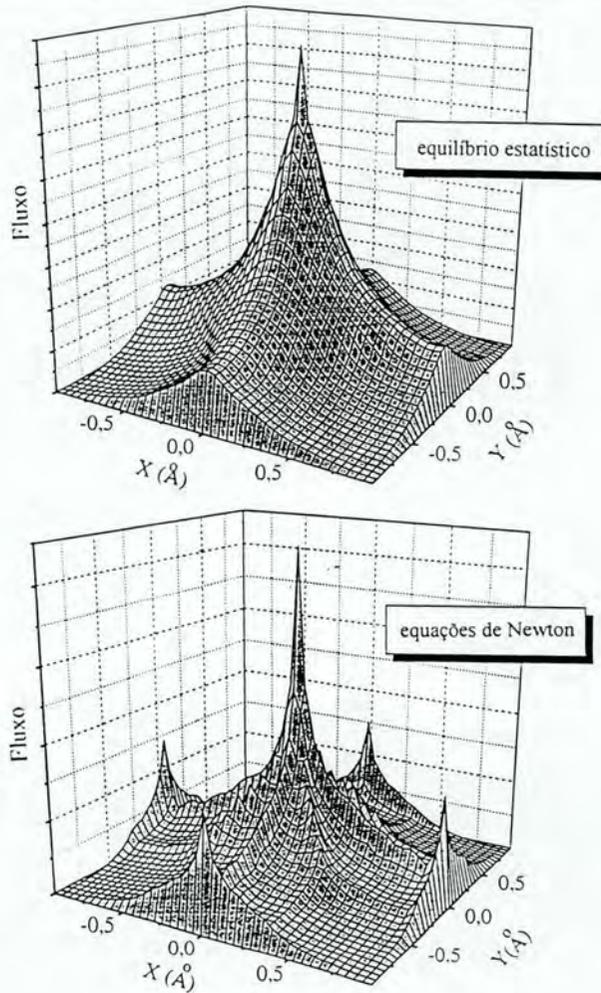


Fig. 4.15: A distribuição do fluxo dos íons de He^{2+} através do canal $\langle 100 \rangle$ mediada sobre os 1500 Å de espessura do filme.

adicionais podem ser vistos no artigo n.º 4 do apêndice D. Os resultados desses cálculos são mostrados na fig. 4.16.

4.5 Medições da Perda de Energia de Íons de Boro em Direções Aleatórias do Si.

4.5.1 Procedimento Experimental

Neste trabalho, também medimos a perda de energia de íons movendo-se em direções não-alinhadas (aleatórias) do Si. Essas medições foram motivadas por dois fatos: a) a absoluta carência de dados experimentais e b) a decisão de verificar os únicos valores disponíveis na literatura - aqueles fornecidos pela subrotina RSTOP do programa TRIM. Deve ser ressaltado que esses

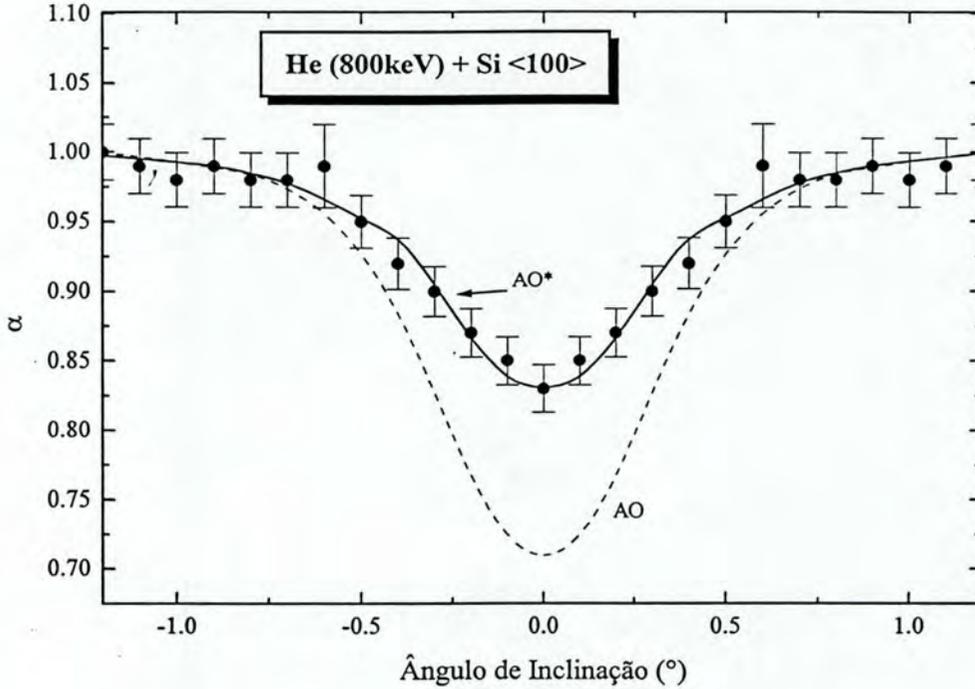


Fig. 4.16: Razão α entre os poderes de freamento canalizado e em direção aleatória para íons de He de 800 keV ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ do Si em função do ângulo de incidência. Os círculos cheios representam os dados experimentais, a linha tracejada, os resultados dos cálculos sem as correções teóricas e experimentais (AO) - v. o texto - e a linha cheia, os resultados teóricos corrigidos (AO*).

valores não são de origem experimental, mas sim obtidos através do procedimento de escalonamento descrito no cap. 1.

Para este experimento, utilizamos um marcador de Bi previamente implantado em uma amostra de Si amorfa. Primerio, determinamos o alcance projetado R_p da distribuição de íons de Bi implantados em Si. Para esse fim, empregamos um feixe de He^{2+} . Depois, determinamos a posição em energia do mesmo marcador de Bi usando feixes de $^{10}\text{B}^{2+}$ de diferentes energias. Com ambas as informações fomos capazes de determinar o poder de freamento aleatório de ^{10}B em Si, como será descrito a seguir.

A seqüência de experimentos foi a seguinte: primeiro, amorfizamos uma amostra de Si < 100 > usando um feixe de Ar ($\phi = 2 \times 10^{14} \text{ at/cm}^2$, $E=300 \text{ keV}$). Depois disso, a amostra foi implantada com um feixe de Bi de 30 keV a uma fluência $\phi = 10^{15} \text{ at/cm}^2$. Subseqüentemente, determinamos o alcance do pico de Bi implantado, usando um feixe de He^{2+} de 800 keV do implantador de íons de 400 kV de Porto Alegre. As partículas retoespalhadas foram detectadas por um detector de Si de barreira de superfície colocado a 165° com respeito à direção do feixe. A resolução global foi melhor do que 12 keV. As medições de alcance foram feitas em dois tipos de geometria: (a) com feixe incidindo em uma direção paralela à normal da amostra (geometria normal) e (b) com o feixe a cinco ângulos diferentes com respeito à normal da amostra variando entre 15 e 60° . Um espectro típico de RBS para a geometria normal é mostrado na fig. 4.17.

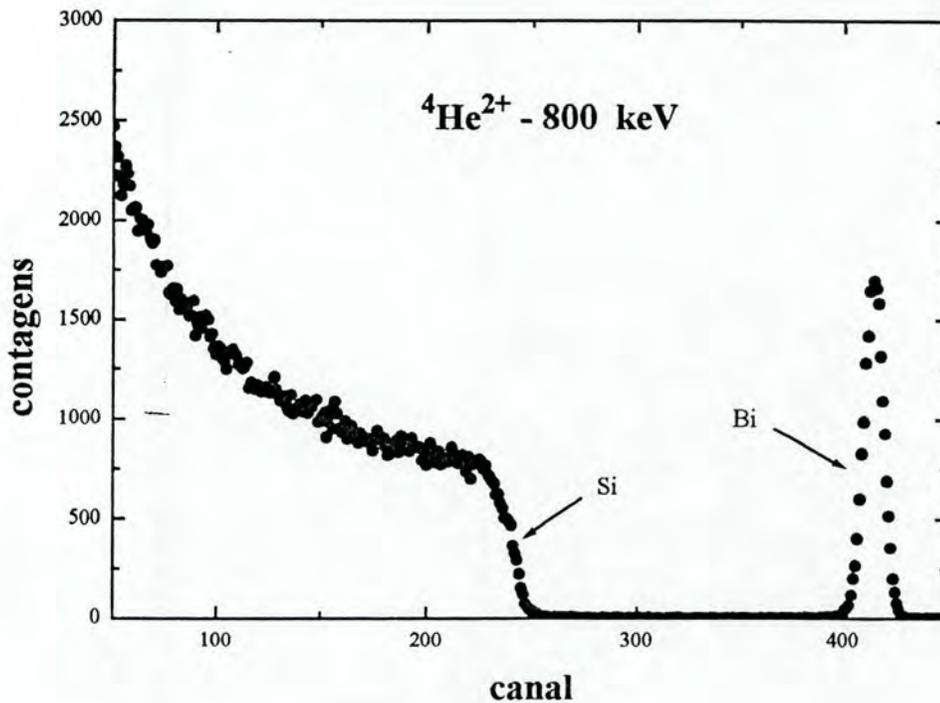


Fig. 4.17: Espectro de RBS aleatório medido com íons $^4\text{He}^{2+}$ de 800 keV incidentes sobre um alvo de Si amorfizado. Essa amostra contém um marcador constituído por um pico de íons de Bi implantados a uma energia de 30 keV.

A conversão para profundidade foi executada usando os valores recentes de perda de energia

específica de Niemann et al. (1993). Em conseqüência, obtivemos o seguinte valor de alcance R_p :

$$R_p = 144 \pm 8 \text{ \AA}.$$

Deve-se salientar que o valor acima foi obtido de uma média de dez medições diferentes de alcance realizadas em geometrias normal e inclinadas. O valor do erro foi obtido a partir do tratamento estatístico das medições individuais e da incerteza nos valores da perda de energia do He. Outras fontes de erros, tais como incertezas na geometria e na energia do feixe são de muito menos importância ($< 0,5\%$).

No passo seguinte, determinamos a posição em energia $E(R_p)$ do pico de Bi implantado, usando feixes de ^{10}B com energias que variaram entre 350 e 800 keV. Um espectro de RBS típico tomado com um feixe de ^{10}B de 800 keV é mostrado na fig. 4.18, onde assinalamos com $E(R_p)$ o valor de energia correspondente ao pico da distribuição dos íons de bismuto implantados. O fator de perda de energia para íons de boro retroespalhados por átomos de Bi e freados na matriz de silício $[S(B)]_{Bi}^{Si}$ pode ser escrito como

$$[S(B)]_{Bi}^{Si} = \frac{K_{Bi}E_0 - E(R_p)}{R_p}. \quad (4.28)$$

Portanto, podemos deduzir os valores de $[S(B)]_{Bi}^{Si}$ para ^{10}B usando o valor de alcance já determinado e o correspondente valor de $E(R_p)$.

A relação entre o fator de perda de energia $[S(B)]_{Bi}^{Si}$ e a perda de energia por unidade de comprimento dE/dx [na aproximação de energia de superfície (Chu et al., 1978: p. 35)] é dada por

$$[S(B)]_{Bi}^{Si} = \frac{K_{Bi}}{\cos \theta_1} \frac{dE}{dx} \Big|_{E_0} + \frac{1}{\cos \theta_2} \frac{dE}{dx} \Big|_{K_{Bi}E_0}. \quad (4.29)$$

Pode-se observar das expressões 4.28 e 4.29 que, pelo menos duas medições de $E(R_p)$ a diferentes geometrias são necessárias, a fim de determinar a perda de energia dE/dx a E_0 e a $K_{Bi}E_0$. No presente experimento, para cada valor de energia dos íons de ^{10}B , realizamos quatro diferentes medições variando o ângulo entre a direção do feixe incidente e a normal da amostra. O conjunto de medições para cada energia foi repetido várias vezes e os resultados encontrados foram reproduzíveis dentro de 5%.

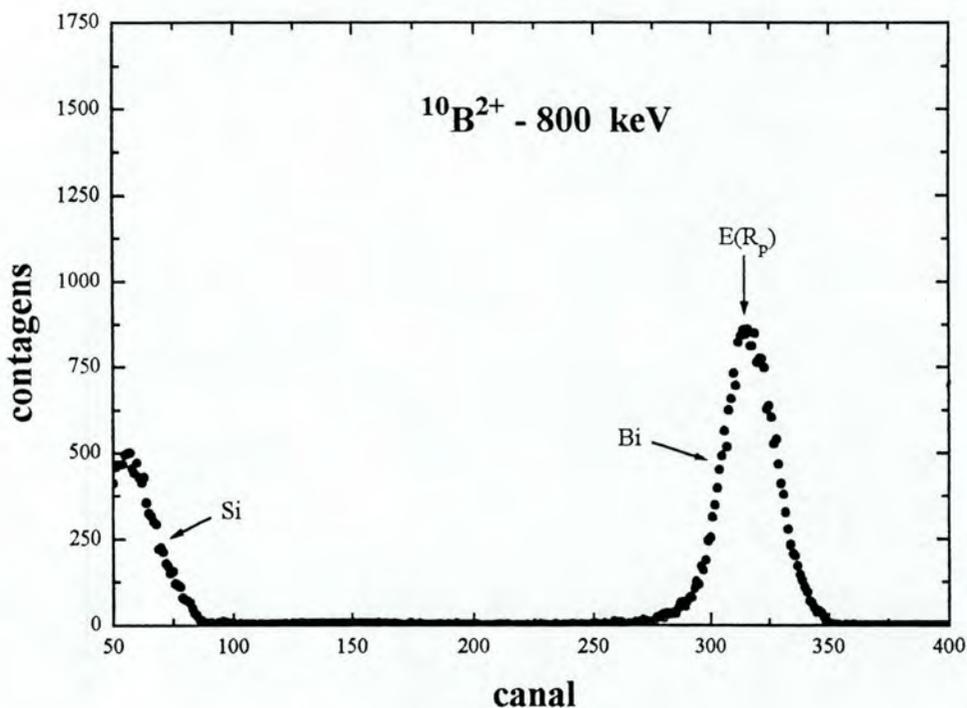


Fig. 4.18: Espectro de RBS aleatório medido com íons $^{10}\text{B}^{2+}$ de 800 keV incidentes sobre um alvo de Si amorfizado. Essa amostra contém um marcador constituído por um pico de íons de Bi implantados a uma energia de 30 keV.

4.5.2 Análise de Dados

Como mencionado anteriormente, na presente análise de dados, usamos a aproximação de superfície (Chu et al., 1978: p. 34). Esse procedimento é justificado, porque o marcador de Bi está localizado numa região muito próxima à superfícies ($\approx 150 \text{ \AA}$).

A expressão 4.29 pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{K_{\text{Bi}} E_0} = m \left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0} + n, \quad (4.30)$$

onde: $m \equiv -K_{\text{Bi}} \frac{\cos \theta_2}{\cos \theta_1}$ e $n \equiv [S(B)]_{\text{Bi}}^{\text{Si}}$.

Variando-se θ_1 , pode-se obter uma família de retas no plano $\left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0}$ versus $\left. \frac{dE}{dx} \right|_{K_{\text{Bi}} E_0}$. A intersecção de duas retas deste plano dá - para cada energia do ^{10}B - os correspondentes valores de $\left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_0}$ e $\left. \frac{dE}{dx} \right|_{K_{\text{Bi}} E_0}$.

A fim de minimizar erros, escolheu-se valores de θ_1 (e conseqüentemente θ_2) de forma a maximizar o ângulo entre cada duas retas. Um gráfico típico de $\frac{dE}{dx}|_{E_0}$ versus $\frac{dE}{dx}|_{K_{B_i}E_0}$ para íons de ^{10}B de 700 keV é mostrado na fig. 4.19.

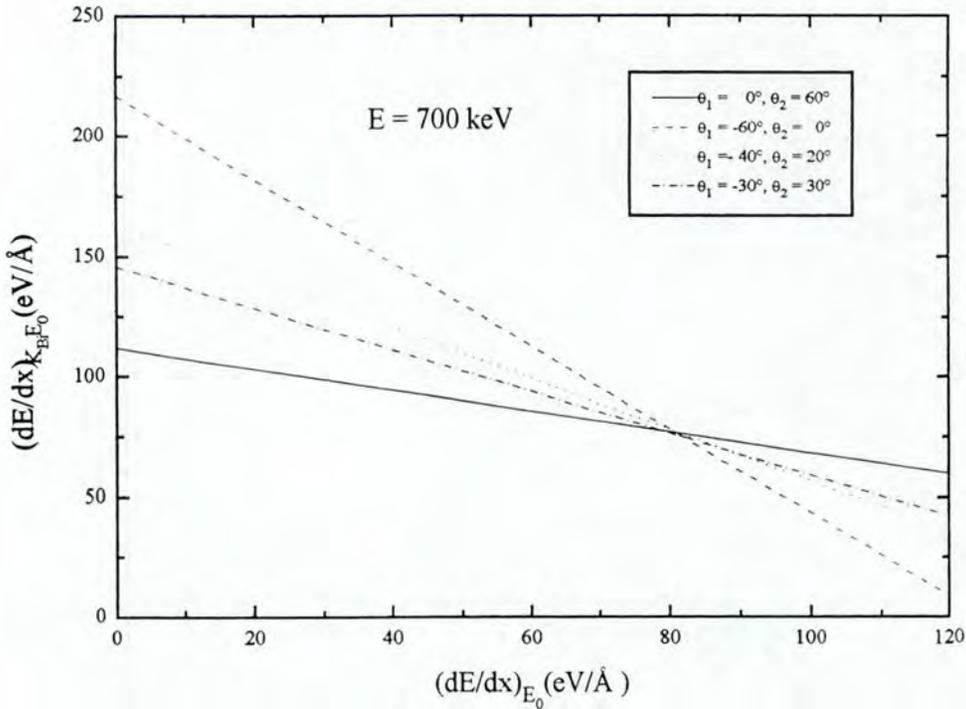


Fig. 4.19: $\frac{dE}{dx}|_{E_0}$ versus $\frac{dE}{dx}|_{K_{B_i}E_0}$ para íons de ^{10}B a 700 keV. As linhas retas correspondem as geometrias especificadas. O ponto de intersecção de duas retas dá os valores de perda de energia específica medidos ao longo do caminho de entrada e do caminho de saída.

Deve-se notar que, para cada valor de energia, existe um máximo de seis conjuntos de diferentes valores de $\frac{dE}{dx}|_{E_0}$ e $\frac{dE}{dx}|_{K_{B_i}E_0}$ que se originam da indefinição no ponto de intersecção. Então, tomamos os valores médios correspondentes. Os erros foram calculados levando em conta: (a) a dispersão estatística e (b) as incertezas nos poderes de freamento do He, a qual é da ordem de 1% (Niemann et al., 1993).

4.5.3 Resultados

Na fig. 4.20 são mostrados os poderes de freamento aleatórios de ^{10}B obtidos no presente

experimento no intervalo de energia de 300-800 keV. Com círculos abertos são representados os dados obtidos usando-se os poderes de freamento de He em Si de Niemann et al. (1993) como descrito na seção 4.5.2. Por outro lado, os círculos cheios foram obtidos usando-se os poderes de freamento das partículas α de Ziegler et al. (1985). Os erros típicos no primeiro caso são da ordem de 7%, enquanto que, no segundo, os erros são um pouco mais altos (9%) devido as incertezas maiores na perda de energia dos íons de He. Além disso, na mesma figura, mostramos (com um linha cheia) os dados de perda de energia de ^{10}B em Si obtidos da subrotina RSTOP (Ziegler et al., 1985).

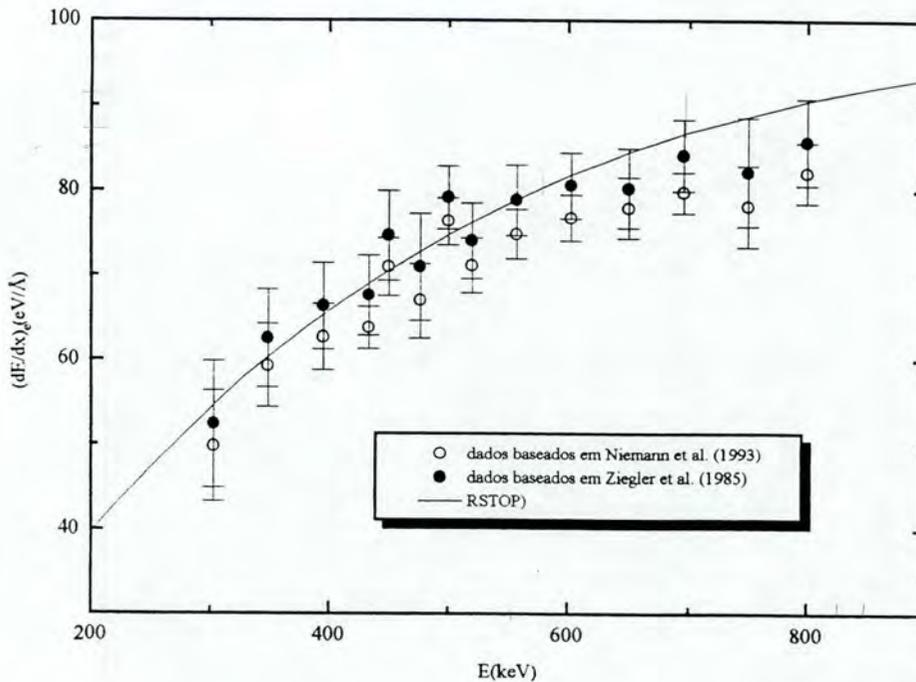


Fig. 4.20: Poder de freamento eletrônico aleatório de ^{10}B em Si. A linha cheia corresponde aos valores extraídos de Ziegler et al. (1985). Os círculos abertos apresentam os resultados obtidos usando os poderes de freamento de Niemann et al. (1993) - v. o texto. Os círculos cheios são os presentes valores experimentais obtidos usando-se os poderes de freamento de Ziegler et al. (1985) - v. o texto.

No que diz respeito aos resultados de perda de energia canalizada de ^{10}B em Si, deve ser destacado que usamos como base as perdas de energia aleatórias de ^{10}B extraídas da subrotina

RSTOP. Esse procedimento deve-se ao fato de que os presentes medições de poder de freamento eletrônico aleatório correspondem ao intervalo de energia de 300-800 keV, o qual é extremamente estreito, quando comparado àquele que é necessário no cálculo da perda de energia canalizada. Considerando esse fato, é possível que, para energias mais altas do que 650 keV, os poderes de freamento canalizados sejam sistematicamente 5% mais baixos do que aqueles dados presentemente.

Capítulo 5

DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

Embora a técnica de retroespalhamento tenha sido empregada anteriormente na medida do poder de freamento em direções alinhadas de monocristais (Götz et al., 1975; Cembali e Zignani, 1977), ela não foi utilizada de uma forma sistemática. Por outro lado, é a primeira vez que se utiliza uma estrutura SIMOX para um estudo deste tipo. Em conexão com a técnica de retroespalhamento, o uso de um alvo do tipo SIMOX apresenta, em relação ao tipo de marcador utilizado por Götz et al. (1975), a vantagem da disponibilidade de alvos praticamente tão finos quanto se queira e, em relação ao tipo de estrutura empregada por Cembali e Zignani (1977), a vantagem de se ter como marcador uma camada enterrada muito bem definida. Além disso, em decorrência das exigências da tecnologia de microeletrônica, a camada superficial de Si do SIMOX exibe qualidades cristalinas (tais como concentrações de discordâncias tão baixas quanto 10^5 cm^{-2}) que são superiores às encontradas em matrizes de silício disponíveis no mercado (v. cap. 4).

Os experimentos iniciais de medição da perda de energia de He na direção $\langle 110 \rangle$ do Si permitiram determinar a confiabilidade do método de medição utilizado no presente trabalho. Os resultados obtidos são coerentes com as medições de Eisen et al. (1972), indicando que a técnica utilizada e o método de análise de dados fornecem resultados perfeitamente compatíveis com os obtidos através da técnica de transmissão. Além do mais, é de se destacar que a presente técnica é muito mais simples do ponto de vista experimental, podendo ser realizada praticamente em qualquer laboratório de análise por feixe de íons.

Nós dividiremos as discussões e conclusões em duas partes: aquela correspondente às medições de He em Si e a outra referente a B em Si.

5.1 *Medições da Perda de Energia Canalizada de He em Si*

A razão α entre os poderes de freamento canalizado e aleatório em função da energia do íon é mostrada na fig. 5.1. α assume o valor 0,80 a 200 keV, passa por um valor máximo de 0,97

a 500 keV e decresce até 0,53 a 4 MeV. Na mesma figura, mostramos também os resultados experimentais previamente reportados: o de Jin e Gibson (1986) a 2 MeV - obtido através da técnica de transmissão - e o de Wilson (1987) a 200 keV - deduzido de medida de alcance (v. cap. B). Como pode ser observado, o valor de α extraído de Jin e Gibson (1986) concorda muito bem com os presentes dados. Por outro lado, encontramos uma diferença significativa com o dado de Wilson (1987). Essa diferença pode ser atribuída ao método indireto de medição utilizado no trabalho de Wilson (1987).

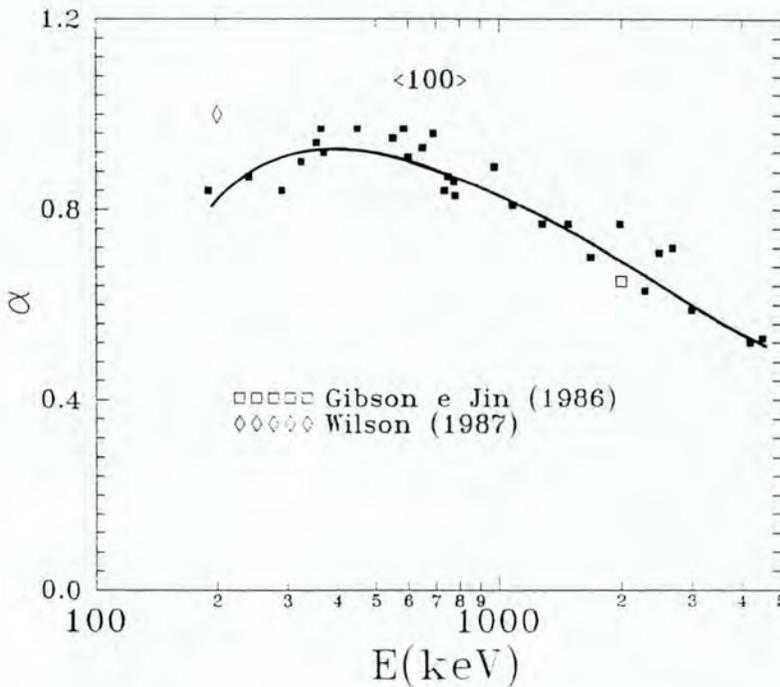


Fig. 5.1: Razão α entre os poderes de freamento canalizado (medido) e o aleatório (Niemann et al., 1993) em função da energia do íon. A linha sólida é somente para guiar os olhos. Os símbolos vazados correspondem aos dados tomados de Jin e Gibson (1986) e de Wilson (1987).

O decréscimo da razão α para energias acima de 500 keV é devido ao aumento da contribuição da camada L do silício para o poder de freamento aleatório. No intervalo de energia estudado, a contribuição dos elétrons internos do Si para a perda de energia dos íons de He em uma trajetória hipercanalizada é praticamente suprimida. Esse fato pode ser entendido em termos do critério de adiabaticidade (Bethe e Jackiw, 1968: p. 321). Segundo esse critério, a probabilidade de um elétron sofrer uma transição, como resultado da interação com o projétil, tende a zero muito rapidamente para parâmetros de impacto que excedem o valor crítico b_c . Esse parâmetro de

impacto limite é dado pela relação $b_c \equiv v/\omega$, onde $\hbar\omega$ é a variação da energia do elétron implicada na transição, e v , a velocidade do íon incidente. Conseqüentemente, a camada L do Si ($I_{2p} = 108.1$ eV) praticamente não pode ser excitada por um íon de He bem canalizado ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ (semi-diagonal do canal = $1,36 \text{ \AA}$), se esse íon tiver energia menor do que cerca de 9 MeV. Portanto, no intervalo de energia estudado, os elétrons de valência do Si são os responsáveis pela perda de energia ao longo do canal axial $\langle 100 \rangle$.

Levando isso em conta e supondo que os elétrons de valência podem ser tratados como um gás homogêneo de elétrons, calculamos a perda de energia para íons incidentes de He^{2+} . Obtemos uma estimativa do poder de freamento eletrônico ao longo de uma direção alinhada, descontando a contribuição dos elétrons das camadas internas para o poder de freamento aleatório. Foi usada a Aproximação de Born de Onda Plana (Bates e Griffing, 1953) para calcular a perda de energia devida aos elétrons das camadas internas do Si. Nesse cálculo, foram usadas funções de onda hidrogenóides com uma carga efetiva de 6 para os elétrons da camada L do Si. O poder de freamento eletrônico aleatório utilizado foi o de Niemann et al. (1993). Procedendo assim, obtemos os valores da razão α que são mostrados na figura 5.2.

Na região de baixas energias, os resultados experimentais e teóricos comportam-se de maneiras diferentes. Enquanto que os dados experimentais crescem com a energia do íon, os valores calculados são uma função (monótona) decrescente da energia do projétil em todo o intervalo de energia investigado. Para energias maiores do que 2000 keV, a diferença entre os valores experimentais e teóricos decresce com a energia. A concordância entre os resultados teóricos e experimentais é razoável para valores de energia $E > 2000$ keV. As discrepâncias são da ordem de 10%. Para energias mais baixas, a aplicabilidade de um tratamento de primeira ordem no cálculo da contribuição dos elétrons internos para o poder de freamento torna-se questionável e, em vez disso, um procedimento não-perturbativo deveria ser adotado. Também a dependência com o parâmetro de impacto da perda de energia para os elétrons de valência bem como a distribuição do estado de carga do projétil tornam-se importantes para essas energias (dos Santos et al., 1997 e artigo 4 do apêndice D). Além do mais, o efeito de focalização do feixe de íons canalizados ("flux-peaking") diminui para baixas energias, aumentando, assim, a contribuição dos elétrons internos.

Adicionalmente, a perda de energia de íons He^{2+} canalizados ao longo do eixo $\langle 100 \rangle$ do Si em função do ângulo de incidência foi medida por nós. Cálculos baseados no método de canais acoplados foram desenvolvidos por Grande e Schiwietz (dos Santos et al., 1997 e artigo 4 do apêndice D) em correspondência com os dados experimentais. Os resultados mostram que a razão

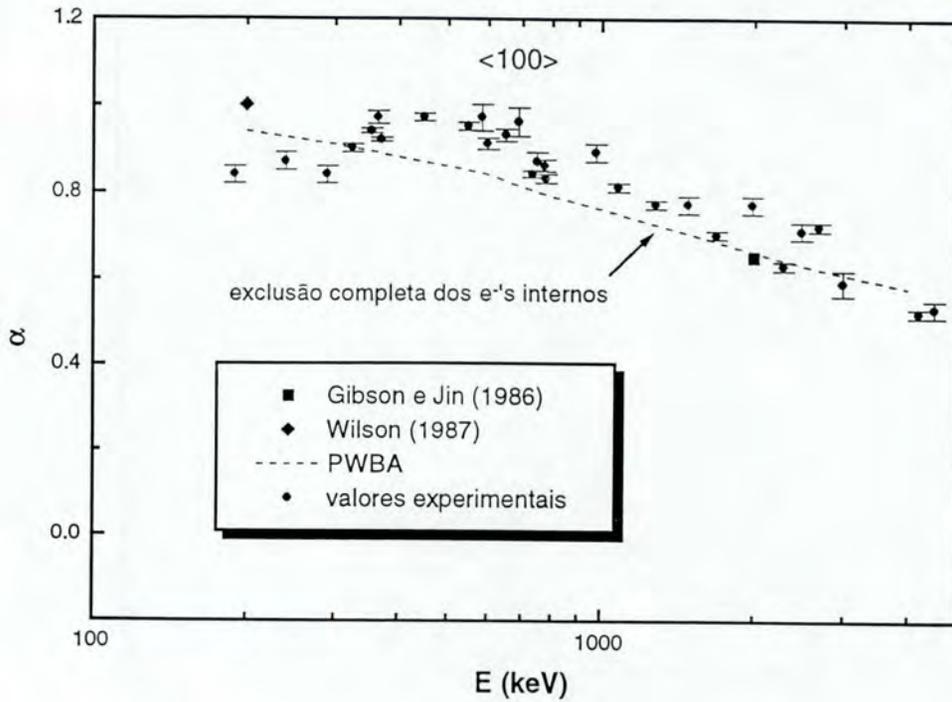


Fig. 5.2: Razão α entre os poderes de freamento canalizado e o aleatório (Niemann et al., 1993) de íons de He em função da energia do íon. A linha tracejada corresponde a uma estimativa de α baseada em PWBA. O triângulo para baixo e o quadrado correspondem aos dados tomados de Wilson (1987) e de Jin e Gibson (1987).

α apresenta uma semi-largura de cerca de $0,4^\circ$, a qual é muito menor do que a da curva de χ_{\min} em função do ângulo de incidência (v. cap. 3), a qual é de $\approx 0,7^\circ$. Esse resultado é uma consequência direta das dependências diferentes das transferências de energia eletrônica e nuclear.

Nas figuras 5.3- 5.5, apresentamos os resultados dos cálculos de canais acoplados para a dependência com o parâmetro de impacto da perda de energia média de íons de He simples e duplamente ionizados colidindo com átomos de Si. As curvas teóricas nas figs. 5.3 e 5.4 são identificadas

com o correspondente estado inicial ocupado. A diferença entre as curvas da perda de energia para o estado $2p$ está relacionada com a orientação espacial dos orbitais $2p_x$, $2p_y$ e $2p_z$. A contribuição dos elétrons da camada K do silício é desprezível e, portanto, não é mostrada nas figs. 5.3 e 5.4. A soma dessas curvas multiplicada pelo número de elétrons em cada subcamada é representada por uma linha sólida e corresponde a contribuição das camadas internas para a perda de energia. Essas contribuições também são mostradas na fig. 5.5 (linhas sólidas e tracejadas para He^{2+} e He^+ , respectivamente.) com a perda de energia correspondente à excitação e ionização do projétil He^+ (linha tracejada). Finalmente, a média da perda de energia (linha sólida grossa) calculada com base na distribuição de estados de carga (eq. 4.27) é mostrada em função do parâmetro de impacto. Usando essa curva na eq. 4.23, obtemos a perda de energia média por unidade de distância atravessada em função da posição transversal $\vec{\rho}$ dentro do canal.

Em relação às condições experimentais, alguns comentários podem ser feitos. Não foi realizada nenhuma limpeza das amostras em vácuo, de forma que a deposição de hidrocarbonetos e a formação de uma camada de óxido nativo pode influenciar a distribuição do fluxo de íons e, portanto, as medições da perda de energia. Em uma série de experimentos auxiliares, a quantidade de carbono depositada sobre a superfície do Si foi estimada. O efeito de uma quantidade máxima de cerca de 20 Å de carbono e 20 Å de SiO_2 amorfo sobre a superfície de $\text{Si} < 100 >$ foi considerado nos cálculos. Uma camada de material amorfo sobre um cristal leva a uma dispersão angular do feixe de partículas incidentes. Essa dispersão angular foi calculada com a simulação Monte Carlo TRIM95 (Ziegler et al., 1985). O perfil simulado de ângulos θ com relação ao eixo cristalino e a divergência do feixe foram usados para calcular a distribuição do fluxo dos íons. Como consequência da dispersão angular do feixe de íons, a razão α aumenta em menos de 2%, para uma incidência normal. Outras correções para a distribuição do fluxo dos íons, tais como espalhamento inelástico múltiplo e vibrações térmicas dos átomos, foram também levados em conta de acordo com Morgan (1973). Entretanto, essas correções são desprezíveis (menos do que 1 %). O efeito da temperatura também não é significativo para as medições de perda de energia, uma vez que as vibrações térmicas somente induzem pequenas variações na distribuição de parâmetros de impacto. A perda de energia eletrônica média não é sensível a tais variações.

A razão α de perda de energia foi, então, calculada levando em conta correções experimentais (deposição de hidrocarbonetos e formação de uma camada de óxido nativo) e teóricas [correções no modelo de partícula independente e exclusão de processos de captura múltipla (para maiores detalhes, cf. o artigo n.º 4 do apêndice D)]. Na região em torno do máximo do poder de freamento

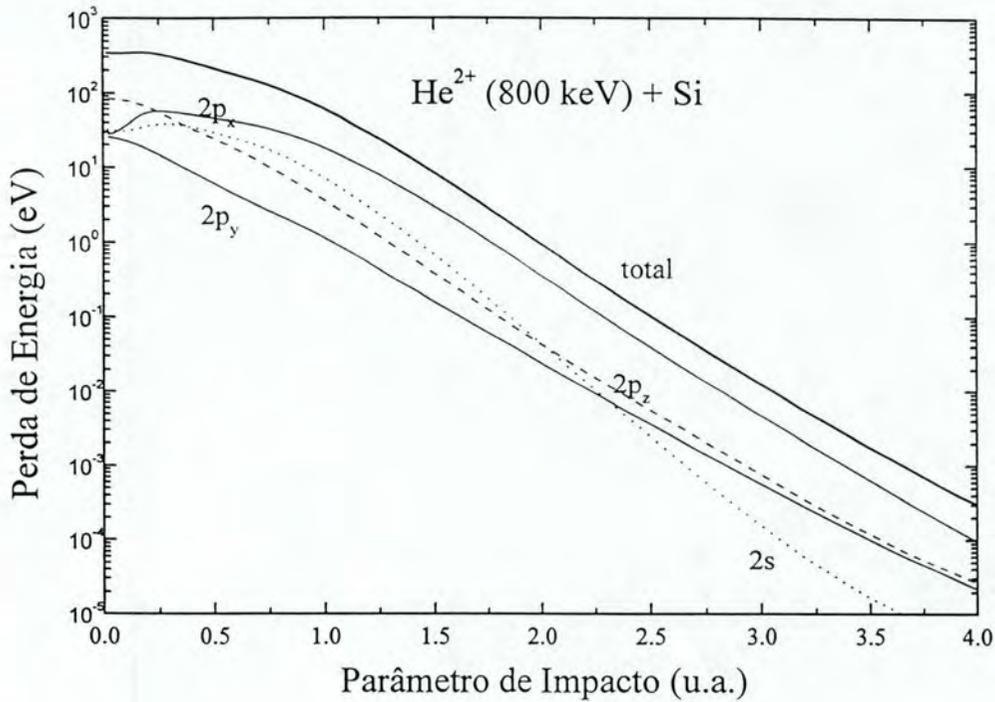


Fig. 5.3: Dependência com o parâmetro de impacto da perda de energia eletrônica para He^{2+} colidindo com átomos de Si calculada com o método dos canais acoplados. Os rótulos indicam a camada interna do Si à qual o elétron ativo está inicialmente ligado.

(a 800 keV), a dependência angular do poder de freamento origina-se basicamente da perda de elétrons da partícula incidente e captura de elétrons das camadas internas do Si pelo projétil. A razão α é bem reproduzida por cálculos de canais acoplados excluindo-se processos multi-eletrônicos envolvendo elétrons das camadas internas do Si.

5.2 Medidas da Perda de Energia de B em Si

5.2.1 Poder de Freamento sob Canalização

É de se destacar que existem poucos dados experimentais de perda de energia de B canalizado na direção $\langle 100 \rangle$ do Si. Esses dados ou são restritos a um intervalo de energia muito estreito

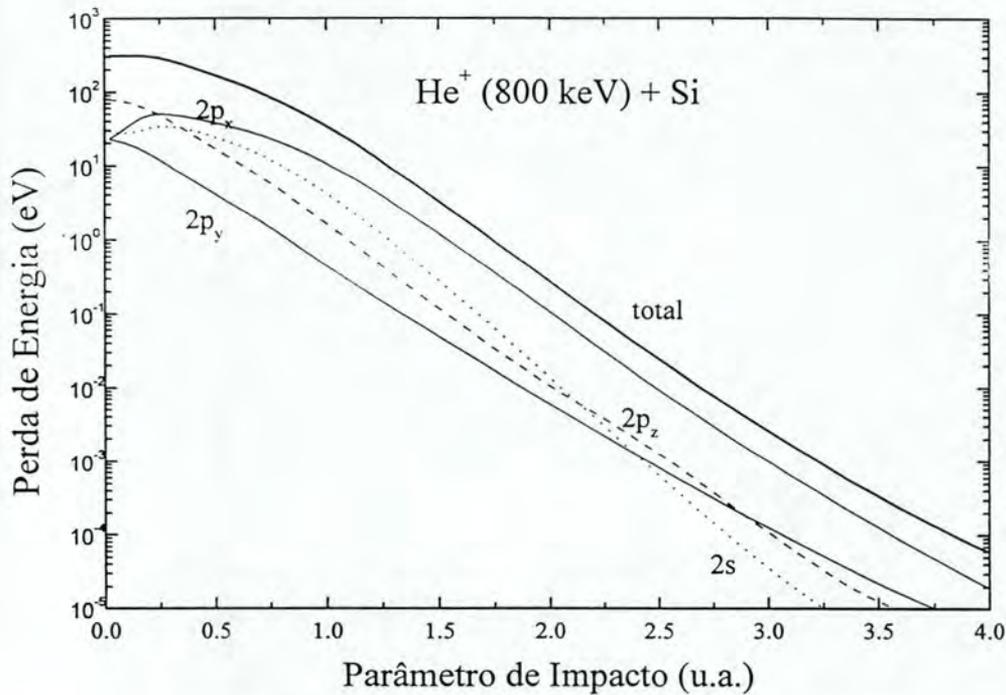


Fig. 5.4: O mesmo que a fig. 5.3, mas para He^+ .

(Eisen, 1968) ou são resultados de medições indiretas (Raineri et al., 1991; Bogen et al., 1993 e La Ferla et al., 1994).

Na figura 5.6 mostramos os resultados de perda de energia de B canalizado em Si obtidos no presente experimento. Na mesma figura, por comparação, representamos os resultados experimentais anteriores obtidos por Eisen (1968), La Ferla et al. (1992) e Bogen et al. (1993). No primeiro trabalho, a técnica de transmissão é empregada, enquanto que, nos dois últimos, os resultados são extraídos de valores de alcance de íons de B implantados. O valor medido por Eisen (1968) a 12,8 keV/uma e o ponto à energia mais baixa de La Ferla et al. (1992) estão fora do presente intervalo de energia estudado. Por outro lado, o ponto à mais alta energia de La Ferla et al. (1992) está em bom acordo com os presentes dados. Finalmente, deveria ser enfatizado que os dados de Bogen et al. (1993) são sistematicamente mais altos do que os dados presentes e anteriores. A razão para esse fato é desconhecida. Entretanto, deve-se chamar a atenção para o procedimento indireto

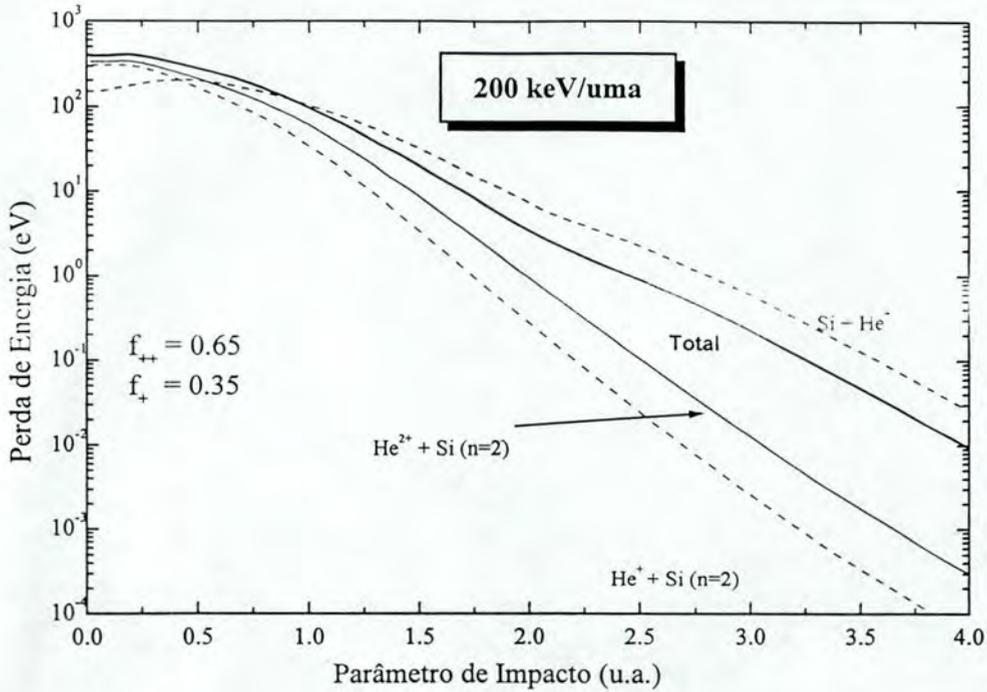


Fig. 5.5: Resultados para a dependência com o parâmetro de impacto da perda de energia de íons de He colidindo com átomos de Si. A ionização e a excitação do projétil, no caso da fração de estado de carga +1 é levada em conta o sistema de colisão Si+ He⁺.

utilizado por esses autores (cf. apêndice B)- medições de alcances -, o qual poderia ser responsável pelas discrepâncias observadas.

A razão α entre os poderes de freamento canalizado e aleatório em função da energia do íon é mostrada na fig. 5.7 (círculos cheios). Pode-se observar que a razão α é uma função que depende fracamente da energia do íon. O seu valor varia entre 0,6 a 500 keV e 0,82 a 5 MeV, decrescendo a 0,72 em 9 MeV. O poder de freamento aleatório de ¹⁰B extraído de Ziegler et al. (1985), o qual é utilizado na determinação a perda de energia canalizada específica, é também mostrado na mesma figura (linha cheia).

Cálculos baseados em PWBA foram também realizados para íons de B incidindo sobre Si. Nesse caso, uma vez que o íon incidente carrega elétrons (carga de equilíbrio ≈ 2), usamos o

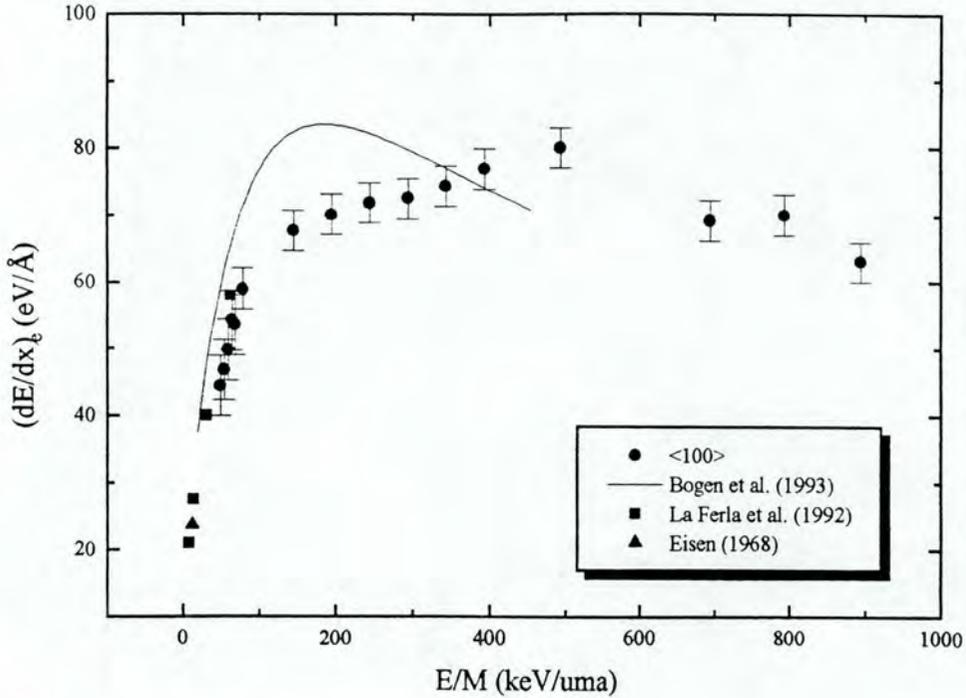


Fig. 5.6: Valores de poder de freamento canalizado em função da energia do íon $^{10}\text{B}^{2+}$ para a direção $\langle 100 \rangle$ do Si. Círculos cheios correspondem aos presentes resultados. A linha cheia representa os dados de Bogen et al. (1993). Quadrados correspondem aos dados de La Ferla et al. (1992). O triângulo é o dado de Eisen (1968).

potencial blindado: $\frac{Z_1 - n_1}{r} + \frac{n_1}{r} \phi(r)$, onde n_1 é o número de elétrons carregados pelo íon incidente e ϕ , a função de blindagem de Moliere (v. cap. 1). Os resultados desses cálculos indicam que o máximo largo na perda de energia em torno de 500 keV/uma (fig. 5.6) origina-se do máximo na contribuição da camada L para o poder de freamento.

Por outro lado, baseados no modelo de gás de elétrons livres (v. cap. 1), calculamos a contribuição para o poder de freamento eletrônico dos elétrons de valência espalhados pelo potencial efetivo do íon incidente. Em princípio, esse procedimento somente é válido para um gás de elétrons degenerado. Entretanto, para íons de ^{10}B de centenas de keV de energia, a máxima energia transferida pelo projétil para os elétrons do alvo é suficientemente alta (em comparação com a largura de 1 eV do "gap" do Si), para que o efeito do "gap" de banda possa ser desconsiderado. O po-

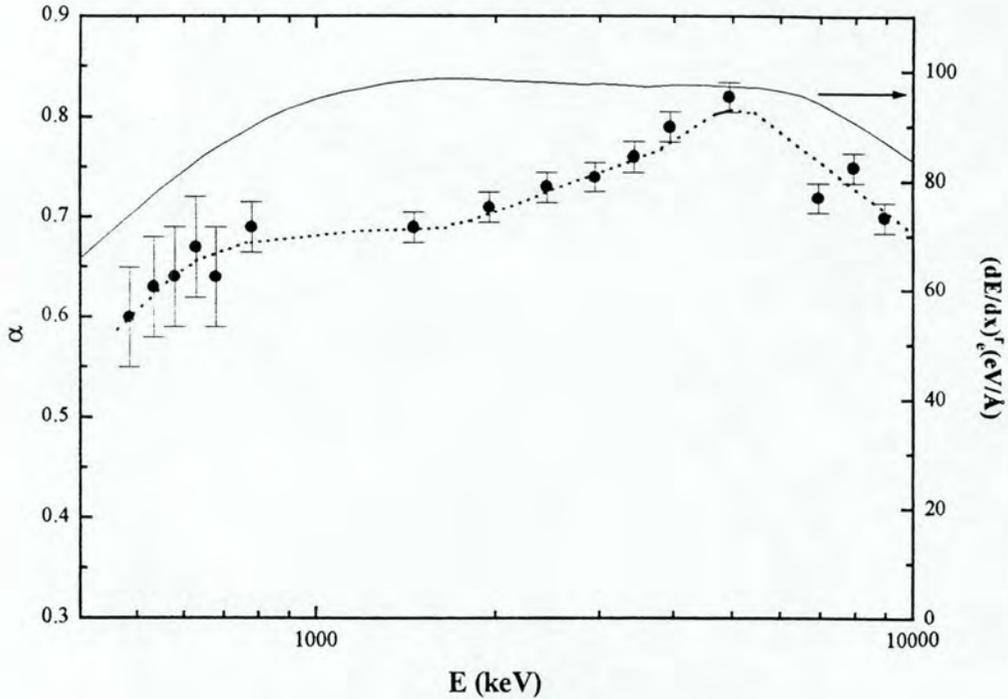


Fig. 5.7: Razão α entre os poderes de freamento canalizado (medido) e o aleatório em função da energia do íon para ^{10}B ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ do Si (círculo cheio). A linha cheia representa os poderes de freamento aleatório de ^{10}B em Si (Ziegler et al., 1985). A linha tracejada é somente para guiar os olhos.

tencial atômico responsável pelo espalhamento dos elétrons do alvo foi calculado de acordo com o Método Hartree-Fock-Slater (Herman e Skilmann, 1963). A parte coulombiana de longo alcance do potencial foi exponencialmente blindada pelos elétrons de valência do alvo, de acordo com a blindagem de Debye (Kittel, 1986: cap. 10, p.281):

$$V_p(r) = \frac{Z_1}{r} e^{-\lambda r}, \quad (5.1)$$

onde $\lambda = 2 \left(\frac{3n}{\pi V_{WS}} \right)$, sendo n o número de elétrons por célula unitária e V_{WS} , o volume da célula unitária de Wigner-Seitz.

Os cálculos da seção de choque de transporte e da perda de energia eletrônica realizados através do método dos deslocamentos de fase (v. cap. 1) foram executados para um estado de carga +2,

o qual, de acordo com Betz (1972), deveria ser o estado de carga de equilíbrio para o presente intervalo de energia. Adicionalmente, repetimos os cálculos para B em estado de carga neutro, o qual é o estado de carga de equilíbrio para $v \rightarrow 0$.

Os resultados dos cálculos são apresentados na fig. 5.8 em função da razão de velocidade do íon v/v_0 (sendo v_0 a velocidade de Bohr). Além disso, os presentes resultados experimentais (até 800 keV) e os resultados previamente publicados (Eisen, 1968; La Ferla et al., 1994) são mostrados. Uma inspeção dessa figura mostra algumas características interessantes. Primeiro: até $v/v_0 \approx 0,8$, os cálculos reproduzem bastante bem os dados experimentais. Segundo: para velocidades maiores, surgem dois comportamentos diferentes: os valores calculados mostram um máximo muito largo em torno de $v/v_0 = 1,6$ enquanto os dados experimentais aumentam com a velocidade. Terceiro: não existe diferença significativa entre os cálculos realizados com carga +2 e neutra em todo o intervalo de energia estudado. Quarto: os pontos experimentais podem ser ajustados com uma lei de potência - linha tracejada-pontilhada - a qual dá o seguinte resultado: $dE/dx = (35 \pm 1)(v/v_0)^{0,90 \pm 0,06} \text{ eV/\AA}$.

Esses resultados mostram claramente que o mecanismo básico de perda de energia para baixas velocidades ($v/v_0 \leq 0,8$) é devido ao espalhamento dos elétrons de valência do alvo pelo potencial efetivo do íon incidente. Para energias mais altas ($v/v_0 > 0,8$), a diferença entre os resultados experimentais e teóricos é atribuída a outras contribuições para a perda de energia, tais como excitação e/ou ionização do átomo de Si através da interação com os elétrons das camadas internas bem como a perda e/ou captura de elétrons pelos íons de B. Além disso, deve-se observar que, para $v/v_0 = 1,5$, o espalhamento dos elétrons de valência pelo projétil é responsável por 80% da perda de energia total.

Finalmente, deve-se destacar que o conjunto total dos dados experimentais (nossos e prévios) seguem uma relação quase linear com a velocidade do íon. Para energias do projétil mais baixas, a dependência linear com a velocidade do íon é prevista por teorias vigentes (Firsov, 1959; Lindhard et al., 1954, 1961 e 1963; Grande e Schiwietz, 1992 e 1994; Echenique et al., 1981 e 1986 e Sigmund, 1991).

5.2.2 Poder de Freamento em Direção Aleatória

Como foi dito anteriormente, estas são as primeiras medições de poder de freamento em direção aleatória de B em Si. Os únicos dados disponíveis na literatura são os da subrotina RSTOP do programa TRIM, os quais provêm - como dito anteriormente - de um procedimento de escalonamento

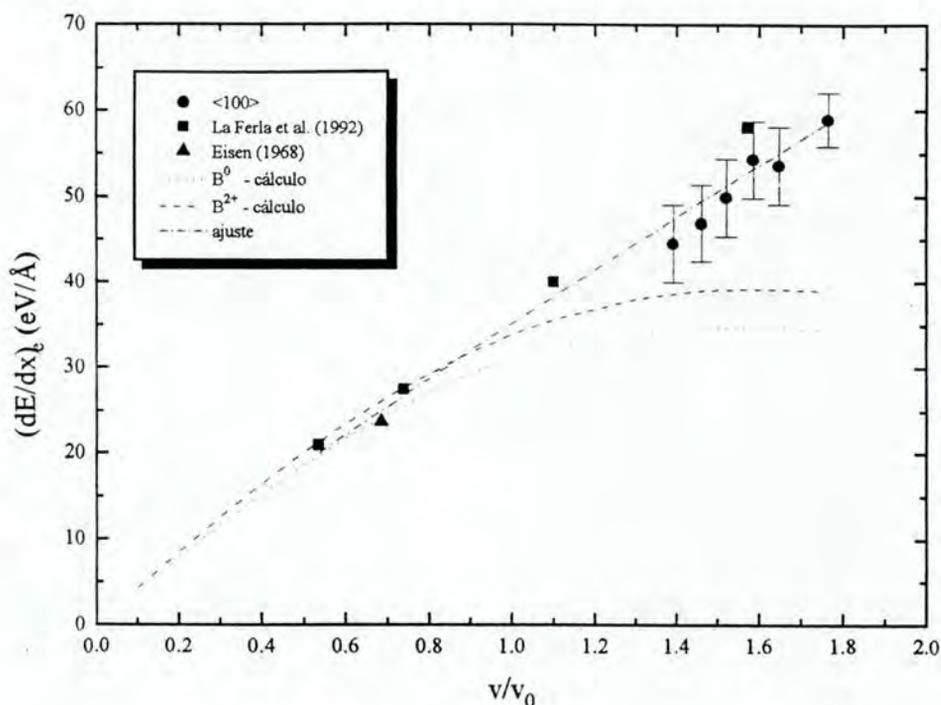


Fig. 5.8: Valores calculados do poder de freamento eletrônico (até 800 keV) em função da velocidade do íon $^{10}\text{B}^{2+}$. Adicionalmente, são mostrados os resultados experimentais nossos e os previamente publicados (Eisen, 1968; La Ferla et al., 1994) para a direção $\langle 100 \rangle$ do Si. Todos os pontos experimentais foram ajustados com uma função do tipo lei de potência - linha tracejada-pontilhada - $dE/dx = (35 \pm 1)(v/v_0)^{0,90 \pm 0,06}$ eV/Å.

numérico e não de resultados experimentais.

Na fig. 4.20 foram mostrados os poderes de freamento aleatórios de ^{10}B obtidos no presente experimento no intervalo de energia de 300-800 keV junto com os valores da subrotina RSTOP. Uma inspeção da figura 4.20 mostra algumas características interessantes. Em primeiro lugar, os resultados deduzidos a partir do poder de freamento de He dado por Ziegler et al. (1985) são sistematicamente mais altos (cerca de 5%) do que aqueles deduzidos dos dados de Niemann et al. (1993). Isso é uma consequência do fato de que os valores de perda de energia de He de Niemann et al. (1993) são cerca de 7,5 % mais baixos do que aqueles de Ziegler et al. (1985). Em segundo lugar, deve notar-se o muito bom acordo entre os valores de perda de energia extraídos da subrotina RSTOP (linha cheia) e os presentes resultados experimentais [deduzidos do poder de freamento de He de Ziegler et al. (1985)]. Somente a energias mais altas do que 650 keV, diferenças

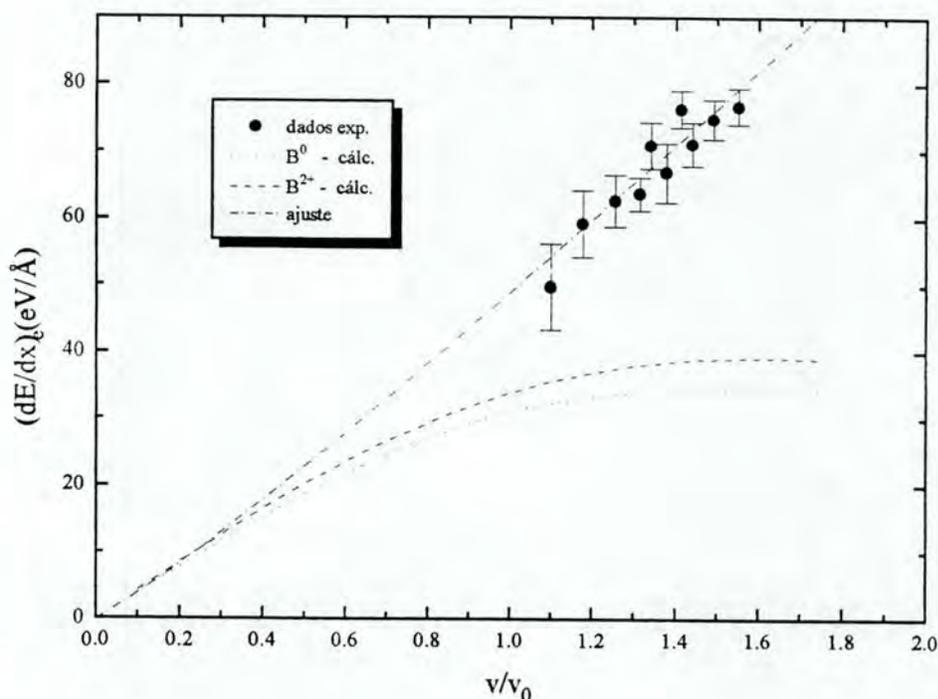


Fig. 5.9: Poderes de freamento eletrônico aleatórios de ^{10}B em Si a baixas energias em função da velocidade do íon junto com os poderes de freamento eletrônico calculados. A linha tracejada-pontilhada corresponde a um ajuste com uma função do tipo lei de potência, o qual resulta em $dE/dx = (49 \pm 3)(v/v_0)^{1.1 \pm 0.2} \text{ eV/\AA}$.

pequenas, mas sistemáticas, em torno de 5%, são observadas. Esse fato pode também ser deduzido de medições de alcance de íons de ^{10}B em silício amorfo. No trabalho de Behar et al. (1995), os alcances projetados de B em Si foram investigados no intervalo de energia de 9,5-2000 keV. Para energias mais baixas do que 500 keV, a concordância entre os alcances projetados experimentais e as previsões do programa TRIM foi melhor do que 2 %. Entretanto, para energias mais altas do que 700 keV, o alcance experimental revelou-se maior do que o previsto, sendo a diferença da ordem de 6-10%. Deve ser ressaltado que esse tipo de comportamento também foi observado no trabalho de alcances de B em Si de Oosterhoff (1988). Isso significa que os poderes de freamento eletrônicos da subrotina RSTOP são maiores do que aqueles que resultam de medições de alcance. Essas observações estão em perfeita consonância com os presentes resultados.

Na figura 5.9, mostramos os valores calculados do poder de freamento eletrônico de B em Si (já apresentados na fig. 5.8) junto com nossos dados experimentais de perda de energia aleatória

na região de baixa energia (300-650 keV) em função da velocidade do íon. A diferença entre os valores experimentais e teóricos é muito maior no presente caso do que aquela observada no caso de íons canalizados. Em particular, para $v/v_0 = 1,5$, o valor experimental do poder de freamento em direção aleatória é o dobro do calculado, enquanto que, no caso canalizado, era somente cerca de 1,25. Isso significa que, no caso aleatório, a contribuição de processos de excitação e/ou ionização através da transferência de energia para elétrons das camadas internas do átomo de Si é muito maior do que no caso de uma trajetória canalizada. Esse resultado seria obviamente de se esperar.

Finalmente, gostaríamos de destacar que um ajuste de mínimos quadrados dos dados apresentados na fig. 5.9 fornece o resultado $dE/dx = (49 \pm 3)(v/v_0)^{1.1 \pm 0.2}$ eV/Å. Para energias do projétil mais baixas, essa dependência com a velocidade do íon incidente é prevista por teorias vigentes de perda de energia eletrônica (Firsov, 1959; Lindhard et al., 1954, 1961 e 1963; Grande e Schiwietz, 1992; Schiwietz e Grande, 1994a; Echenique et al., 1981 e 1986 e Sigmund, 1991).

5.3 Conclusões

No presente, existe um grande volume de dados referentes à perda de energia em direções aleatórias para diferentes combinações íon-alvo e para um grande intervalo de energia. No entanto, existem bem menos dados experimentais sobre a perda de energia ao longo de trajetórias canalizadas. A nível teórico, também existem poucos estudos, já que uma completa descrição da perda de energia sob condição de canalização exige o conhecimento preciso de fatores tais como a distribuição de carga eletrônica do alvo, os estados de carga do projétil e a distribuição de trajetórias desse ao longo de um canal e, principalmente, a dependência da perda de energia com o parâmetro de impacto.

Nas últimas três décadas, muitos resultados sobre a perda de energia de prótons canalizados em Si têm sido publicados na literatura. Paradoxalmente, a despeito do largo uso de íons de He na análise de materiais, há uma escassez surpreendente de dados voltados para a o freamento desses íons sob condição de canalização; em particular, em materiais de interesse tecnológico tais como Si, Ge, GaAs, etc. No caso do B, a carência de dados relacionados à perda de energia desses íons ao longo das principais direções cristalográficas do Si é ainda maior.

Neste trabalho, realizamos um estudo experimental-teórico da perda de energia de íons de He e B ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ do Si. Para esse fim, usamos a técnica padrão de RBS combinada com alvos do tipo SIMOX. No método experimental empregado, a execução das medições é mais

simples do que na técnica de transmissão, pois a técnica de RBS/canalização simultaneamente fornece informação sobre a decanalização que ocorre, quando o feixe de íons atravessa o alvo, o que facilita enormemente o procedimento de alinhamento do cristal. No presente método, tampouco é necessária a determinação precisa da espessura do cristal. Existem medições anteriores da perda de energia canalizada através da técnica de RBS, porém essas medições foram esporádicas. Esta é a primeira vez que a geometria de retroespalhamento é utilizada sistematicamente para estudar diferentes efeitos relacionados com a perda de energia ao longo de canais de um cristal e em um intervalo de energia tão grande: 200 keV a 9 MeV.

As medições da perda de energia foram realizadas incidindo o feixe de íons sobre a amostra SIMOX segundo direções aleatórias e alinhadas. A diferença entre as energias das partículas retroespalhadas na interface Si/SiO₂ em uma incidência alinhada e em uma incidência aleatória fornece-nos a informação necessária para determinar o poder de freamento canalizado.

As energias correspondentes à interface Si/SiO₂ foram determinadas ajustando-se os espectros canalizado e aleatório com uma função que, além da função erro [que leva em conta a dispersão em energia das partículas incidentes ("straggling") e a resolução do sistema de detecção], contém a dependência com a energia da seção de choque diferencial de Rutherford. Para o estudo da dependência angular da perda de energia, foi desenvolvido um algoritmo especial para "extrair" somente a contribuição da componente canalizada do feixe para o espectro de RBS. Esse desenvolvimento foi necessário, porque, quando o ângulo de incidência do feixe de íons aumenta, o espectro de RBS de "canalização" é crescentemente distorcido, como resultado do aumento da fração não-canalizada do feixe.

O principais resultados do nosso estudo foram basicamente os seguintes.

5.3.1 Íons de He

A perda de energia canalizada de íons de He ao longo da direção $\langle 100 \rangle$ do Si foi medida para energias do projétil que vão de 200 keV a 4,5 MeV.

Como uma calibração do nosso método experimental, medimos também a perda de energia de íons de He ao longo da direção $\langle 110 \rangle$ com energias do projétil compreendidas entre 350 e 780 keV. Os resultados obtidos foram comparados com os previamente existentes de Eisen et al. (1972), mostrando que nossa técnica experimental e método de análise de dados fornecem valores confiáveis de perda de energia canalizada média.

Pela primeira vez, foi realizado um estudo sistemático do poder de freamento de He ao longo

da direção $\langle 100 \rangle$. Esse estudo produziu resultados da perda de energia ao longo dessa direção para o intervalo de energia que vai de 200 keV a 4,5 MeV. O poder de freamento canalizado tem um máximo largo em torno de 500 keV e decresce rapidamente, quando a energia aumenta, indo de 30 eV/Å em 550 keV até 8 eV/Å a 4,5 MeV. Uma estimativa teórica baseada em PWBA da razão α entre o poder de freamento canalizado e aleatório apresenta um razoável acordo com os dados experimentais a altas energias do projétil ($E > 2$ MeV).

Com a mesma técnica, para íons de He^+ incidentes ao longo do eixo $\langle 100 \rangle$ do Si, fomos capazes de identificar o poder de freamento eletrônico de pré-equilíbrio devido a processos de equalibração de carga. Nossos resultados sugerem alguns nm para distância de equalibração de carga.

Nós também medimos a perda de energia de íons de He de 800 keV canalizados ao longo do eixo $\langle 100 \rangle$ do Si em função do ângulo de incidência θ . Os resultados mostraram que a curva da perda de energia canalizada tem uma semi-largura de cerca de $0,4^\circ$, a qual é muito menor do que a semi-largura ($\approx 0,7^\circ$) da curva da probabilidade de retroespalhamento em função do ângulo de incidência (χ_{\min}). Esse fato é uma conseqüência direta das diferenças nas dependências com o parâmetro de impacto da perdas de energia eletrônica e nuclear, essa última sendo responsável pelo desvio angular do íon. Isso significa que, embora o íon permaneça canalizado, ele perde praticamente a mesma energia que em uma trajetória aleatória.

Cálculos baseados no método de canais acoplados foram realizados por Grande e Schiwietz (dos Santos et al., 1997 e ref. 4 do apêndice D). Nesses cálculos, foram consideradas a perda de energia dependente do parâmetro de impacto, a distribuição de estados de carga do feixe de íons de He e a distribuição de fluxo dos íons. Os resultados dos mesmos permitiram deduzir que, na região em torno do máximo do poder de freamento (a 800 keV), a dependência do poder de freamento com o ângulo de incidência do feixe é basicamente devida a perda de elétrons da partícula incidente e captura de elétrons das camadas internas do Si pelo projétil. A razão α é bem reproduzida por esses cálculos, quando se exclui processos multi-eletrônicos envolvendo elétrons das camadas internas do Si.

5.3.2 Íons de B

Pela primeira vez, foram realizadas medições diretas do poder de freamento eletrônico de ^{10}B ao longo do eixo $\langle 100 \rangle$ bem como para direções aleatórias. Os resultados desse estudo são de grande importância prática, especialmente no caso da perda de energia aleatória, uma vez que os

únicos dados disponíveis na literatura (através da subrotina RSTOP do programa TRIM) provém de um procedimento de escalonamento de dados de poder de freamento eletrônico de próton em Si.

A energia do íon incidente variou entre 500 keV e 9 MeV no caso de incidência alinhada e, entre 300 e 800 keV, para direções aleatórias. Para o regime de baixa energia, ambos os resultados são aproximadamente proporcionais a velocidade do projétil, resultado que concorda com as previsões de teorias correntes.

O poder de freamento canalizado aumenta de 42,4 eV/Å em cerca de 50 keV/uma até 79,7 eV/Å em torno de 500 keV/uma. Então ele decresce até 62 eV/Å em 900 keV/uma. A curva dos poderes de freamento exibe um máximo largo em torno de 5000 keV. Esse comportamento da perda de energia provavelmente origina-se do fato que, a essa energia, segundo cálculos de PWBA, um máximo também ocorre na contribuição dos elétrons da camada L do Si para o poder de freamento.

Cálculos baseados no modelo de gás de elétrons-livres indicam que o mecanismo de perda de energia mais importante para íons de ^{10}B lentos provém do espalhamento dos elétrons de valência do átomo de Si pelo íon incidente.

Além do mais, fornecemos dados experimentais da perda de energia aleatória de ^{10}B em Si. Os presentes resultados estão em bom acordo com aqueles dados pela subrotina RSTOP do programa TRIM. Somente a energias mais altas do que 650 keV, diferenças pequenas, mas sistemáticas, são observadas. Esse fato também pode ser visto em medições anteriores de alcance de ^{10}B em Si (Behar et al., 1995), onde foram observadas discrepâncias da ordem de 6-10% entre os resultados experimentais e os da subrotina RSTOP, para energias mais altas do que 700 keV. Todos esses resultados indicam que, para energias superiores a 650 keV, os poderes de freamento aleatórios de ^{10}B compilados na subrotina RSTOP estão superestimados em mais de 5% em relação aos valores obtidos a partir de observações experimentais.

Finalmente, esperamos que os presentes resultados venham a estimular novos estudos teóricos e experimentais envolvendo outros íons e outros canais do Si bem como outros cristais de interesse tecnológico e/ou acadêmico.

APÊNDICES

Apêndice A

POTENCIAL INTERATÔMICO

A energia potencial de interação entre dois átomos separados por uma distância R pode ser escrita como:

$$U(R) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} + E_{\text{el}}(R) - E_{\text{el}}(\infty), \quad (\text{A.1})$$

sendo $\frac{Z_1 Z_2 e^2}{R}$ a energia potencial de interação entre os dois núcleos, $E_{\text{el}}(R)$, a energia potencial dos elétrons no campo eletrostático dos dois núcleos fixos e separados por uma distância R e $E_{\text{el}}(\infty)$ ajusta o valor zero da energia potencial dos elétrons no ∞ .

O termo $E_{\text{el}}(R) - E_{\text{el}}(\infty)$ diminui a energia potencial eletrostática dos núcleos e, portanto, corresponde a um efeito de blindagem dos núcleos pelo sistema eletrônico.

O problema, então, é determinar a energia do estado fundamental $E_{\text{el}}(R)$ da quase-molécula formada pelos dois átomos separados pela distância R . Uma aproximação para o funcional energia de um sistema de muitos elétrons em um potencial externo $V(\vec{r})$ dado é a seguinte:

$$\begin{aligned} E_{\text{el}}[\rho] &= \int d^3r c_K [\rho(\vec{r})]^{5/3} \\ &+ \int d^3r \rho(\vec{r}) \left[V(\vec{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \right] \\ &- \int d^3r c_a [\rho(\vec{r})]^{4/3}, \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

com $c_K = 21,88 \text{ eV}/\text{Å}^2$ e $c_a = 10,635 \text{ eV}/\text{Å}$.

O primeiro termo representa a energia cinética; o segundo, a energia de interação entre a distribuição de carga eletrônica e o potencial externo $V(\vec{r})$; o terceiro, a interação entre as distribuições de carga eletrônica e o quarto termo, a energia de troca.

A equação A.2 é deduzida considerando-se um gás de elétrons degenerado à temperatura de zero grau absoluto. Se desprezarmos o termo de troca ($c_a = 0$), obtemos o modelo de Thomas Fermi (Gombás, 1956).

Além disso, no que segue, suporemos que a distribuição de carga eletrônica do sistema de "dois átomos" pode ser escrita como

$$\rho(\vec{r}) = \rho_{\text{átomo1}}(|\vec{r} - \vec{r}_1|) + \rho_{\text{átomo2}}(|\vec{r} - \vec{r}_2|). \quad (\text{A.3})$$

Essa aproximação desconsidera a deformação nas nuvens eletrônicas dos dois átomos que ocorre quando eles se aproximam.

Eqs. A.1, A.2 e A.3, quando combinadas, produzem a seguinte expressão para a energia potencial interatômica:

$$\begin{aligned} U(R) &= \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R} \\ &+ c_K \int d^3 r \left[(\rho_1 + \rho_2)^{5/3} - (\rho_1^{5/3} + \rho_2^{5/3}) \right] \\ &- c_a \int d^3 r \left[(\rho_1 + \rho_2)^{4/3} - (\rho_1^{4/3} + \rho_2^{4/3}) \right] \\ &- e \int d^3 r \left(\frac{Z_1 \rho_2}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} + \frac{Z_2 \rho_1}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} \right) \\ &+ \int d^3 r \int d^3 r' \frac{\rho_1 \rho_2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

onde os subscritos 1 e 2 em ρ referem-se às densidades eletrônicas do projétil e do alvo, respectivamente.

A equação acima negligencia efeitos quânticos e a polarização das distribuições de carga dos elétrons. Mesmo assim, ela fornece valores surpreendentemente acurados para a parte repulsiva do potencial interatômico, quando comparada a cálculos mais sofisticados.

A principal vantagem desse modelo é que U depende somente das densidades eletrônicas do átomo-alvo e do íon incidente, na situação de distância de separação infinita entre eles. A seguir, trataremos das diferentes propostas de como calcular as distribuições de carga eletrônica de *um* átomo.

A.1 Distribuições de Carga Atômicas

No que se refere ao alvo, mesmo considerando que o íon incidente interage com um único átomo de cada vez (colisões binárias), temos de levar em conta os efeitos dos demais átomos que compõem o sólido sobre a densidade eletrônica de um átomo. Em princípio, a distribuição de carga eletrônica de um átomo num sólido é diferente da distribuição de carga eletrônica de um átomo isolado.

Um exemplo de diferentes funções de distribuição de carga eletrônica para o átomo de Ni é mostrado na fig. A.1, estando a distribuição clássica de Thomas-Fermi representada através de uma curva tracejada, a distribuição de carga de átomo isolado de Hartree-Fock, por uma linha pontilhada e a distribuição Hartree-Fock de estado sólido, por uma linha cheia. Podemos ver que não existe diferenças significativas entre as distribuições Hartree-Fock (Herman e Skilman, 1963) de um átomo isolado e de estado sólido para pequenas distâncias do núcleo atômico. Como se pode ver também, a distribuição clássica de Thomas-Fermi não é capaz de descrever a estrutura de camadas eletrônicas de um átomo.

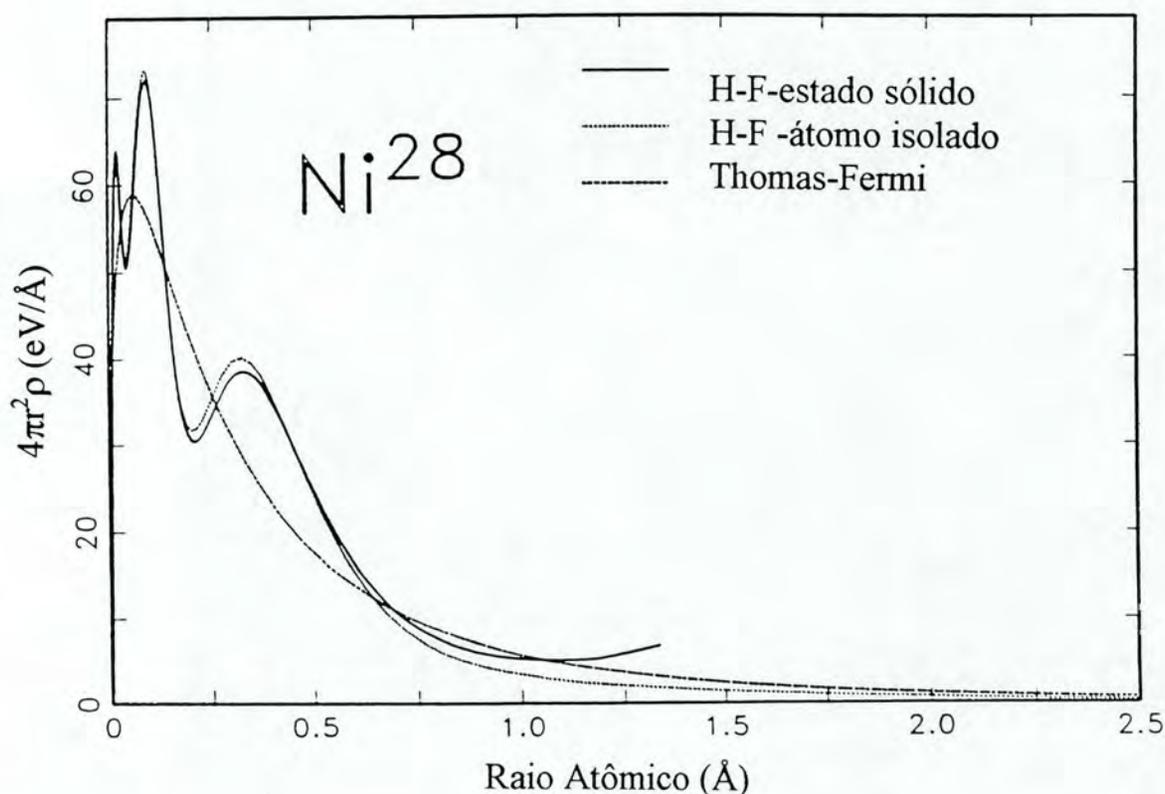


Fig. A.1: Distribuições de carga de Thomas-Fermi e Hartree-Fock de átomo isolado e de estado sólido para átomos de níquel (Ziegler et al., 1985: p. 29).

Uma vez conhecidas as densidades eletrônicas do projétil e do átomo, o potencial de interação entre eles pode ser calculado via a eq. A.4. Entretanto, uma abordagem bastante usual no passado consistiu em adaptar expressões matemáticas de potenciais (intra-)atômicos para descrever

a interação projétil-átomo.

Potenciais Intra-atômicos

Chamaremos, por brevidade, de potenciais clássicos aqueles que são dados pelos modelos de Bohr, Thomas-Fermi, Lenz-Jensen e Moliere em oposição a modelos tipo Hartree-Fock.

Definimos a função de blindagem como sendo o potencial atômico $V(r)$ dividido pelo potencial do núcleo não blindado pelos elétrons:

$$\phi(r) \equiv \frac{V(r)}{\frac{Ze}{r}}. \quad (\text{A.5})$$

Definimos também o raio reduzido:

$$x \equiv \frac{r}{a_{\text{TF}}}, \quad (\text{A.6})$$

onde a_{TF} é o comprimento de blindagem de Thomas-Fermi (Gombás, 1956):

$$a_{\text{TF}} = \frac{1}{4} \left(\frac{9\pi^2}{2} \right) \left(\frac{\hbar^2}{m_e^2} \right) \frac{1}{Z^{1/3}} = \frac{0,8853 a_0}{Z^{1/3}}, \quad (\text{A.7})$$

sendo $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$ o raio de Bohr.

Quando usamos essas coordenadas reduzidas (ϕ , x e a_{TF}), o potencial de Thomas-Fermi torna-se independente do número atômico, i.e., uma única função de blindagem destina-se a descrever todos os átomos. Dentro de certa aproximação, os outros potenciais clássicos também são universais nessas coordenadas. A seguir, apresentamos as funções de blindagem clássicas.

Thomas-Fermi

$$\phi_{\text{TF}}(x) = \left[1 + \left(\frac{x}{\alpha} \right)^\lambda \right]^{-3/\lambda} = \left[1 + \left(\frac{x^3}{144} \right)^{\lambda/3} \right]^{-3/\lambda}, \quad (\text{A.8})$$

onde $\lambda = 0,8034$ e $\alpha = 12^{2/3}$.

Bohr

$$\phi_{\text{Bohr}}(x) = \exp(-x) \quad (\text{A.9})$$

Moliere

$$\phi_{\text{Moliere}}(x) = 0,35 \exp(-0,3x) + 5,5 \exp(-1,2x) + 0,1 \exp(-6x) \quad (\text{A.10})$$

Lenz-Jensen

$$\begin{aligned}\phi_{LJ}(x) &= 0,7466 \exp(-1,038x) \\ &+ 0,2433 \exp(-0,3876x) \\ &+ 0,01018 \exp(-0,206x).\end{aligned}\tag{A.11}$$

Na fig. A.2 são mostrados os gráficos dos potenciais clássicos mais o potencial tipo Hartree-Fock de estado sólido para os átomos de níquel, boro e ouro.

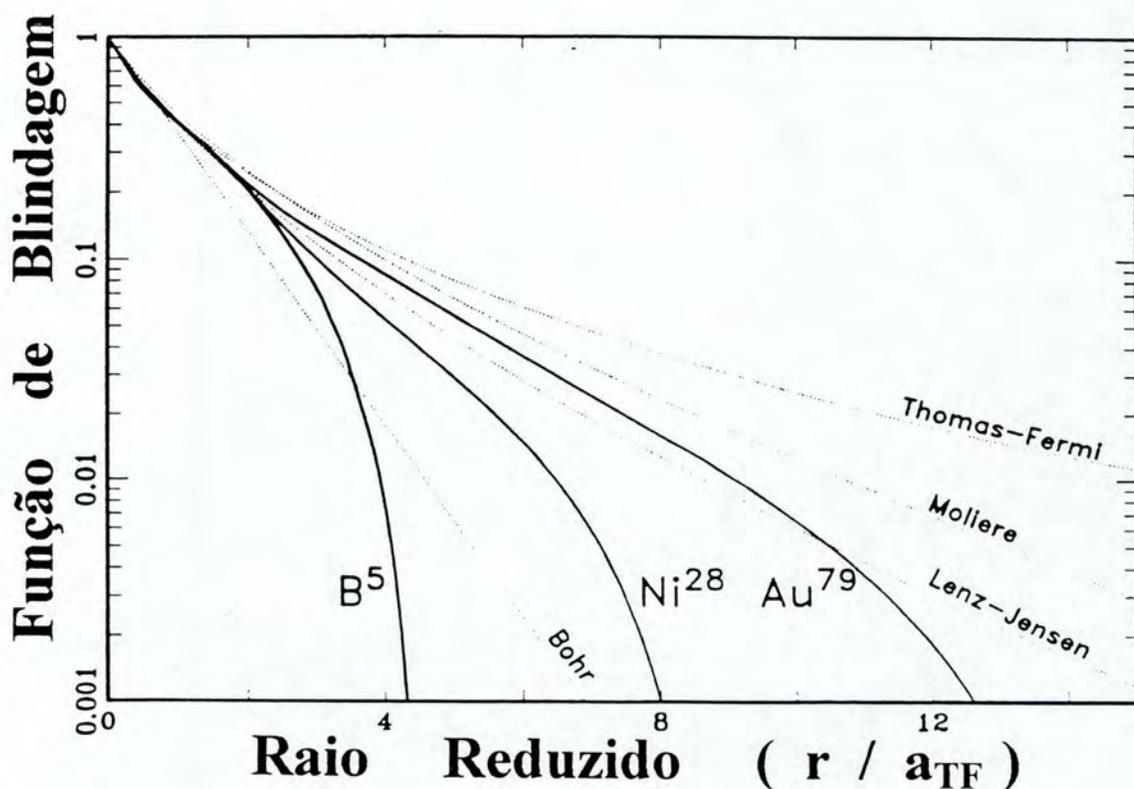


Fig. A.2: Funções de blindagem relativas a distribuições de carga atômica de estado sólido para Ni, B e Au e as quatro funções de blindagem clássicas (Ziegler et al., 1985, p. 34).

A partir do potencial de átomo isolado, podemos obter a densidade eletrônica correspondente mediante a Equação de Poisson:

$$4\pi\rho(r) = \frac{Z}{r} \frac{d^2}{dr^2} \phi(r).\tag{A.12}$$

No caso do potencial de Thomas-Fermi, a densidade eletrônica pode ser obtida diretamente da equação diferencial de Thomas-Fermi (Gombás, 1956):

$$4\pi r^2 \rho_{\text{TF}}(x) = \frac{Z}{r} [x\phi_{\text{TF}}(x)]^{3/2}. \quad (\text{A.13})$$

Potenciais Interatômicos

Mostramos como calcular a energia potencial de interação entre o projétil e um átomo-alvo a partir das distribuições de carga eletrônica dos dois "átomos" participantes da colisão. Entretanto, como já mencionamos, ao longo do tempo, uma outra maneira de tratar o problema tem sido mais empregada. Essa abordagem será tratada a seguir.

Podemos também, similarmente ao caso de um átomo isolado, definir uma função de blindagem interatômica como sendo a razão entre a energia potencial de interação $U(r)$ entre os dois "átomos" e a energia potencial coulombiana pura $Z_1 Z_2 e^2 / r$:

$$\Phi(r) \equiv \frac{U(r)}{Z_1 Z_2 e^2 / r}. \quad (\text{A.14})$$

A abordagem histórica na postulação de funções de blindagem interatômicas constituiu-se em usar as funções de blindagem atômicas e ajustar a definição de comprimento de blindagem para dar conta do potencial dos dois átomos. Abaixo damos 3 definições de comprimento de blindagem interatômico e os respectivos proponentes.

Bohr

$$a_{\text{Bohr}} = \frac{a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}}. \quad (\text{A.15})$$

Firsov

$$a_{\text{Firsov}} = \frac{0,8853 a_0}{(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3}}. \quad (\text{A.16})$$

Lindhard

$$a_{\text{Lindhard}} = \frac{0,8853 a_0}{(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}}. \quad (\text{A.17})$$

Firsov e Lindhard propuseram usar seus respectivos comprimentos de blindagem em combinação com a função de blindagem de Thomas-Fermi (eq. A.8).

Na fig. A.3 são mostradas as diferentes definições de função de blindagem interatômicas, bem como cálculos Hartree-Fock de estado sólido para as combinações B-B, Ni-Ni e Au-Au. Em todas elas foi empregado o raio de blindagem de Firsov. Podemos ver que existem grandes desvios entre qualquer das funções de blindagem universais clássicas e os cálculos Hartree-Fock.

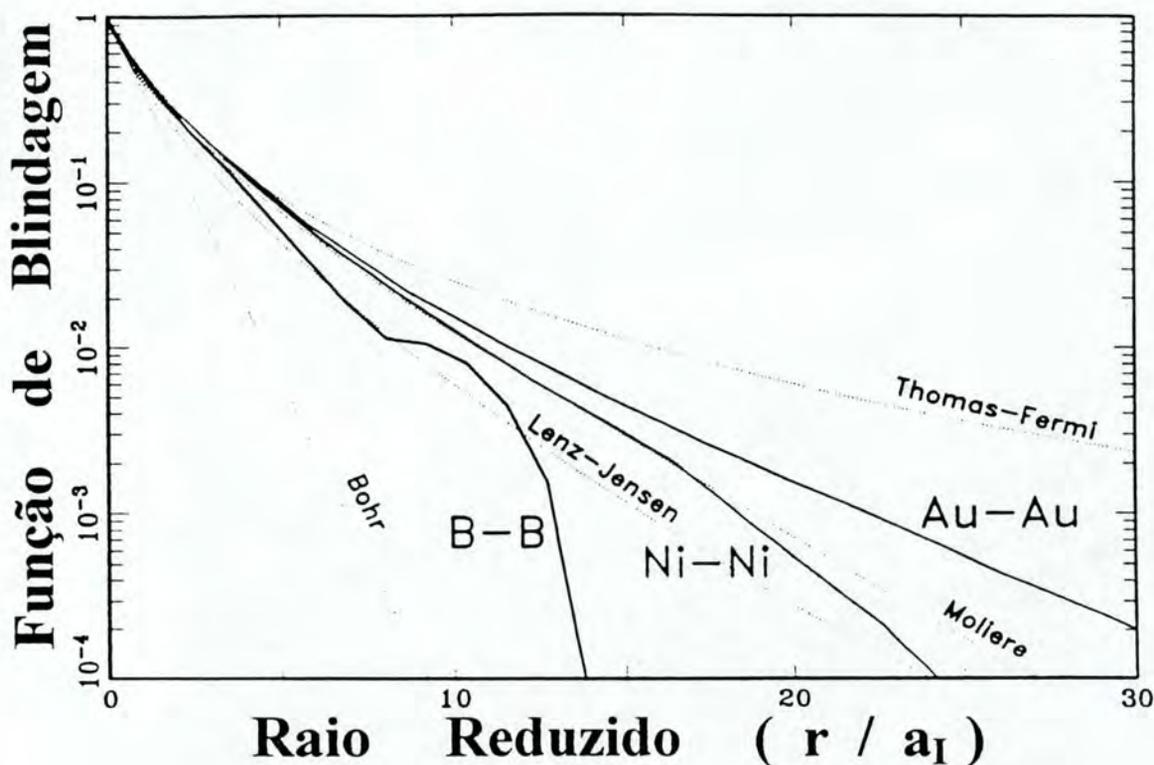


Fig. A.3: Funções de blindagem interatômica para as combinações B-B, Ni-Ni e Au-Au (Ziegler et al., 1985: p. 36).

A.2 Similaridade

Em nosso objetivo principal, que é o cálculo do poder de freamento nuclear, gostaríamos de obter independência da combinação íon-alvo específica, tratando o problema em termos de variáveis reduzidas adimensionais. Para atingir tal meta, introduzimos como unidade de comprimento o raio de blindagem a , e, de energia, o valor $\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a}$. Então

$$x \equiv r/a, \tag{A.18}$$

e

$$b \equiv p/a, \tag{A.19}$$

são a distância e parâmetro de impacto reduzidos, enquanto

$$\varepsilon \equiv \frac{E_c}{\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a}} \tag{A.20}$$

é a energia reduzida.

Com essas modificações, a equação da órbita (1.3) e a que calcula o poder de freamento nuclear (1.13) ficam

$$\Theta = \pi - 2 \int_{x_0}^{\infty} \frac{b dx}{x^2 \sqrt{1 - \frac{\bar{\Phi}(x)}{x\varepsilon} - \frac{b^2}{x^2}}}, \tag{A.21}$$

e

$$\bar{\epsilon}_n(\varepsilon) = \varepsilon \int_0^{\infty} \text{sen}^2(\Theta(b, \varepsilon)/2) d(b^2), \tag{A.22}$$

onde $\bar{\Phi}(x) = \Phi(ax)$ e $x_0 \equiv r_0/a$. E a relação entre o poder de freamento reduzido e o normal é

$$\epsilon_n(E) = \pi a^2 \gamma \frac{E}{\varepsilon} \bar{\epsilon}_n(\varepsilon), \tag{A.23}$$

estando a energia E relacionada com a energia reduzida ε por:

$$\frac{E}{\varepsilon} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{a M_2} (M_1 + M_2). \tag{A.24}$$

Com relação à eq. A.21, a função de blindagem $\bar{\Phi}$ ainda é dependente do par de colisão considerado. Suponhamos que exista uma única função de blindagem escrita em termos das variáveis reduzidas capaz de descrever a interação eletrostática que se estabelece entre dois átomos quaisquer. Precisaríamos, então, resolver as equações A.21 e A.22 uma única vez e, mediante as equações A.23 e A.24, poderíamos converter o valor de $\bar{\epsilon}_n(\varepsilon)$ em unidades práticas.

Ziegler et al. (1985) dedicaram-se a esse problema e obtiveram êxito em encontrar uma função de blindagem "universal". Eles escolheram aleatoriamente 261 pares de átomos (o que, uma vez que as colisões binárias são simétricas, corresponde a 6% do total de combinações possíveis de

dois elementos). Calcularam a energia potencial interatômica para cada combinação usando a equação A.4 com distribuições de carga calculadas pelo método Hartree-Fock. Determinaram, em seguida, as funções de blindagem correspondentes mediante a eq. A.14. Ajustaram as mesmas através de uma soma de três exponenciais:

$$\bar{\Phi}(x) = \sum_{i=1}^3 a_i e^{-b_i x}, \tag{A.25}$$

sujeita a condição

$$\bar{\Phi}(0) = 1 = \sum_{i=1}^3 a_i, \tag{A.26}$$

sendo a_i e b_i parâmetros de ajuste e como comprimento de blindagem foi usado o de Firsov. O resultado desse procedimento é mostrado na figura A.4.

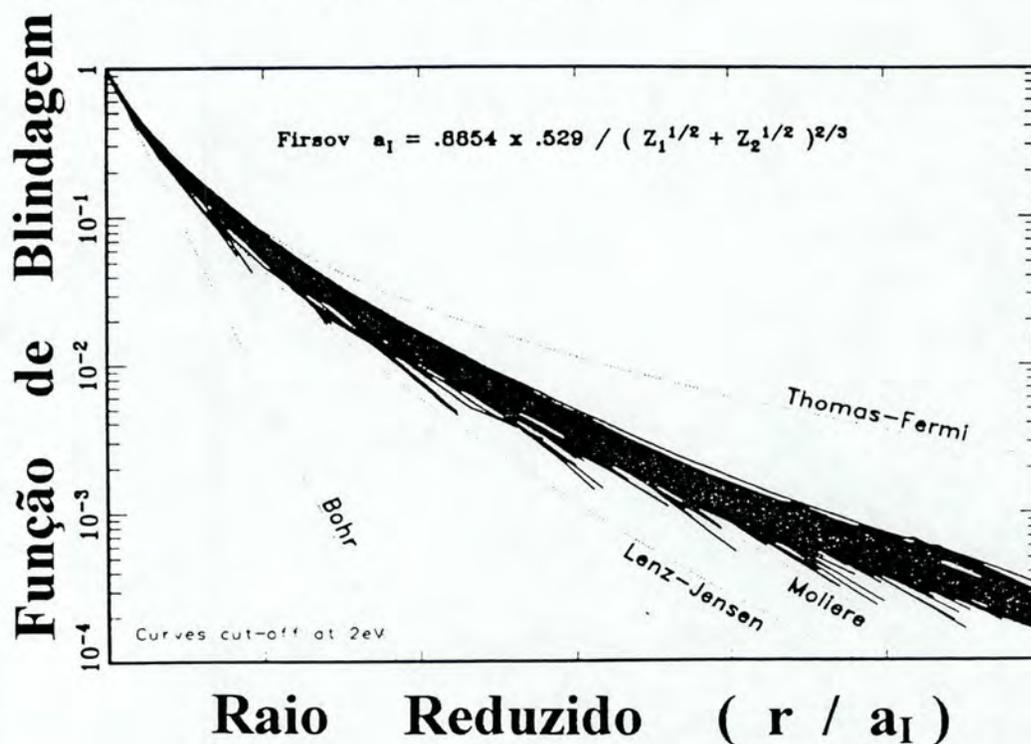


Fig. A.4: Funções de blindagem para os diferentes pares de colisão escolhidos por Ziegler et al. (1985: p. 46).

O problema seguinte é encontrar uma definição de comprimento de blindagem que comprima as diversas funções de blindagem o máximo possível. Ziegler et al. (1985) conseguiram isso (com uma dispersão em torno de 18 %) (fig.A.5), através da seguinte proposição:

$$a_U = \frac{0,8853 a_0}{Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23}}, \tag{A.27}$$

onde o subscrito U indica que esse é supostamente o comprimento de blindagem universal.

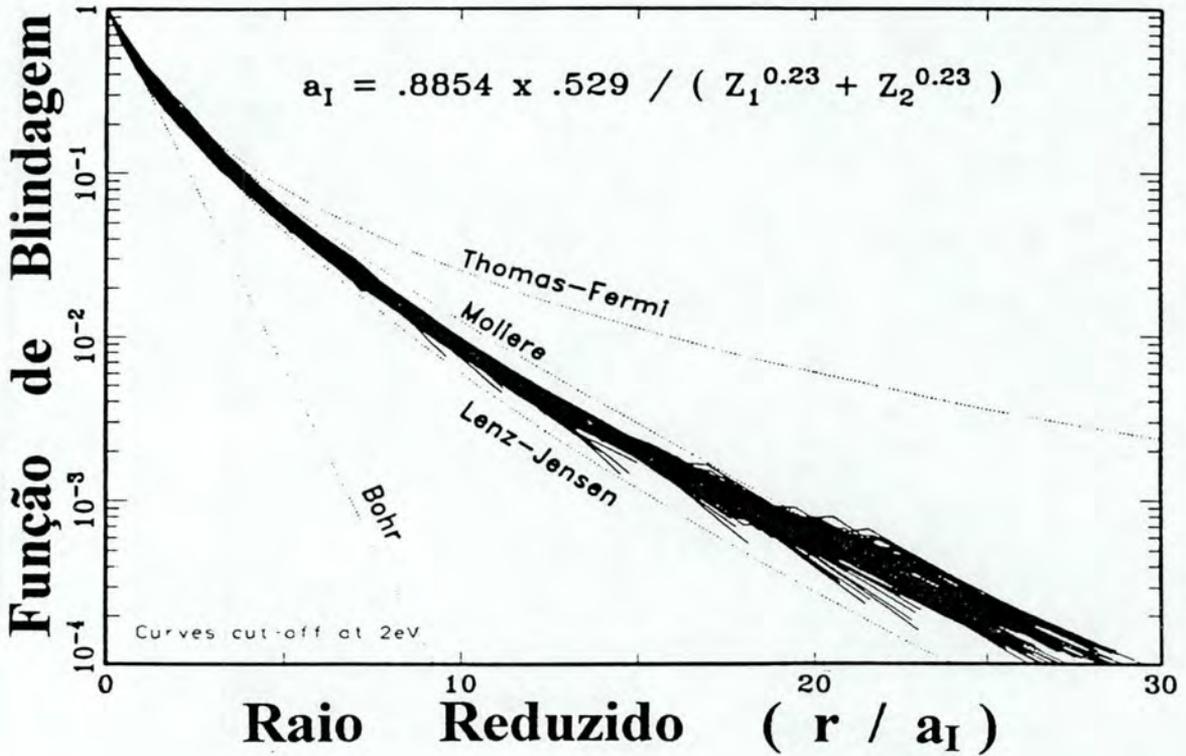


Fig. A.5: Funções de blindagem da fig.1.5 em função da distância reduzida definida em termos do raio de blindagem universal de Ziegler et al. (1985, p. 47).

As novas funções de blindagem reduzidas foram, então, similarmente ajustadas a fim de se obter uma função de blindagem universal:

$$\begin{aligned}
 \Phi_U(x) = & 0,1818 \exp(-3,2x) \\
 & + 0,5099 \exp(-0,9423x) \\
 & + 0,2802 \exp(-0,4028x) \\
 & + 0,02817 \exp(-0,2016x).
 \end{aligned} \tag{A.28}$$

Apêndice B

MEDIÇÕES DA PERDA DE ENERGIA DE ÍONS CANALIZADOS

B.1 Introdução

Um melhor entendimento da perda de energia de íons canalizados é útil no estudo de cristais por meio de feixes canalizados. Frequentemente é importante saber, num espectro de íons canalizados, a profundidade na qual uma colisão de retroespalhamento ocorreu, e isso somente é possível, se a perda de energia dos íons canalizados for conhecida.

B.2 Estudos de Transmissão

Em medições de transmissão, a distribuição em energia das partículas que atravessam o alvo é determinada e, a partir da diferença entre as correspondentes energias do espectro de partículas incidentes e transmitidas, os valores da perda de energia podem ser extraídos.

Os primeiros experimentos para medir o efeito da canalização sobre a perda de energia de íons na região de energia de validade da fórmula de Bethe, ou abreviadamente região de Bethe, foram levados a cabo por Dearneley em 1963 (Dearneley, 1964). Prótons de 2,1 MeV foram colimados sobre um cristal de silício fino cortado perpendicularmente à direção $\langle 111 \rangle$. Através da rotação em torno desse eixo, o qual foi adequadamente inclinado em relação ao feixe de prótons, foi possível medir variações no espectro de energia das partículas transmitidas mediante um detector de barreira de superfície de silício colocado atrás do cristal absorvedor. Reduções de até 50% na perda de energia foram observadas, quando os prótons penetravam ao longo dos canais axiais $\langle 110 \rangle$ (fig. B.1). Como consequência do experimento foi proposto que os íons eram guiados por um potencial efetivo que tinha uma forma aproximada de poço quadrado, o qual faria assim com que as partículas do feixe passassem um grande tempo nas regiões de baixa densidade eletrônica. Foi deduzido que o ângulo de aceitação sobre o qual a canalização ocorria deveria decrescer com a raiz quadrada da energia.

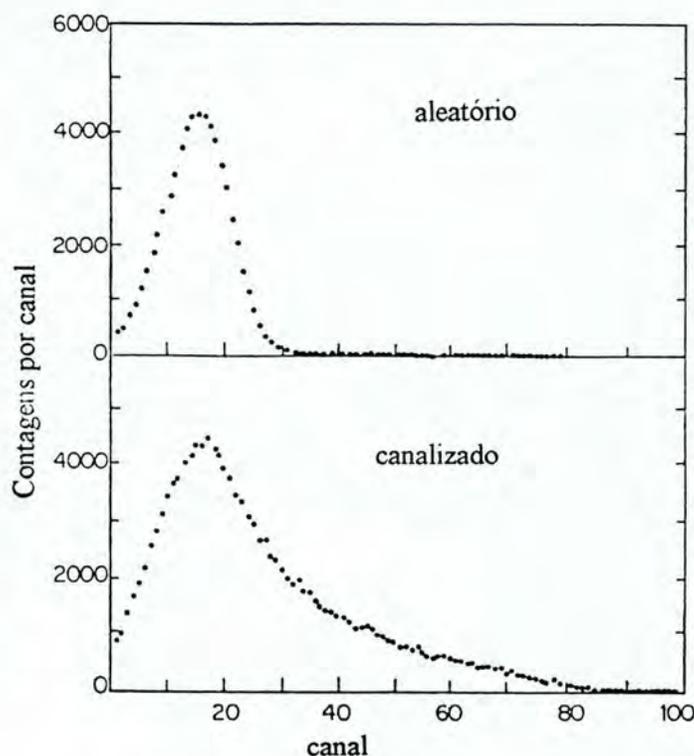


Fig. B.1: Distribuição em energia de prótons de 2,1 MeV de energia incidente transmitidos através de um cristal fino de silício ao longo de uma direção aleatória (acima) e em canalização (abaixo) (Dearnaley, 1964).

Somente a canalização axial foi descrita nesse artigo, embora já fosse concebido naquele tempo que canais planares em uma rede também levariam a uma perda de energia reduzida, e isso foi demonstrado logo depois por Erginsoy et al. (1964). Experimentos com uma melhor definição angular dos prótons incidentes (Gibson et al., 1965; Sattler e Dearnaley, 1965 e Farmery et al., 1965) mostraram que partículas bem canalizadas poderiam ser resolvidas como um grupo distinto no espectro transmitido e, assim, uma medida precisa de suas perdas de energia tornou-se viável (fig. B.2). Por esse tempo, um grande número de laboratórios equipados com aceleradores eletrostáticos voltou sua atenção para a canalização de íons e, daí, os dados disponíveis cresceram rapidamente. Havia, no entanto muitos novos fenômenos a ser observados e muito do trabalho experimental versava sobre a dependência angular dos fenômenos ligados à canalização e sobre a distribuição espacial das partículas que emergiam do cristal (Appleton et al., 1967 e Dearnaley et al., 1968). Um trabalho anterior (Sattler e Dearnaley, 1965) revelou que a perda de energia de prótons bem canalizados em germânio (Ge) poderia chegar a ser tão baixa quanto um fator 3 a

menos do que o valor aleatório, o que viola a regra da equipartição (cf. Bohr, 1948).

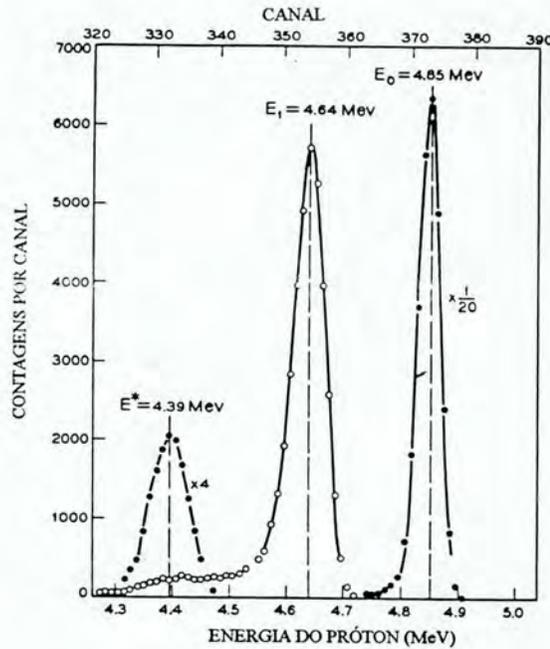


Fig. B.2: Espectros de energia medidos com um detetor de pequeno diâmetro para prótons de 4.85 MeV de energia transmitidos através de um cristal de silício de $50\mu\text{m}$ de espessura a uma orientação aleatória (pico do lado direito) e sob condições de canalização ao longo do plano $\{111\}$ (pico central). O pico do lado direito mostra o espectro dos prótons incidentes. Todos os três espectros correspondem ao mesmo número de prótons incidentes (Gibson et al., 1965).

Um resultado de experimentos com prótons de energia moderadamente baixa (375 keV) (Eisen, 1966) mostrou que a perda de energia mínima ao longo do eixo $\langle 110 \rangle$ no silício era um pouco menos do que aquela medida ao longo dos planos $\{111\}$ e $\{110\}$, os quais interseccionam aquele eixo. Esse resultado discorda dos de Erginsoy et al. (1964), Appleton et al. (1967), Sattler e Dearnaley (1967), Gibson et al. (1968) e Sattler e Vook (1968) a altas energias, o qual sugeria que a largura do canal planar mais largo, dentre aqueles que interseccionam um eixo, determina a perda de energia ao longo desse eixo. Esse ponto ainda está em debate e as diferenças em energia sob discussão são muito pequenas. Parece (Eisen et al., 1972; von Jan, 1967) que a probabilidade de medir qualquer diferença depende de fatores experimentais tais como a energia do íon, a espessura do cristal e a sua perfeição, uma vez que esses fatores influenciam a probabilidade de a trajetória de um íon permanecer dentro de um único canal axial, bem como, da resolução do sistema de

detecção.

A possibilidade de a interação de íons com a rede cristalina pode ser completamente entendida em termos de sua interação com um única cadeia ou corda de átomos (v. cap. 3) foi considerada por Barret (1971), o qual utilizou simulação computacional do movimento do íon. Diferenças em ângulos críticos foram, de fato, encontradas, indicando que o íon interagindo com um arranjo tridimensional de cadeias atômicas comporta-se diferentemente do que se esperaria de um que interagisse com uma cadeia ou corda de cada vez. Sendo assim, as perdas de energia experimentadas ao longo de canais axiais e planares podem ser também diferentes entre si.

Em medições da perda de energia de íons transmitidos, dois tipos de arranjo dos detectores são possíveis. Em um caso, um detector com um ângulo de aceitação grande, colocado próximo ao absorvedor, mede o espectro de energia de todos os íons. Em outro caso, um detector finamente colimado colocado a uma grande distância do absorvedor mede a energia de componentes selecionadas do feixe emergente. Appleton et al. (1967) compararam os resultados para ambos os tipos de arranjo no caso de prótons de 3 a 11 MeV canalizados através de Si. Figuras B.3 e B.4 mostram os espectros totais para dois planos (fig. B.3) e um eixo (fig. B.4). Na canalização planar, a probabilidade de um íon permanecer canalizado através de todos os $33\mu\text{m}$ de espessura do cristal é bastante pequena. Na canalização axial, por outro lado, a probabilidade é muito maior e muito poucas partículas sofrem uma perda de energia tão grande quanto o valor característico de uma trajetória aleatória ou abreviadamente perda de energia aleatória. Outra característica é evidente na fig. B.3: a presença de algumas partículas no espectro canalizado com uma perda de energia maior do que a aleatória. Essa assim chamada "componente de alta perda" ("high loss component") foi estudada em detalhe por Appleton et al. (1967), que mostrou que as probabilidades das componentes de alta e baixa perda, obtidas pela subtração do espectro normal do espectro canalizado, variam com o ângulo de incidência relativo ao plano do cristal. Hoje em dia, acredita-se que essas partículas de alta perda de energia são "quase-canalizadas", i.e., que elas entram no cristal com um ângulo tal que elas sofrem um grande número de colisões de perto com as cadeias atômicas antes de sofrer um encontro de decanalização, após o qual a sua perda de energia volta ao valor aleatório. Ao viajar em uma trajetória que se situa em uma região de alta densidade eletrônica, esses íons perdem mais energia do que em uma trajetória aleatória.

Um detector finamente colimado, por outro lado, pode ser usado para medir a perda de energia daquelas partículas que emergem próximas a um eixo ou plano do cristal, as quais não sofreram nenhuma deflexão líquida. Íons tão bem canalizados exibem uma bem definida perda de energia,

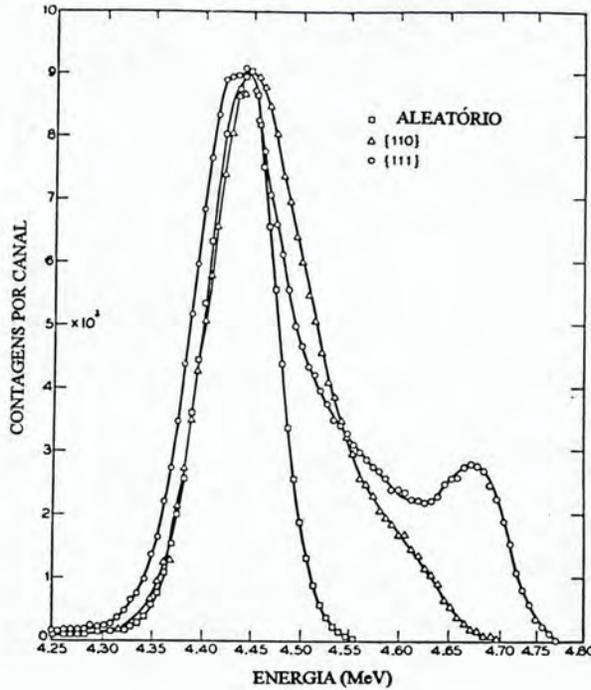


Fig. B.3: Espectros de energia (normalizados a mesma altura) de prótons de 4.9 MeV de energia transmitidos através de um cristal de silício de $33 \mu\text{m}$ de espessura a uma orientação aleatória e sob condições de canalização ao longo dos planos $\{111\}$ $\{110\}$. Esses espectros foram medidos com um detector de grande área de aceitação colocado logo atrás do cristal absorvedor (Appleton et al., 1967).

como é mostrado na fig. B.5, novamente tirada do paper de Appleton et al. (1967). A largura da distribuição canalizada é notavelmente menor do que a do espectro aleatório, e isso é de se esperar, uma vez que as flutuações estatísticas na perda de energia de colisões aleatórias excede aquela numa trajetória canalizada bem definida com um intervalo restrito de parâmetros de impacto. De fato, o desvio padrão da distribuição, após correção da resolução instrumental, é aproximadamente proporcional à perda de energia.

Várias comparações têm sido feitas de canalização iônica na região de Bethe usando diferentes cristais. A idéia era investigar se diferentes graus de ligação iônica influenciariam a perda de energia mínima. Uma vez que a estrutura cristalina também afeta a perda de energia, é necessário escolher estruturas cristalinas e dimensões de rede similares. Sattler e Dearnaley (1967) e Sattler e Vook (1968) compararam os semicondutores Si, Ge e GaAs, que têm rede do tipo da do diamante, e InAs, GaSb, AlSb e InSb, que apresentam rede cristalina do tipo da da blenda de zinco. A conclusão chegada é que os fatores dominantes sobre a perda de energia são as dimensões do canal

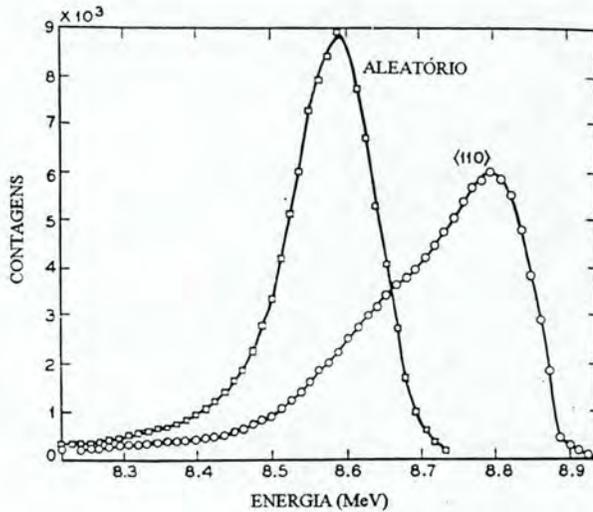


Fig. B.4: Espectros de energia correspondentes a prótons de 9 MeV transmitidos através de um cristal de silício de $48 \mu\text{m}$ de espessura a uma orientação aleatória e sob condições de canalização ao longo do eixo $\langle 110 \rangle$. Os espectros são normalizados ao mesmo número de prótons incidentes. Esses espectros foram medidos com um detector de grande área colocado logo atrás do cristal absorvedor (Appleton et al., 1967).

e o número atômico do absorvedor. A dependência com o número atômico Z_2 do absorvedor é a mesma nos casos de íons transmitidos bem canalizados e com trajetórias aleatórias. A natureza das ligações entre os átomos não tem efeito significativo. Clark et al. (1970: p. 388) estenderam a pesquisa de diferentes absorvedores aos metais com rede cúbica de corpo centrado (bcc) Fe, Mo e W e aos isolantes iônicos NaCl, CsI e MgO. Esses autores enfrentaram a questão que vinha sendo deixada de lado em trabalhos anteriores, a saber: se a medida mais significativa é a energia correspondente ao pico ou ao limiar dianteiro ("leading edge") do espectro de energia canalizado, i.e., a mínima perda de energia mensurável. Clark et al. (1970, p. 388) inferiram, por várias razões, que a largura do pico é dominada por diferenças nas trajetórias iônicas, mas tabelaram as perdas de energia mínima e mais provável. Como nos trabalhos de Sattler et al. (1967, 1968), não foi encontrada uma dependência significativa com as propriedades do material e mostrou-se que o fator dominante é o tamanho do canal. À luz desse resultado, Clark et al. (1970: p. 388) traçaram um gráfico da perda de energia canalizada mínima para prótons de 4 MeV em função da largura de uma série de canais axiais, para Si e Ge (fig. B.6). Esses materiais têm parâmetros

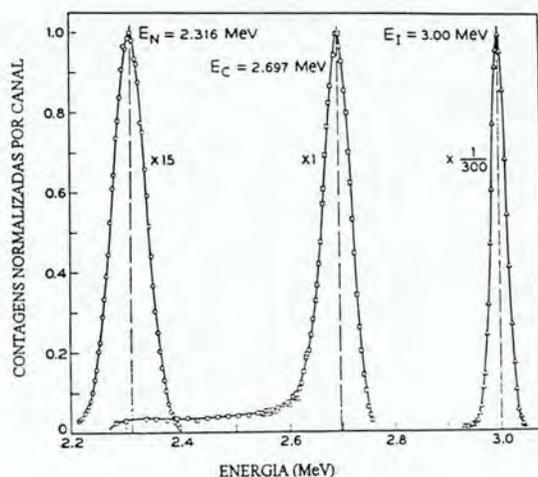


Fig. B.5: Espectros de energia registrados com um detector de pequeno ângulo de aceitação para prótons de 3 MeV transmitidos em uma direção aleatória (esquerda) e paralela aos planos $\{111\}$ (centro) de um filme de silício de $33 \mu\text{m}$ de espessura. O espectro do lado direito mostra a distribuição de energias dos íons incidentes (Appleton et al., 1967).

de rede aproximadamente iguais e a mesma estrutura cristalina. O resultado mostrou que, para canais largos, a perda de energia converge para o que pode ser um limite assintótico chamado "componente isotrópica". A diferença entre os poderes de freamento de Si e Ge no caso não-cristalino foi atribuída aos diferentes números de elétrons ligados, enquanto que a componente canalizada "isotrópica" foi associada com o efeito dos elétrons de valência distribuídos através de todo o canal.

Outras medições de perda de energia de íons leves em metais foram relatadas por Gibson et al. (1968), que investigaram a transmissão de prótons de 400 keV e de íons de hélio de 800 keV através de cristais finos de ouro. A energia dos íons de hélio estava um pouco abaixo da região de Bethe, embora um comportamento similar foi registrado para ambas as espécies de íons. Encontrou-se que a perda de energia mínima observada ao longo de uma direção axial era a mesma que aquela para uma incidência ao longo do plano mais aberto que intersecciona aquele eixo, resultado que está em desacordo com aquele de Eisen (1966) em silício. A perda de energia canalizada mínima medida para os íons de hélio a 800 keV era cerca de 60 % do valor da perda aleatória. Machlin et al. (1970) canalizou prótons de cerca de 100 keV de energia através de cristais de ouro muito finos de alta qualidade. Devido à largura dos espectros de energia dos íons transmitidos, é difícil tirar conclusões quanto à perda de energia mínima, mas parece claro que a razão entre a perda

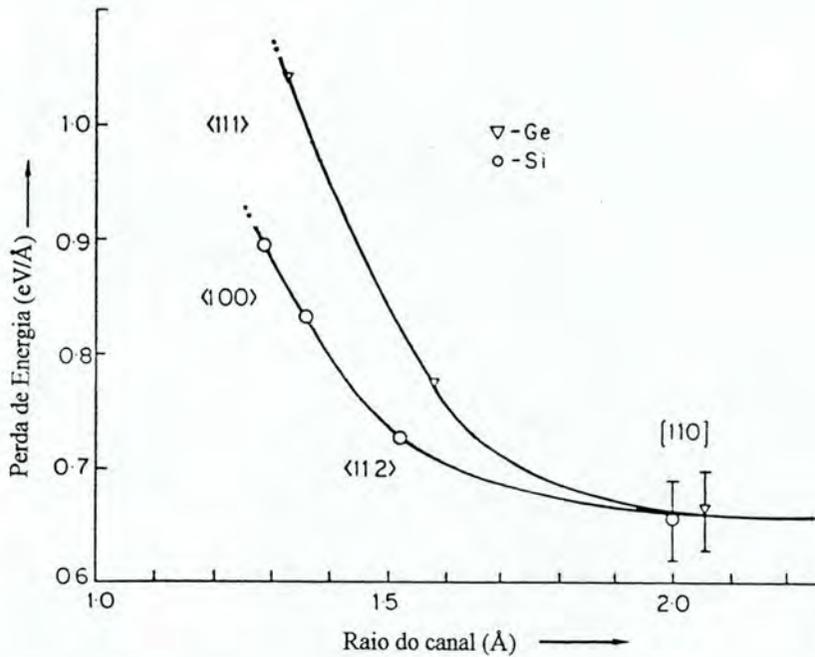


Fig. B.6: Poder de Freamento para prótons de 4 MeV transmitidos ao longo dos eixos principais de cristais de Si e Ge em função do raio do canal correspondente a cada eixo (Clark et al., 1970).

canalizada e a aleatória é, no mínimo, 0,7.

Uma investigação do efeito da temperatura sobre a perda de energia de prótons de 1,5 MeV canalizados através de silício foi feita por Fujimoto et al. (1969), e foi mostrado que a intensidade da componente canalizada diminui com a temperatura por um fator dois entre 300 e 560 K, mas que as perdas de energia mínima e mais provável não variam.

Eisen et al. (1972) realizaram um estudo extenso e sistemático da perda de energia de íons de hélio canalizados em silício cobrindo a região de energia entre 100 keV e 18 MeV com o uso de quatro aceleradores. Várias características interessantes emergiram desses experimentos. Das medições com cristais de diferentes espessuras foi mostrado que a largura do espectro de energia canalizado não é determinada por dispersões de energia ("straggling") (que aumenta com a raiz quadrada da espessura), mas sim por variações na trajetória do íon (levando a uma dependência linear com a espessura). Como é mostrado na figura B.7, o espectro canalizado para a direção $\langle 110 \rangle$ é muito largo e duas a três vezes tão largo quanto o espectro aleatório. Uma pequena, mas significativa diferença, foi observada entre as perdas de energia mínima ao longo do eixo $\langle 110 \rangle$ e os planos $\{111\}$ que o interseccionam:

$$\frac{dE}{dx}(\langle 110 \rangle) < \frac{dE}{dx}(\{111\}). \quad (\text{B.1})$$

As posições dos picos também ocorrem a energias diferentes, para o eixo $\langle 110 \rangle$ e planos $\{111\}$, um resultado conflitante com aquele de Appleton et al. (1967) e Della Mea et al. (1972), mas esses últimos estavam basicamente interessados em prótons. Eisen et al. (1972) indicaram que isso é devido ao fato de que a largura do canal $\langle 110 \rangle$ no silício é maior do que a distância de separação entre os plano $\{111\}$ e que, quando não é assim, como no caso dos canais $\langle 111 \rangle$ e $\langle 100 \rangle$ e seus correspondentes planos de intersecção, as perdas de energia mínimas para eixos e planos são iguais. A razão α entre o poder de freamento canalizado e o aleatório de íons de He^+ no silício é mostrado em função da energia na fig. B.8 (Eisen et al., 1972). É particularmente interessante ver que α passa por um máximo no mesmo valor de energia que o poder de freamento canalizado.

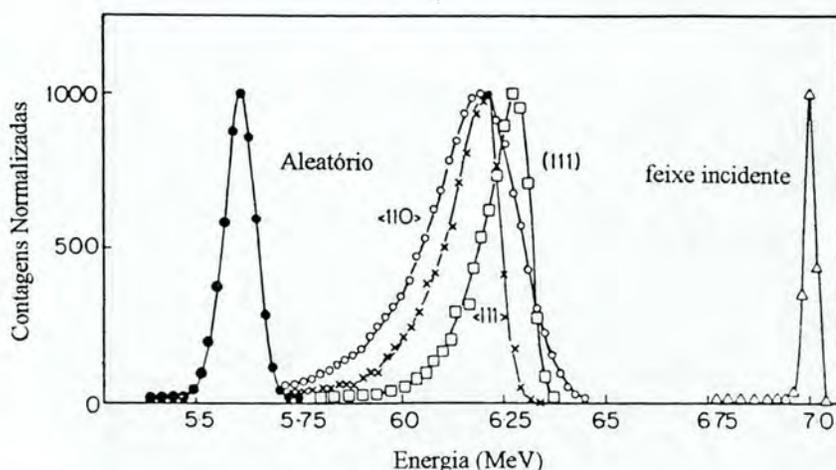


Fig. B.7: Espectros de energia correspondentes a íons de He de 7 MeV transmitidos através de um cristal de silício de $11.2 \mu\text{m}$ de espessura a uma orientação aleatória e sob condições de canalização ao longo das direções indicadas. Esses espectros foram medidos com um detector de pequeno ângulo de aceitação (Eisen et al., 1972).

Della Mea et al. (1972) também mediram a perda de energia de íons H^+ , D^+ e He^+ canalizados através de silício. Eles encontraram que, embora os limiares dianteiros dos espectros transmitidos para $\langle 110 \rangle$ e $\{111\}$ pareciam bastante diferentes, a energia mais provável do espectro de íons transmitidos ao longo do eixo $\langle 110 \rangle$ e a energia do pico da componente de baixa perda para

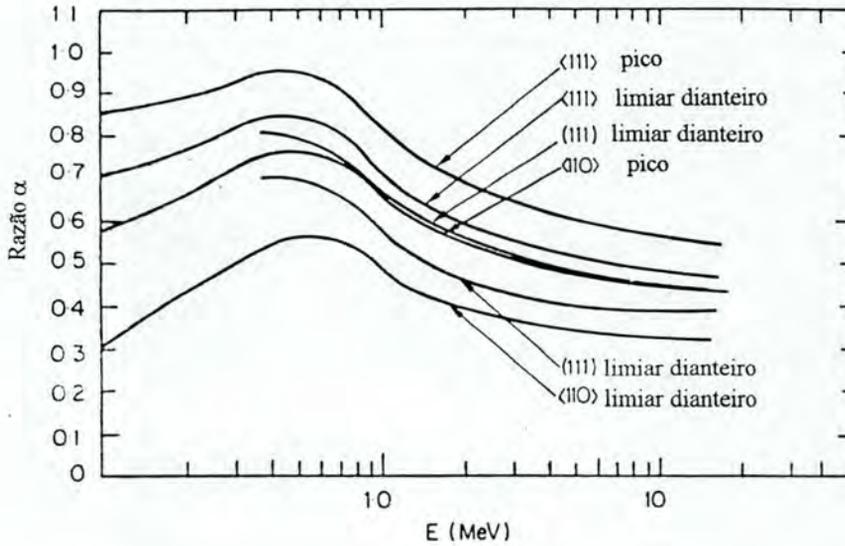


Fig. B.8: Razão entre os poderes de freamento canalizados e aleatórios medidos para íons He^+ transmitidos através de monocristais de Si em função da energia (Eisen et al., 1972).

o canal $\{111\}$ eram as mesmas e os espectros podiam ser ajustados com gaussianas centradas no mesmo valor de energia. Della Mea et al. (1972) concluíram, portanto, que a perda de energia mínima é efetivamente a mesma para o eixo e o plano interseccionador mais aberto. Assim, escolheram apresentar as perdas de energia mais prováveis. A figura B.9 mostra os seus valores juntos com outros resultados experimentais para a razão α para íons de próton, deutério e hélio em função da energia por nucleon E/A .

Holland e Appleton (1976) realizaram medições do poder de freamento em silício para íons de He com energia de 1,0 MeV transmitidos ao longo do canal interplanar $\{111\}$ com uma divergência angular máxima de $0,1^\circ$. A energia das partículas retroespalhadas foi medida por um detector de estado sólido de barreira de superfície com um resolução em energia de 9 keV FWHM. Os autores observaram dois grupos distintos de íons transmitidos (fig. B.10). O pico usual associado com aqueles íons que sofrem perdas de energia menores do que a aleatória e um outro centrado em uma perda de energia substancialmente maior do que a perda de energia aleatória. A origem desses dois grupos foi atribuída a natureza incomum do canal interplanar $\{111\}$ em Si, o qual é composto de um conjunto de planos largamente espaçados (2.35 Å de separação) limitado por um conjunto estreito (0.78 Å de separação) de densidade eletrônica equivalente. Assim o grupo de baixa perda

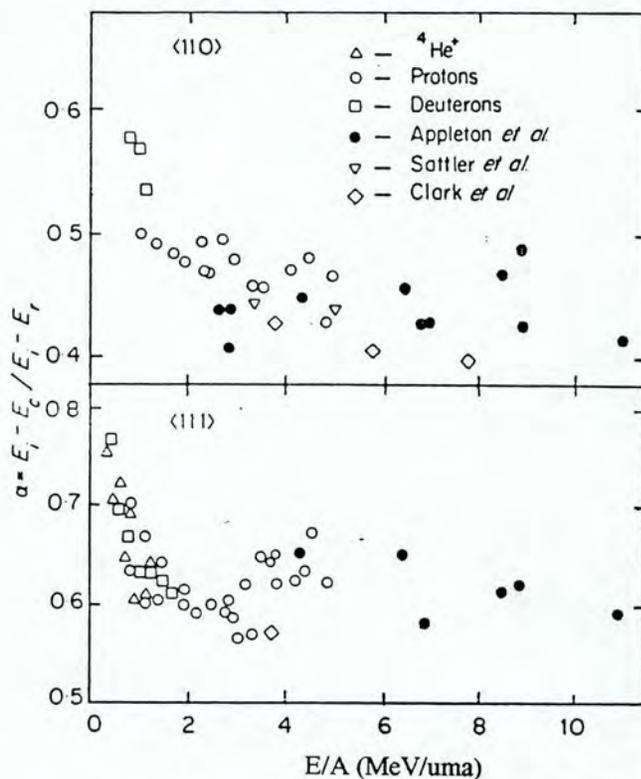


Fig. B.9: Razão entre os poderes de freamento canalizados e aleatórios medidos para íons de próton, deutério e hélio transmitidos ao longo das direções < 110 > e < 111 > de monocristais de Si em função da energia por nucleon (Della Mea et al., 1972).

seria devido a íons canalizados no subcanal {111} largo e o grupo de alta perda seria canalizado no subcanal {111} estreito.

B.3 Estudos de Alcance

As medições de alcance de íons em materiais monocristalinos, policristalinos e amorfos têm contribuído significativamente para o conhecimento e o entendimento dos processos de perda de energia (Behar et al., 1995). Tais medições usualmente envolvem, numa primeira etapa, a implantação do íon e, posteriormente, a análise do perfil de concentração resultante.

Medidas de alcance têm a grande vantagem de que uma grande variedade de materiais cristalinos podem ser estudados através das técnicas usuais de estudo de alcances, e.g., seccionamento e RBS. Entretanto, uma vez que os alcances tenham sido determinados, permanece o problema de extrair os correspondentes poderes de freamento desses. Em princípio, a perda de energia pode ser

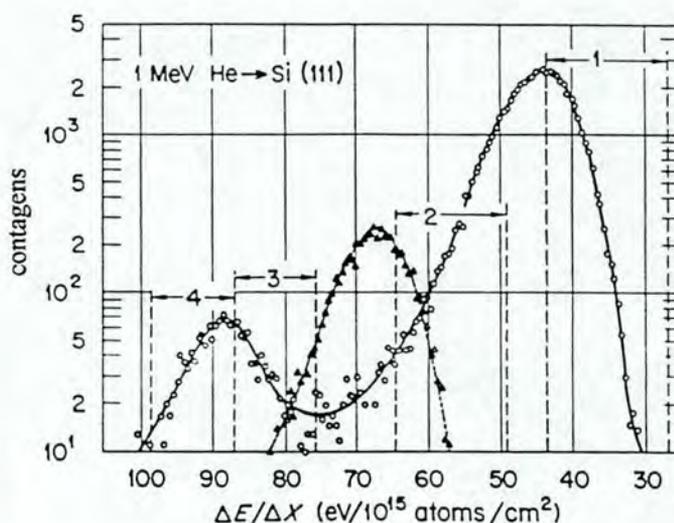


Fig. B.10: Distribuições de perda de energia para íons de He de 1 MeV transmitidos ao longo do plano {111} de Si (linha sólida) e em orientação aleatória (curva tracejada) (Holland e Appleton, 1976).

obtida através da diferenciação da curva de alcance máximo versus a energia incidente do projétil. Os alcances de íons canalizados podem depender criticamente de fatores tais como a probabilidade de decanalização. A detecção de partículas decanalizadas não é usualmente um problema em experimentos de transmissão, devido à alta colimação imposta sobre as partículas transmitidas. Entretanto, valores de poder de freamento podem ser obtidos de dados de alcances sob condições que seriam inacessíveis a experimentos de transmissão de íons canalizados.

Um excelente exemplo e precursor de muitos experimentos foi o de Eriksson et al. (1967), que determinaram os perfis de alcance de muitos íons implantados em tungstênio em função da energia ao longo das direções $\langle 100 \rangle$ e $\langle 110 \rangle$. Os experimentos demonstraram características muito interessantes, tais como: a supressão do poder de freamento nuclear em direção canalizada, a dependência do poder de freamento com $E^{1/2}$ e a forte dependência oscilatória do poder de freamento eletrônico com a carga Z_1 do projétil.

A distribuição em profundidade de íons canalizados foi também estudada por Wilson (1986). Perfis de implantação para íons de He com energia de 200 keV incidentes ao longo dos canais $\langle 100 \rangle$ e $\langle 110 \rangle$ e em direção aleatória foram medidos em Si, Ge e GaAs. O ângulo de divergência do feixe sobre a área implantada foi de cerca de $\pm 0,1^\circ$. A distribuição em profundidade

foi medida através da técnica de espectrometria de massa de íons secundários (SIMS), utilizando um feixe de íons primários de oxigênio e espectrometria de íons positivos. O erro na profundidade foi de $\pm 7\%$. Os perfis de He canalizados na direção $\langle 100 \rangle$ de cada tipo de cristal foram iguais aos obtidos para uma incidência ao longo de uma direção aleatória, indicando que, para o valor de energia estudado e dentro do erro experimental, não haveria diferenças entre os poderes de freamento para os dois tipos de orientação. Por outro lado, ele encontrou que o poder de freamento eletrônico ao longo da direção $\langle 110 \rangle$ é cerca de 1,7 vezes menor do que o aleatório, para o Si, e cerca de duas vezes menor do que o aleatório para os outros dois cristais.

Um outro caso de medida de perda de energia através da técnica de implantação iônica foi realizado por Bogen et al. (1993). Eles mediram o poder de freamento de ^{11}B e ^{10}B com energias entre 0,5 e 5 MeV incidentes ao longo do canal $\langle 100 \rangle$ do silício. Um implantador Genus tandetron foi usado com o feixe de boron colimado a uma divergência angular máxima de $0,2^\circ$. A distribuição em profundidade foi medida através da técnica de espectrometria de massa de íons secundários (SIMS). Os autores encontraram a perda de energia canalizada utilizando a seguinte parametrização empírica relacionando o poder de freamento à energia:

$$[(dE/dx)_c^e]^{-1} = A(\ln E)^2 + b(\ln E) + C, \quad (\text{B.2})$$

onde A , B e C são parâmetros a serem encontrados através do ajuste entre o alcance calculado (em função de A , B e C mediante a relação B.2) e o medido. Comparando os seus resultados com os obtidos por um programa de simulação do tipo Monte Carlo, encontraram um bom acordo para energias de até 2 MeV. Para energias acima de 2 MeV, tanto os poderes de freamento obtidos através do programa Monte Carlo quanto aqueles do TRIM superestimam os poderes de freamento experimentais. Os autores também verificaram a existência de um efeito isotópico na ordem de 5% para energias em torno de 1 MeV.

B.4 Estudos de Retroespalhamento

O primeiro estudo sobre o efeito da canalização de íons utilizando a técnica de retroespalhamento foi executado por Göetz et al. (1975). Medidas do poder de freamento foram feitas em silício para íons de próton com energias entre 0,7 e 1,6 MeV incidentes ao longo dos canais $\langle 111 \rangle$ e $\langle 110 \rangle$ e do plano $\{110\}$. A dependência do poder de freamento com o ângulo de inclinação do feixe em relação ao eixo do canal ou plano foi também estudada para a energia de 1,4 MeV. Um

acelerador Van-de-Graaff de 2 MeV foi usado com o feixe de prótons colimado a uma divergência angular máxima de $0,1^\circ$. A energia das partículas retroespalhadas foi medida por um detector semi-condutor com FWHM = 8 keV de resolução. Eles depositaram camadas muito finas (~ 700 Å) de carbono ou LiF na face posterior do alvos de silício. Os poderes de freamento foram determinados a partir da energia dos íons melhor canalizados, da energia mais provável e da energia média da distribuição em energia dos prótons retroespalhados pelos átomos da camada posterior usada como marcador. Os autores encontraram que a perda de energia mais provável ao longo do plano {110} era a mesma que aquela ao longo da direção $\langle 111 \rangle$, reforçando a tese de que o poder de freamento ao longo de um eixo é determinado pelas características do canal interplanar mais aberto dentre aqueles que o interseccionam. Comparando os seus resultados (obtidos com a técnica de RBS) com os de Della Mea et al. (1972), Clark et al. (1970), Appleton et al. (1967) e Sattler e Dearnelay (1965) (obtidos por transmissão), encontraram um bom acordo, dentro de todo o intervalo de energia estudado.

O único outro estudo sobre o efeito da canalização de íons utilizando a técnica de retroespalhamento foi executado por Cembali e Zignani(1977). Medidas do poder de freamento foram feitas em silício para íons de próton com energias entre 80 e 300 keV incidentes ao longo dos canais $\langle 100 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ e $\langle 110 \rangle$. A energia das partículas retroespalhadas foi medida com uma resolução de 9 keV FWHM. Eles produziram uma camada danificada de ~ 1300 Å de espessura pela implantação de fósforo. Os poderes de freamento foram determinados a a partir da energia dos prótons retroespalhados pelos átomos da camada danificada usada como marcador. Comparando os seus resultados com os de Della Mea et al. (1972, 1973), encontraram um bom acordo, dentro de todo o intervalo de energia estudado.

Um resumo das principais medições relacionadas com o poder de freamento de íons energéticos ao longo de trajetórias canalizadas é mostrado na Tab. B.1. Nessa tabela, os trabalhos são apresentados em ordem cronológica. Um código foi adotado para as referências. A relação entre esse código e a bibliografia apresentada no final desta tese é dada a seguir.

Legenda para as Referências da Tab. B.1

De64: Dearnaley, 1964.

Erg64: Ergynsoy et al., 1964.

Weg64: Wegner et al., 1964.

And65: Andreen et al., 1965.

- Ap65: Appleton et al., 1965.
Da65a: Datz et al., 1965a.
Da65b: Datz et al., 1965b.
Far65: Farmery et al., 1965.
Gi65: Gibson et al., 1965.
Sa65: Sattler e Dearnaley, 1965.
And66a: Andreen et al., 1966.
And66b: Andreen e Hines, 1966.
Ei66: Eisen, 1966.
Ham66: Hamilton e Quinton, 1966.
Lu66: Lutz et al., 1966.
Ap67: Appleton et al., 1967.
Rem67: Remillieux et al., 1967.
Erik67a: Eriksson et al., 1967.
Erik67b: Eriksson, 1967.
Sa67: Sattler e Dearnaley, 1965.
Ch68: Chadderton e Anderson, 1968.
De68a: Dearnaley et al., 1968a.
De68b: Dearnaley et al., 1968b.
Ei68: Eisen, 1968.
Gi68: Gibson et al., 1968.
Ib68: Ibel e Sizmann, 1968.
Lun68: Luntz e Bartram, 1968.
Mach68: Machlin et al., 1968.
Man68: Mannami et al., 1968.
Sa68a: Sattler e Brice, 1968.
Sa68b: Sattler e Vook, 1968.
Sh68a: Shipatov, 1968a.
Sh68b: Shipatov, 1968b.
Bott69: Böttiger, 1969.
Cl69: Clark et al., 1969.
Da69: Datz et al., 1969.

- Fuj69: Fujimoto et al., 1969.
Kon69: Kononov e Struts, 1969.
Alt70: Altman et al., 1970.
Cl70: Clark et al., 1970.
Da70: Datz et al., 1970.
Hi70: Hines, 1970.
Hög70: Högberg et al., 1970.
Mach70: Machline et al., 1970.
Man70: Mannami et al., 1970.
Ap71: Appleton et al., 1971.
Del71: Della Mea et al., 1971.
Ei71: Eisen e Robinson, 1971.
Lu71: Lutz et al., 1971.
Mor71: Morita e Itoh, 1971.
Del72: Della Mea et al., 1972.
Ei72: Eisen et al., 1972.
Ge72a: Gemmell e Mikkelson, 1972a.
Ge72b: Gemmell e Mikkelson, 1972b.
Gi72a: Gibson e Golovchenko, 1972.
Götz74: Götz et al., 1975
Hol76: Holland e Appleton, 1976.
Cemb77: Cembali e Zignani, 1977.
Wi87: Wilson, 1987.
Rain91: Raineri et al., 1991.
LaFer92: La Ferla et al., 1992.
Bog93: Bogen et al., 1993.
Dygo94: Dygo et al., 1994a.
Bosh95: Boshart et al., 1995.

	Energia	Cristal	Direções	Técnica	Espessura	Observações	Ref.
²⁷ I	2,1 MeV	Si	-	Transm.	37 μ	1. ^a anál. em <i>E</i> .	De64
	3 MeV	Si	várias	idem	25 μ	1. ^a obs. parts. de alta perda	Erg64
	3 MeV	Si	-	idem	25 μ	Disc. implicações p/ detetores	Weg65
	40 MeV	idem	-	idem	idem	idem	idem
	13 MeV	Au	-	idem	700 Å	Dep. ang.	And65
	4,85 MeV	Si	-	idem	50 μ	C. axial \times plan.	Ap65
	20-80 MeV	Au	-	idem	4000 Å	Dep. ang. e c/ <i>E</i>	Da65a,b
	2,5 MeV	Cu	< 110 >	idem	10 μ	Dep. ang. e c/ <i>T</i>	Far65
	5 MeV	Si	{111}, {110}, {100}	idem	50 μ	Dep. ang. das comp. de baixa/alta perda	Gi65
	4,25-7,75 MeV	Ge	< 110 >, < 111 >, < 112 >	idem	90 μ	Obs. comp. alta perda	Sa65
	7,63 MeV	idem	idem	idem	idem	idem	idem
	15 keV	Fe	-	idem	1000 Å	Dep. ang.	And66a
	8-25 keV	Au	-	idem	275-600 Å	Dep. ang.; danos; troca de carga	And66b
	375 keV	Si	< 110 >, {111}, {110}	idem	2 μ	C. axial \times plan.	Ei66
	3,55 MeV	Mica	-	idem	30 μ	Can. axial pequena	Ham66
3 MeV	Au	-	idem	5000-7000 Å	Estr. fina ¹	Lu66	
60 MeV	-	idem	idem	idem	idem	idem	
3-11 MeV	Si	várias	idem	25-50 μ	Dep. ang.; C. axial \times plan.	Ap67	
2 MeV	Si	várias	idem	20 μ	Dep. ang. das comp. de alta/baixa perda	Rem67	
≤222	0,1-1,0 MeV	W	< 110 >, < 111 >, < 100 >	Alcance	-	Freem. eletr.; osc. <i>Z</i> ₁	Erik67a
	0,1-1,0 MeV	W	várias	Alcance	-	Dep. c/ <i>E</i> , orient., esp. óx. sup., <i>T</i> e dose	Erik67b
	3,3-7,8 MeV	Si, Ge, GaAs	< 110 >, < 111 >, < 112 >	Transm.	100-150 μ	Dep. ang. e c/ vel.	Sa67
30 keV	Au	-	idem	92 Å	Estr. fina	Ch68c	
1-5 MeV	Si, Fe, Al ₂ O ₃ , MgO	várias	idem	1-100 μ	Dep. ang.	De68a,b	
≤19	100-500 keV	Si	várias	idem	0,24-1,5 μ	Dep. ang.; danos; c. axial \times plan.; osc. <i>Z</i> ₁	Ei68a
	0,4 MeV	Au	várias	idem	1200-1650 Å	Dep. ang.; estr. fina	Gi68a
	0,8MeV	idem	idem	idem	idem	idem	idem
	116-169 keV	Au	-	idem	765 Å	Freem. eletr. \times nucl.	Ib68
	85 keV	Au	-	idem	350, 1050 Å	Dep. ang.	Mach68
	1,5 MeV	Si	-	idem	10-35 μ	Dep. c/ esp.	Man68
He	2-13 MeV	SiO ₂	-	idem	30-60 μ	Dep. c/ íon e c/ <i>E</i>	Sa68a
He	2,5-14 MeV	AlSb, GaSb, InAs, InSb	[111], [$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$]	idem	25-125 μ	Est. rede blenda de Zn; dep. c/ <i>M</i> ₁ , <i>Z</i> ₁ , <i>E</i>	Sa68b
	6,72 MeV	Ge	-	idem	77 μ	Dep. ang.	Sh 68a
	4,7-6,72 MeV	NaCl, KCl, KBr	-	idem	80-100 μ	Dep. ang.; dep. c/ <i>T</i>	Sh68b

1: Medidas relacionadas com a perda de energia de íons energéticos ao longo de trajetórias canalizadas. ¹A expressão *estrutura fina* significa o tipo de estudo usando a técnica de transmissão em que as trajetórias das partículas não atinge o equilíbrio estatístico em sua passagem através do cristal. Então o estudo detalhado da distribuição em ângulo de emergência e energia permite determinar o potencial que governa o movimento canalizado.

	Energia	Cristal	Direções	Técnica	Espessura	Observações	Ref.
≤ 54	0,2-1,1 MeV	Au	-	idem	500-5000 Å	Osc. Z_1	Bøtt69
	4 MeV	CsI	-	idem	90 μ	Comparação com cálc. de Ap67 e Lun68	Cl69
	3 MeV	Au	{100}, {111}	idem	7000-9000 Å	Estr. fina	Da69
	60 MeV	idem	idem	idem	idem	idem	idem
	1,5 MeV	Si	-	idem	26 μ	Dep. c/T	Fuj69
	6,72 MeV	NaCl	-	idem	80 μ	Dep. c/T	Kon69
	5 MeV	Si	-	idem	60 μ	Probab. de canaliz. planar	Alt70a
	4-8 MeV	Si, Fe, Mo, Ge, W, NaCl, MgO, CsI	-	idem	20-100 μ	Comparação isol./semic./metais	Cl70
	15-60 MeV	Au	-	idem	5000-7000 Å	Dep. c/E ; estr. fina	Da70
	20-28 keV	Au	-	idem	200-300 Å	Dep. c/E	Hi70
	2-54 keV	Au	-	idem	200-1500 Å	Dispersão ("straggling"); estr. fina	Hög70
	idem	idem	idem	idem	idem	idem	idem
	92 keV	Au	< 100 >	idem	500 Å	Dep. ang.	Mach70
	1,5 MeV	NaCl, KCl, KBr, KI	-	idem	10-20 μ	Dep. ang.	Man70
	10 MeV	Au	-	idem	5000 Å	Estr. fina	Ap71
	15-22 MeV	idem	idem	idem	idem	idem	idem
He	0,9-5 MeV	Si	várias	idem	1,5-36 μ	Dep. c/E .	Del71,72
	0,4 MeV	Si	-	idem	5000-7000 Å	Estr. fina	Ei71a
	2 MeV	Au	-	idem	1600-3000 Å	Estr. fina	Lu71
	1,5 MeV	Ge	< 111 >, < 112 >, < 100 >	RBS	-	Decanalização; dep. ang.	Mor71
	0,1-18 MeV	Si	< 110 >, < 111 >, {111}	Transm.	0,3-11 μ	Dep. c/E .	Ei72a
	3,8 MeV	BaTiO ₃	-	idem	3-20 μ	Dep. ang.; efeitos de ferroeletricidade	Ge72a,b
	1,8 MeV	Au	-	idem	2750 Å	Estr. fina	Gi72a
	0,7 - 1,6 MeV	Si	< 111 >, < 110 >	RBS	1-4 μ	Dep. ang.	Götz74
	Si	-	{111}	Transm.	0,25 μ	Perda canalizada > aleatória	Hol76
	80-300 keV	Si	< 111 >, < 110 >, < 100 >	RBS	≈600 Å	Dep. c/E .	Cemb77
	2 MeV	Si	< 100 >	Transm.	8800 Å	Dep. ang.	Jin86
	200 keV	Si, Ge, GaAs	< 100 >, < 110 >	Alcance	-	Comparação entre cristais e orient.	Wi87
	80-700 keV	Si	< 100 >	Alcance	-	Dep. c/E .	Rain91
	80-700 keV	Si	< 100 >, < 110 >	Alcance	-	Dep. c/E .	LaFer92
	0,5-5 MeV	Si	< 100 >	Alcance	-	Dep. c/E .; ef. isotópico	Bog93
	625 keV	Si	várias	Transm.	1,2 μ	Dep. ang.	Dygo94
	2,5 MeV	Si	várias	Transm.	0,74; 1,4 μ	Dep. ang.	Bosh95

Apêndice C

ALGORITMO PARA "EXTRAÇÃO" DA CONTRIBUIÇÃO DAS PARTÍCULAS CANALIZADAS PARA O ESPECTRO DE RBS DE CANALIZAÇÃO.

De acordo com a seção 4.4, a fração total de partículas retroespalhadas e detectadas com uma energia E_1 é dada pela contribuição de:

(a) partículas que, antes de ser retroespalhadas, são decanalizadas (segundo, provavelmente, após o desvio, trajetórias aleatórias) e

(b) partículas que ou são retroespalhadas dentro do canal ou atravessam toda a espessura da camada superficial cristalina de Si sem ser decanalizadas, penetrando na camada enterrada de SiO_2 .

A fim de avaliar a eq.(4.19), temos primeiro de obter:

$$E_c(x') = \begin{cases} KE_0 - [S_c]x', & \text{for } x' \leq t \\ KE_0 - [S_c]t - [S]^{SiO_2}(x' - t), & \text{for } x' > t, \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

com K sendo o fator cinemático do Si, E_0 , a energia do feixe incidente, t , a espessura da camada cristalina e o fator de perda de energia $[S_c]$

$$[S_c] \equiv \frac{K}{\cos \theta_1} \left(\frac{dE}{dx} \right)_c + \frac{1}{\cos \theta_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_r^{saída}, \quad (\text{C.2})$$

para a camada de Si cristalina. Aqui, θ_1 e θ_2 são os ângulos entre o feixe e a normal da amostra e entre a normal da amostra e a direção do detetor, respectivamente; $\left(\frac{dE}{dx} \right)_c$ é a perda de energia específica canalizada (a ser determinada) e $\left(\frac{dE}{dx} \right)_r^{out}$, a perda de energia para direções aleatórias ao longo do caminho de saída (para o presente caso, $\theta_1 = \Psi$ and $\theta_2 = \theta_{out}$). O fator $[S]^{SiO_2}$ é similar à expressão C.2, mas para a camada de SiO_2 .

A probabilidade de retroespalhamento para a fração canalizada do feixe é dada por

$$P_{sc}^c(x')dx' = N^c(x') \frac{d\sigma}{d\Omega}(E')dx', \quad (\text{C.3})$$

sendo $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ a seção de choque diferencial de retroespalhamento de Rutherford e N^c , a densidade de átomos de Si "vista" pela fração canalizada dos íons. a energia E' imediatamente antes do retroespalhamento nesse caso é

$$E' = \begin{cases} E_0 - \left(\frac{dE}{dx}\right)_c \frac{x'}{\cos\theta_1}, & \text{for } x' \leq t \\ E_0 - \left(\frac{dE}{dx}\right)_c \frac{t}{\cos\theta_1} - \left(\frac{dE}{dx}\right)_{in}^{SiO_2} \frac{x'-t}{\cos\theta_1}, & \text{for } x' > t. \end{cases} \quad (C.4)$$

Supomos, agora, que a probabilidade de decanalização diferencial $d\chi$ a uma profundidade ξ é proporcional à fração de partículas canalizadas:

$$d\chi(\xi) = \lambda(1 - \chi)d\xi, \quad (C.5)$$

onde λ é a taxa de decanalização. Usando as expressões para $E_c(x')$ (C.1), P_{sc}^c (C.3) e χ (C.5) na eq.(4.19), obtemos a seguinte expressão para $f_c(E_1)$:

$$f_c(E_1) = \begin{cases} \frac{N_{Si}^{SiO_2}}{[S]_{Si}^{SiO_2}} \frac{d\sigma}{d\Omega_0} \frac{e^{-\lambda t}}{\left(1 - \frac{1}{E_0 \cos\theta_1} \left[\left(\frac{dE}{dx}\right)_c t + \left(\frac{dE}{dx}\right)_{in}^{SiO_2} \frac{KE_0 - E_1 - [S_c]t}{[S]_{Si}^{SiO_2}} \right] \right)^2}, & \text{for } E_1 \leq KE_0 - [S_c]t \\ 0, & \text{for } E_1 > KE_0 - [S_c]t \end{cases}, \quad (C.6)$$

onde $\frac{d\sigma}{d\Omega_0} \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega}(E_0)$ e $N_{Si}^{SiO_2}$ é a densidade parcial de Si em SiO₂.

Referindo-se à expressão 4.20, a energia detetada de uma partícula que é decanalizada em x'' e retroespalhada em $x \geq x''$ é escrita como

$$E(x, x'') = KE_0 - [S_r]x + K\Delta S_{eff} \cdot x'', \quad (C.7)$$

onde $[S_r]$ tem uma definição similar a C.2, mas com $\left(\frac{dE}{dx}\right)_r^{entrada}$ no lugar de $\left(\frac{dE}{dx}\right)_c$

$$\Delta S_{eff} \equiv \frac{\left(\frac{dE}{dx}\right)_r^{entrada} - \left(\frac{dE}{dx}\right)_c}{\cos\theta_1}. \quad (C.8)$$

para a camada de Si. A probabilidade de retroespalhamento para a fração decanalizada do feixe é também dada por

$$P_{sc}(x, x'')dx = N(x) \frac{d\sigma}{d\Omega}(E)dx, \quad (C.9)$$

sendo N a densidade parcial de átomos de Si "vista" pela fração decanalizada dos íons (N_{Si} para a camada de Si e $N_{Si}^{SiO_2}$ para a de SiO₂).

$$E = E_0 - \left(\frac{dE}{dx} \right)_r^{entrada} \frac{x}{\cos \theta_1} + \Delta S_{eff} \cdot x'' . \quad (C.10)$$

Combinando eqs.(C.5),(C.7), (C.9) e (4.20), obtemos:

$$f_d(E_1) = \frac{\exp(\lambda b) \frac{d\sigma}{d\Omega_0}}{[S_r]} \begin{cases} N_{Si}^{SiO_2} [I(\frac{t+b}{c}) - I(\frac{b}{c})], & \text{for } E_1 < KE_0 - [S_r]t \\ N_{Si} [I(t) - I(\frac{b}{c})] + N_{Si}^{SiO_2} [I(\frac{t+b}{c}) - I(t)], & \\ \text{for } KE_0 - [S_r]t \leq E_1 < KE_0 - [S_c]t \\ N_{Si} [I(\frac{b}{c-1}) - I(\frac{b}{c})], & \text{for } E_1 \geq KE_0 - [S_c]t \end{cases} \quad (C.11)$$

onde

$$I \equiv \int dx \frac{\exp(-\lambda cx)}{(1-ax)^2}, \quad (C.12)$$

$$a \equiv \frac{\left(\frac{dE}{dx} \right)_r^{entrada}}{E_0 \cos \theta_1}, \quad (C.13)$$

$$c \equiv \frac{[S_r]}{K \cdot \Delta S_{eff}}, \quad (C.14)$$

and

$$b(E_1) \equiv \frac{KE_0 - E_1}{K \cdot \Delta S_{eff}}. \quad (C.15)$$

Convolvendo as expressões C.6 e C.11 com uma distribuição que descreva a dispersão em energia das partículas do feixe e a resolução finita do sistema de detecção, podemos ajustar o espectro experimental e obter $\left(\frac{dE}{dx} \right)_c (\Psi)$ a partir do procedimento de ajuste. Deve ser enfatizado que, no procedimento de ajuste acima, os únicos parâmetros livres são o poder de freamento canalizado $\left(\frac{dE}{dx} \right)_c$ e a taxa de decanalização (constante) λ .

Apêndice D

PUBLICAÇÕES RELACIONADAS COM ESTE TRABALHO

Stopping Power and Charge Equilibration Process for Channeled He Ions along $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ Directions of Si Crystal

J.H.R. dos Santos, P.L. Grande, H. Boudinov and M. Behar ^a

^aInstituto de Física - UFRGS, C. P. 15051, 91501-970 Porto Alegre, RS, Brasil.

This contribution presents measurements of the stopping powers of channeled He along $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ of Si crystal directions with energies ranging between 380 and 800 keV. In addition we report results on the charge equilibration process of He⁺ and He⁺⁺ ions at 380 keV along the Si $\langle 100 \rangle$ direction.

1. INTRODUCTION

Many studies of atomic surface structures [1,2], defect profile distributions [3] and deep ion implantations [4] demand an accurate knowledge of stopping powers of channeled ions. In the last three decades many results concerning the energy loss of channeled ions [5-11] have been reported in the literature. However most of them deal with channeled protons along the main axes of Si and less with He in Si, in particular for low incident energies ($E \leq 1$ MeV). Moreover the experimental and theoretical analysis of the stopping power of channeled ions turns out to be a complex task due to uncertainties on the impact parameter dependence of the energy loss, the charge state distributions and on the trajectories of the channeled ions.

With few exceptions [12,13] the energy loss of channeled ions has been performed by measuring the final energy of the transmitted ions through a thin single crystal. In spite of many advantages of this method, it strongly relies on the preparation of homogeneous self-supported targets. In order to measure the energy loss for heavy projectiles or even for protons at low energies, extremely thin crystals should be employed. This fact makes difficult the use of the transmission geometry technique.

In this contribution we report energy-loss measurements of channeled He ions along the Si $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ directions with energies ranging between 380 and 800 keV. There is a well quoted work by Eisen et al.[7] done in the $\langle 110 \rangle$

direction, but, to our knowledge, no systematic works have been performed in the $\langle 100 \rangle$ direction (except for two energy points [14,15]). Moreover we propose a very simple procedure of measuring the energy loss under channeling conditions by using the standard Rutherford Backscattering technique (RBS). For this sake we have used a SIMOX target [16] from which the channeled energy loss can be directly obtained (as will be described below). This procedure also allows the determination of the pre-equilibrium stopping power and the corresponding charge equilibration distance.

2. EXPERIMENTAL PROCEDURE AND DATA ANALYSIS

Three sets of thin Si single crystals of 1800, 800 and 300 Å were used in the present experiment. The SIMOX samples consisted of a thin Si $\langle 100 \rangle$ crystal layer on top of a 5000 Å SiO₂ buried layer build in a $\langle 100 \rangle$ Si wafer. The samples were prepared at IBM, T. J. Watson Research Center, New York, and were thinned by thermal oxidation and chemical etching. For each experiment the sample was cleaned and etched to remove the native oxide film on the surface using 10% HF just before RBS measurements. The samples were mounted on a three axis goniometer with a 0.005° precision. The He beam with an angular divergence better than 0.03° was produced using the 400 kV ion implanter of the Institute of Physics, Porto Alegre. The energy measurements were carried out using the beam impinging to the sample at channeled and random directions. The

backscattered He-particles were detected by a Si surface barrier detector placed at 160° with respect to the beam direction. The overall resolution of the detection system was better than 12 keV. The energy difference between the Si/SiO₂ interface positions in the random and channeled spectra gives the energy lost in the path before the backscattering. Besides the energy-loss values, the RBS technique also provides simultaneously the information about the dechanneling that occurs when the ions traverse the sample.

2.1. Energy-Loss Measurements

A typical RBS random spectrum taken with 760 keV He⁺⁺ is shown in Fig. 1 together with the corresponding $\langle 100 \rangle$ channeled one. E_t^c and E_t^r are the detected energies of the backscattered particles at the Si/SiO₂ interface in the channeled and random incidence, respectively.

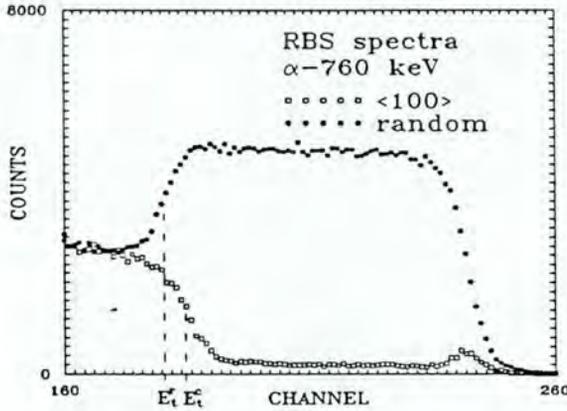


Figure 1. Random and channeled $\langle 100 \rangle$ SIMOX spectra taken at 760 keV.

The detected energies (using the *mean energy approximation* [17]) are:

$$E_t^c = K[E_0 - S_c(\bar{E}_{in}^c)l_{in}^c] - S_r(\bar{E}_{out}^c)l_{out}^c \quad (1)$$

and

$$E_t^r = K[E_0 - S_r(\bar{E}_{in}^r)l_{in}^r] - S_r(\bar{E}_{out}^r)l_{out}^r, \quad (2)$$

where the superscripts *c* and *r* refer to the channeled and random incidences respectively. *K* is the kinematic factor for Si, E_0 , the incident beam

energy, S_c , the channeled specific energy loss (to be determined), S_r , the random one [18]. l_{in} and \bar{E}_{in} (l_{out} and \bar{E}_{out}) are the length and mean energy of the inward (outward) path (see appendix).

Combining equations 1 and 2, we obtain

$$S_c(\bar{E}_{in}^c) = \left[\frac{K E_0 - E_t^c}{K E_0 - E_t^r} \left(\beta_1 + \frac{\cos\theta_1^c}{\cos\theta_1^r} \right) - \beta_2 \right] \times S_r(\bar{E}_{in}^r), \quad (3)$$

with

$$\beta_1 \equiv \frac{S_r(\bar{E}_{out}^r) \cos\theta_1^c}{K S_r(\bar{E}_{in}^r) \cos\theta_2^r}, \quad (4)$$

$$\beta_2 \equiv \frac{S_r(\bar{E}_{out}^c) \cos\theta_1^c}{K S_r(\bar{E}_{in}^r) \cos\theta_2^r}, \quad (5)$$

θ_1 and θ_2 are the angles between the beam and the sample normal and between the sample normal and the detector direction, respectively.

We note that according to eq.(3) the determination of the crystal thickness is not necessary. The energy loss for channeled particles is obtained from the corresponding one in a random direction, geometrical factors and the detected energies E_t^c and E_t^r .

It should be stressed that the measurements done with the different samples (1800, 800 and 300 Å) have given the same results within the experimental errors (to within 4 %).

2.2. Charge Equilibration Measurements

The charge state of He penetrating the target fluctuates according to the capture and loss probabilities which depend on the ion velocity. After a short traversed distance, an average charge state equilibrium is reached. In a random direction (at the present energies), this equilibration process probably requires passage through few atomic layers [20]. However, in a channeled crystal direction, the equilibrium should take place at larger distances since in this case the charge-exchange cross-sections are strongly reduced. Here we measure the pre-equilibrium energy loss, i.e., the energy loss which takes place during the charge equilibration process. This effect can be measured by using two different incoming charge states of He, namely He⁺ and He⁺⁺ under channeling conditions.

The charge exchange experiments were performed with He⁺ and He⁺⁺ ions at 380 keV using the Rutherford backscattering technique in the < 100 > and random directions. The difference in the SiO₂ front edge positions as determined with the He⁺ and He⁺⁺ ions gives direct information on the difference in the He⁺ and He⁺⁺ effective stopping powers and hence on the equilibration distance for these ions.

No further cleaning was done in vacuum, so the deposition of hydro-carbon might influence the pre-equilibrium stopping power measurement. In order to attenuate this problem for each measurement the beam spot on the samples was shifted. For each experiment a He⁺, He⁺⁺, He⁺, He⁺⁺ sequence of measurements were performed in order to monitor changes in the surface of the film. In addition several measuring runs were done on different samples (1800 and 800 Å thickness). It was found that the results were reproducible at a 20% level. The pre-equilibrium stopping power has been obtained from the expression

$$\begin{aligned} \Delta E_{pre} &= \Delta E(He^{++}) - \Delta E(He^+) \\ &= \frac{E_i^c(He^+) - E_i^c(He^{++})}{K} \end{aligned} \quad (6)$$

where $\Delta E(He^{++})$ and $E_i^c(He^{++})$ [$\Delta E(He^+)$ and $E_i^c(He^+)$] are the energies lost in the inward path and the detected energy for incoming He⁺⁺ (He⁺) at 380 keV.

3. RESULTS AND DISCUSSION

3.1. Energy-Loss Results

According to the procedure outlined in section 2.1 we have determined the energy loss for channeled He ions along the < 110 > and < 100 > axes of Si. In figure 2 are shown the results of the present experiment corresponding to the < 110 > directions (full circles). Typical minimum yields (χ_{min}) are 2.5 and 5% for < 110 > and < 100 > directions, respectively. In addition are displayed the results of ref. [7] (asterisks) taking the peak of the energy loss spectrum of the transmitted ions through the silicon single crystal. The agreement is good through the whole studied energy

range. However the present values are systematically higher by $\approx 4\%$. At the present we do not have an explanation for this difference.

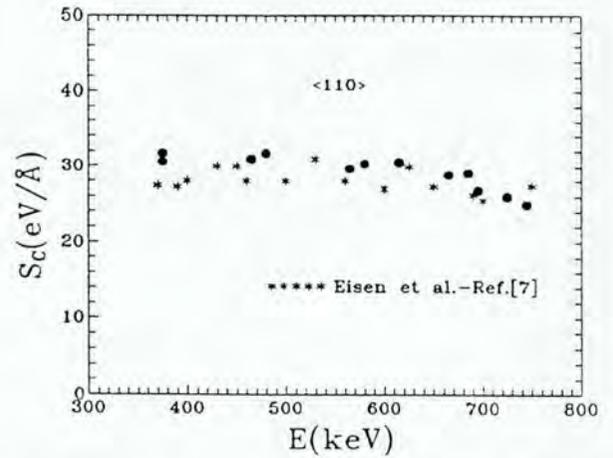


Figure 2. Channeled stopping power values as a function of the He⁺⁺ energy for < 110 > Si direction (full circles). For comparison are shown the results of ref. [7].

Figure 2 shows that both methods of determining the channeled energy loss are equivalent if we consider the peak of the transmitted ions energy-loss. On the other side, one of the drawbacks of the present method is the impossibility of extracting the energy loss for the best channeled ions.

We have also investigated the energy loss for the < 100 > direction in the 350-800 keV energy range. Preliminary results show that in the investigated energy range the channeled stopping power has a broad maximum at about 550 keV. The ratio α between channeled and random stopping powers is also a weakly function of the ion energy. The α values ranges from $\alpha = 0.94$ at $E = 355$ keV and $\alpha = 0.86$ at $E = 775$ keV having a maximum $\alpha = 0.97$ at $E = 500$ keV. The decreasing of the α ratio for increasing energies above 500 keV is due to the contribution of inner shells to the electronic stopping.

3.2. Pre-equilibrium Stopping Results

After several experimental runs using He⁺ and He⁺⁺ incident beams along Si-< 100 > axis we have found that the energy loss for incident He⁺⁺

systematically exceeds the one for incident He^+ by 500 eV. This effect comes from the fact that, at this energy, the electronic stopping of He^{++} is larger than the one for He^+ . The difference between the mean stopping power for incoming He^+ and He^{++} persists until the charge equilibrium is achieved.

Assuming only two possible charge states for He, He^+ and He^{++} , for this energy the He^0 fraction can be neglected, we can solve the rate equations for each charge state fraction as a function of the depth. Then we find that the difference between the stopping powers due to two initial charge states reads

$$\begin{aligned} \Delta E(\text{He}^{++}) - \Delta E(\text{He}^+) &= \\ &= [S(\text{He}^{++}) - S(\text{He}^+)] \Delta l_{\text{equil}}. \end{aligned} \quad (7)$$

with

$$\Delta l_{\text{equil}} = \frac{1}{N(\sigma_c + \sigma_l)} \quad (8)$$

where σ_c and σ_l are the cross sections for electron capture and loss respectively and N is the density of atoms in a crystal direction. Using Plane-Wave-Born Approximation (PWBA) [19] to calculate the energy loss due to the ionization of the valence electrons, we find a ratio of stopping powers between the two charge states equal to about $S(\text{He}^{++})/S(\text{He}^+) = 2.4$. Then the distance of equilibration charge obtained in the present experiment is

$$\frac{500 \text{ eV}}{(1 - \frac{1}{2.4})30 \text{ eV/\AA}} \approx 30 \text{ \AA}. \quad (9)$$

4. CONCLUSIONS

In this work we have measured the energy loss of channeled He ions along $\langle 110 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ axes of Si crystal using the standard RBS technique through the use of SIMOX targets. We have shown by comparing to existing experimental data that this technique yields reliable values for the mean channeled energy loss. With the present technique we were able to identify the pre-equilibrium stopping power due to charge equilibration processes. Our results suggest a few nm for the equilibration charge distance. The study

of the pre-equilibrium stopping power for other incident projectiles and further systematic experiments for the energy loss along the $\langle 100 \rangle$ direction are under progress.

Appendix

The mean energy values used in the eqs.(1)-(5) read:

$$\bar{E}_{in}^r = E_0 - \frac{1}{2} S_r(E_0) l_{in}^r, \quad (10)$$

$$\bar{E}_{out}^r = K[E_0 - S_r(E_0) l_{in}^r] - \frac{1}{2} S_r(K E_0) l_{out}^r, \quad (11)$$

$$\bar{E}_{in}^c = E_0 - \frac{1}{2} S_c(\bar{E}_{in}^c) l_{in}^c, \quad (12)$$

and

$$\bar{E}_{out}^c = \bar{E}_{out}^r + (E_t^c - E_t^r). \quad (13)$$

REFERENCES

1. L. C. Feldman, P. J. Silverman, J. S. Williams, T. E. Jackman, I. Stensgaard, Phys. Rev. Lett. **41**(1978)1396.
2. N. W. Cheung, R. T. Culbertson, L. C. Feldman, D. J. Silverman, K. W. West, J. W. Mayer, Phys. Rev. Lett. **45**(1980)120.
3. Ion Beam Handbook for Material Analysis. Ed. J. W. Mayer and E. Rimini (Pergamon, 1978).
4. M. Weiser, M. Behar, S. Kalbitzer, P. Oberschachtsiek, D. Fink, O. Frech, Nucl. Instrum. and Meth. **B29**(1987)587 and references therein.
5. D. S. Gemmel, Rev. Mod. Phys. **46**(1974)129.
6. B. R. Appleton, C. Erginsoy, W. M. Gibson, Phys. Rev. **161**(1967)330.
7. F. H. Eisen, G. J. Clark, J. Bottiger, J. M. Poate, Rad. Eff. **13**(1972)93.
8. G. Della Mea, A. V. Drigo, S. Lo Russo, P. Mazzoldi, G. G. Bentini, Phys. Rev. Lett. **27**(1971)1194, Rad. Eff. **13**(1972)115; A. Carnera, G. Della Mea, A. V. Drigo, S. Lo Russo, P. Mazzoldi, G. G. Bentini, Phys. Rev. **B17**(1978)3492.
9. J. D. Melvin, T. A. Tombrello, Rad. Eff. **26**(1975)113.

10. P. Gehrman, K. Lenkeit, R. Stolle, *Phys. Status Solidi* **B131**(1985)519.
11. G. G. Bentini, M. Bianconi, R. Nipoti, F. Malaguti, E. Verondini, *Nucl. Instrum. and Meth.* **B53**(1991)1.
12. G. Götz, K. D. Klinge, F. Schwabe, *Exper. Tech. Phys.* **23**(1975)167.
13. F. Cembali, F. Zignani, *Rad. Eff.* **31**(1977)169.
14. H. S. Jin, W. M. Gibson, *Nucl. Instrum. and Meth.* **B13**(1986)76.
15. R. G. Wilson, *J Appl. Phys.* **61**(1987)2489.
16. K. Izumi, M. Doken and H. Ariyoshi, *Electron. Lett.* **14**(1978)593.
17. W. K. Chu, J. W. Mayer, M.-A. Nicolet, *Backscattering Spectrometry* (Academic Press, New York, 1978).
18. D. Niemann, P. Oberschachtsiek, S. Kalbitzer, H. P. Zeindl, *Nucl. Instrum. and Meth.* **B80/81**(1993)37.
19. P. R. Bates, G. Griffing, *Proc. Phys. Soc.* **A66**(1953)1961; the first-order Born calculations were performed for $\text{He}^{9+} + \text{Si}$ with scaled hydrogen-like projectile wave-functions.
20. S. Jans, P. Oberschachtsiek, S. Kalbitzer, M. Behar, *Nucl. Instrum. and Meth.* **B83**(1993)1.



ELSEVIER

Electronic stopping power of $\langle 100 \rangle$ axial-channelled He ions in Si crystals

J.H.R. dos Santos ^a, P.L. Grande ^a, H. Boudinov ^a, M. Behar ^{a,*}, R. Stoll ^b, Chr. Klatt ^b,
S. Kalbitzer ^b

^a Instituto de Física – UFRGS, C.P. 15051, 91540-000 Porto Alegre, RS, Brazil

^b Max-Planck-Institut für Kernphysik, D-9000 Heidelberg, Germany

Abstract

Measurements of the electronic stopping power of He²⁺ ions along the $\langle 100 \rangle$ direction in Si crystal with energies ranging between 200 keV and 4.5 MeV are presented. The Rutherford backscattering technique has been used with SIMOX samples consisting of a Si single-crystal layer on top of a buried layer of 500 nm SiO₂ built into a Si $\langle 100 \rangle$ wafer.

1. Introduction

The slowing down of energetic ions penetrating matter has been exhaustively studied for many years. As a consequence a large number of stopping-power measurements in random directions have been performed for different ion-target combinations [1]. On the other hand, there is much less experimental data on the energy loss of channelled ions [2–8], most of them concerning with channelled protons along the main axes of Si. The experimental and theoretical analysis of the stopping power of channelled ions turns out to be a complex task due to uncertainties in the impact parameter dependence of the energy loss, charge state distribution and the trajectories of the channelled ions. Apart from the underlying basic physics which is involved in the channelling phenomenon many applications such as studies of the atomic structure of surfaces [9,10], defect profiles [11] and deep implantation [12] demand accurate experimental values of stopping powers of channelled ions.

Usually the energy loss of channelled ions has been performed by measuring the final energy of the transmitted ions through a thin single crystal. In spite of many advantages of this method it strongly depends on the preparation of homogeneous self-supported thin single crystals. In order to measure the energy loss for heavy projectiles or even for protons at low energies extremely thin targets should be employed. This requirement makes the use of the transmission geometry difficult and alternative methods have been used in the past [13,14].

In this contribution we report energy-loss measurements of channelled He ions along the $\langle 100 \rangle$ Si direction with energies ranging between 200 keV and 4.5 MeV. To our knowledge there are no systematic measurements for the Si $\langle 100 \rangle$ direction (except for two energy points [15,16]). Moreover we propose a very simple procedure for measuring the energy loss under channelling conditions by using the standard Rutherford backscattering (RBS) technique [17]. For this purpose we have used a SIMOX target [18] from which the channelled energy loss can be obtained directly (as will be described below). Results for the energy loss along the $\langle 110 \rangle$ direction [19] have shown that the present backscattering technique yields channelled stopping values well consistent with the ones obtained in transmission experiments [4].

2. Experimental procedure

Three sets of thin Si single crystals of 1800, 800 and 300 Å were used in the present experiment. The SIMOX samples consisted of a thin Si $\langle 100 \rangle$ crystal layer on top of a 5000 Å SiO₂ buried layer build in a $\langle 100 \rangle$ Si wafer. The samples were prepared at IBM, T.J. Watson Research Center, New York, and were thinned by thermal oxidation and chemical etching. For each experiment the sample was cleaned and etched to remove the native oxide film on the surface using 10% HF just before the RBS measurements. The samples were mounted on a three axis goniometer with a 0.005° precision. For energies lower than 800 keV, a He²⁺ beam was produced using the 400 kV ion implanter of the Institute of Physics, Porto Alegre. For energies ranging from 800 keV to 4.5 MeV the alpha particle beam was provided by the 3 MV tandem accelera-

* Corresponding author. Tel. +55 51 336 8399, fax +55 51 336 1762, e-mail behar@if1.ufrgs.br.

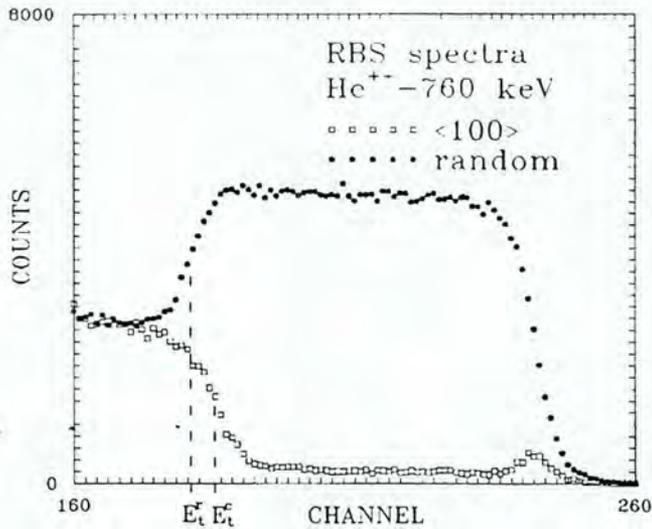


Fig. 1. Random and channelled $\langle 100 \rangle$ Rutherford backscattering spectra of the SIMOX taken at 760 keV.

tor of Max-Planck-Institut für Kernphysik, Heidelberg. In both cases the angular divergence of the He^{2+} beam was better than 0.03° .

The energy measurements were carried out using the beam impinging on the sample at channelled and random directions. The backscattered He particles were detected by a Si surface barrier detector and the overall resolution of the detection system was better than 13 keV. The energy difference between the Si/SiO₂ interface positions in the random and channelled spectra gives the energy lost in the path before the backscattering. Besides the energy-loss values, the RBS technique also provides simultaneously information about the dechanneling that occurs when the ions traverse the sample.

3. Data analysis

A typical RBS random spectrum taken with 760 keV He^{2+} beam is shown in Fig. 1 together with the corresponding $\langle 100 \rangle$ channelled one. E_t^c and E_t^r are the detected energies of the backscattered particles at the Si/SiO₂ interface in the channelled and random incidence, respectively.

The detected energies (using the *mean energy approximation* [17]) are:

$$E_t^c = K [E_0 - S_c(\bar{E}_{in}^c)l_{in}^c] - S_r(\bar{E}_{out}^c)l_{out}^c \quad (1)$$

and

$$E_t^r = K [E_0 - S_r(\bar{E}_{in}^r)l_{in}^r] - S_r(\bar{E}_{out}^r)l_{out}^r \quad (2)$$

where the superscripts c and r refer to the channelled and random incidences, respectively. K is the kinematic factor for Si, E_0 the incident beam energy, S_c the channelled specific energy loss (to be determined), and S_r the random

one [20]. l_{in} and \bar{E}_{in} (l_{out} and \bar{E}_{out}) are the length and mean energy of the inward (outward) path.

Combining Eqs. (1) and (2), we obtain

$$S_c(\bar{E}_{in}^c) = \left[\frac{KE_0 - E_t^c}{KE_0 - E_t^r} \left(\beta_1 + \frac{\cos \theta_1^c}{\cos \theta_1^r} \right) - \beta_2 \right] S_r(\bar{E}_{in}^r), \quad (3)$$

with

$$\beta_1 \equiv \frac{S_r(\bar{E}_{out}^r) \cos \theta_1^c}{KS_r(\bar{E}_{in}^r) \cos \theta_2^r}, \quad (4)$$

$$\beta_2 \equiv \frac{S_r(\bar{E}_{out}^c) \cos \theta_1^c}{KS_r(\bar{E}_{in}^r) \cos \theta_2^r}, \quad (5)$$

θ_1 and θ_2 are the angles between the beam and the sample normal and between the sample normal and the detector direction, respectively.

We note that according to Eqs. (3), (4) and (5) the determination of the Si layer thickness is not necessary. The energy loss for channelled particles is obtained from the corresponding one in a random direction, geometrical factors and the detected energies E_t^c and E_t^r .

It should be stressed that the measurements done with the different samples (1800, 800 and 300 Å) gave the same results within the experimental errors ($\approx 4\%$). In addition several sets of measurements were performed with the same sample and in the same energy range, all the results being reproducible at a $\approx 5\%$ level.

4. Results and discussions

According to the procedure outlined above we have determined the energy loss for channelled He ions along the $\langle 100 \rangle$ axis of Si. Fig. 2 shows our results for the

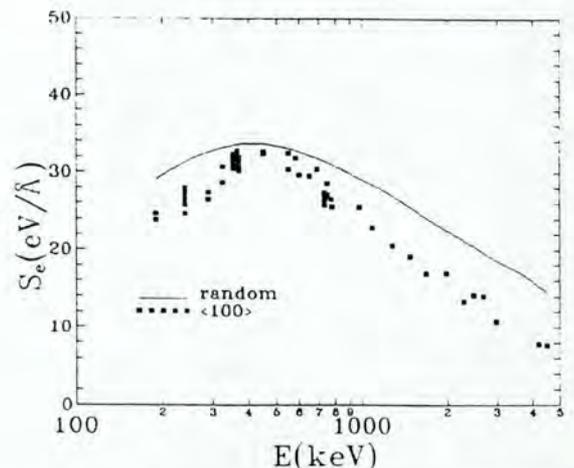


Fig. 2. Channelled stopping power results (squares) as a function of the ion energy for the $\langle 100 \rangle$ Si direction. The solid line corresponds to the random stopping power taken from Ref. [20].

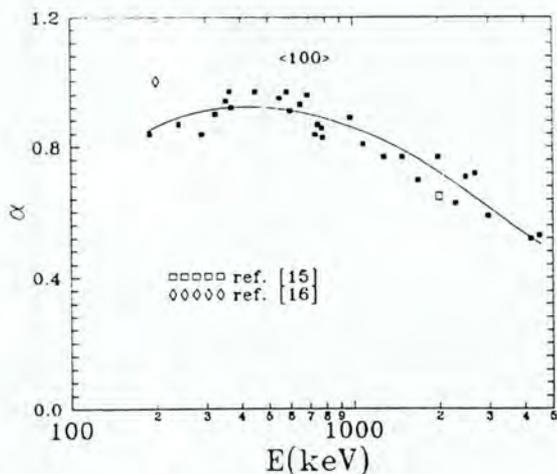


Fig. 3. The ratio α between the random [20] and channelled measured stopping power. The solid line is only a guide to the eyes. The open symbols correspond to data points taken from Refs. [15] and [16].

channelled stopping power as a function of the ion energy for the $\langle 100 \rangle$ Si direction. Typical minimum yields (χ_{\min}) are between 3 and 5%. The scatter in the experimental points is about 4%, which is consistent with our experimental error. The channelled stopping power has a broad maximum at about 500 keV and decreases rapidly with increasing energy going from 30 eV/Å at 550 keV down to 8 eV/Å at 4.5 MeV. An inspection of Fig. 2 also shows that the channelled stopping power almost coincides with the random stopping power [20] at about 450 keV.

The ratio α between channelled and random stopping powers as a function of the ion energy is displayed in Fig. 3. The α values range from $\alpha = 0.80$ at $E = 200$ keV and $\alpha = 0.53$ at $E = 4$ MeV having a maximum $\alpha = 0.97$ at $E = 500$ keV. The existing experimental points for the $\langle 100 \rangle$ direction [15,16] are also included in this figure. As can be observed, the α value from Ref. [15] agrees quite well with the present data. On the other hand, we have found a significant difference with the data point of Ref. [16].

The decrease of the α ratio for energies above 500 keV is due to the increasing contribution of the silicon L inner-shell to the random stopping power. The energy loss corresponding to inner-shell electrons is much more sensitive to the projectile trajectories on channelling conditions. According to the adiabaticity criterion which specifies the upper limit for impact parameters where the energy loss can take place ($b_c = v/I$, where v is the projectile energy, I is the mean excitation energy and all quantities are given in atomic units), the silicon inner-shell L cannot be excited by a well-channelled ion moving along the $\langle 100 \rangle$ direction with energies smaller than about 9 MeV. Therefore, for the present measurements, only the valence electrons of silicon are responsible for the energy loss along the $\langle 100 \rangle$ axial direction of Si.

Assuming that the valence electrons can be handled as

a homogeneous electron gas we can make a quick estimation of the α value for a high energy He^{2+} incidence, e.g. 4 MeV. At this energy, as discussed above, only the valence electrons contribute to the electronic stopping. Therefore, if we take out the inner-shell electrons contribution from the random stopping power, we can obtain the channelled one. At 4 MeV we can use Plane-Wave Born Approximation (PWBA) [21] to calculate the energy loss due to inner-shell electrons of Si. A PWBA calculation using scaled hydrogen-like wave functions (with an effective charge of 6 for the Si L shell electron) yields an electronic stopping of 7.5 eV/Å. Using this value and the corresponding random stopping power of Ref. [20] ($S_c = 16.0$ eV/Å) we find the ratio α of channel to random stopping power of about 0.53, which is in good agreement with the present experimental result ($\alpha = 0.53$). For lower energies the applicability of a first-order treatment to calculate the stopping power for inner-shell electrons turns out to be questionable and a non-perturbative procedure should be adopted. Furthermore, the impact parameter dependence of the energy loss due to the valence electrons as well the charge-state distribution of the projectile should be taken into account.

5. Conclusions

In this work we have measured the energy loss of channelled He ions along the $\langle 100 \rangle$ axis of a Si crystal using the standard RBS technique and SIMOX targets. We provide the first systematic energy-loss results for the $\langle 100 \rangle$ direction for a large energy region which ranges from 200 keV to 4.5 MeV. An estimate of the ratio α between the channelling stopping power and the random one performed at 4 MeV agrees quite well with the experimental data. Further experiments are in progress to study the channelled stopping power for other projectiles with higher charge states.

Acknowledgements

The authors would like to thank Dr. D.K. Sadana from IBM, T.J. Watson Research Center, New York, USA, for supplying the SIMOX samples.

References

- [1] J.F. Ziegler, J.P. Biersack and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids* (Pergamon, New York, 1985).
- [2] D.S. Gemmel, *Rev. Mod. Phys.* 46 (1974) 129.
- [3] B.R. Appleton, C. Erginsoy and W.M. Gibson, *Phys. Rev.* 161 (1967) 330.
- [4] F.H. Eisen, G.J. Clark, J. Bottiger and J.M. Poate, *Radiat. Eff.* 13 (1972) 93.

- [5] G. Della Mea, A.V. Drigo, S. Lo Russo, P. Mazzoldi and G.G. Bentini, *Phys. Rev. Lett.* 27 (1971) 1194, *Radiat. Eff.* 13 (1972) 115;
A. Carnera, G. Della Mea, A.V. Drigo, S. Lo Russo, P. Mazzoldi and G.G. Bentini, *Phys. Rev. B* 17 (1978) 3492.
- [6] J.D. Melvin and T.A. Tombrello, *Radiat. Eff.* 26 (1975) 113.
- [7] P. Gehrman, K. Lenkeit and R. Stolle, *Phys. Stat. Sol. B* 131 (1985) 519.
- [8] G.G. Bentini, M. Bianconi, R. Nipoti, F. Malaguti and E. Verondini, *Nucl. Instr. and Meth. B* 53 (1991) 1.
- [9] L.C. Feldman, P.J. Silverman, J.S. Williams, T.E. Jackman and I. Stensgaard, *Phys. Rev. Lett.* 41 (1978) 1396.
- [10] N.W. Cheung, R.T. Culbertson, L.C. Feldman, D.J. Silverman, K.W. West and J.W. Mayer, *Phys. Rev. Lett.* 45 (1980) 120.
- [11] J.W. Mayer and E. Rimini (eds.), *Ion Beam Handbook for Material Analysis* (Pergamon, New York, 1978).
- [12] A. La Ferla, E. Rimini, A. Carnera, A. Gasparotto, G. Ciavola and G. Ferla, *Radiat. Eff.* 129 (1994) 133 and references therein.
- [13] G. Götz, K.D. Klinge and F. Schwabe, *Exp. Tech. Phys.* 23 (1975) 167.
- [14] F. Cembali and F. Zignani, *Radiat. Eff.* 31 (1977) 169.
- [15] H.S. Jin and W.M. Gibson, *Nucl. Instr. and Meth. B* 13 (1986) 76.
- [16] R.G. Wilson, *J. Appl. Phys.* 61 (1987) 2489.
- [17] W.K. Chu, J.W. Mayer and M.-A. Nicolet, *Backscattering Spectrometry* (Academic Press, New York, 1978).
- [18] K. Izumi, M. Doken and H. Ariyoshi, *Electron. Lett.* 14 (1978) 593.
- [19] J.H.R. dos Santos, P.L. Grande, H. Boudinov and M. Behar, *Proc. 10th Int. Conf. on Ion Implantation Technology*, Catania, Italy, 1994.
- [20] D. Niemann, P. Oberschachtsiek, S. Kalbitzer and H.P. Zeindl, *Nucl. Instr. and Meth. B* 80&81 (1993) 37.
- [21] P.R. Bates and G. Griffing, *Proc. Phys. Soc. A* 66 (1953) 1961.

Electronic stopping power of ^{10}B channeled into the Si <100> axial direction

*J.H.R. dos Santos¹, P.L. Grande¹, H. Boudinov¹, M. Behar¹, R. Stoll²,
Chr. Klatt² and S. Kalbitzer²*

*¹Instituto de Física, UFRGS, Caixa Postal 15051,
91501-970 Porto Alegre, Brasil*

*²Max-Planck Institut für Kernphysik, P.O. Box 103980,
D-69029 Heidelberg, Germany*

Abstract

In the present work we report measurements of ^{10}B stopping powers in channeled Si <100> direction. The measurements were carried out with a SIMOX sample in the energy range of 500-9000 keV using a backscattering method. In the lower energy region (up to 800 keV) the results follow an $dE/dx \propto E^p$ regime with $p = 0.55 \pm 0.05$ in good agreement with the LSS prediction of $p = 0.5$. In addition, the obtained values show a maximum at around 5 MeV, which arises from the maximum contribution of the L shell to the total electronic stopping power. This behavior is in agreement with predictions by recent calculations using the Plane Wave Born approximation.

1. Introduction

The slowing down of energetic ions penetrating the matter has exhaustively been studied for many years. As a consequence, a large number of range measurements on a variety of projectile-target combinations has been performed in order to test current theories [1]. On the other hand, in the same period of time much less stopping-power measurements have been performed and most of them have been done in random directions [1]. Finally, it should be noted that most of the published work on energy loss of energetic ions in channeling directions deals with protons and to a lesser extent with He ions along the main axes of Si.

Accurate knowledge of stopping powers in both random and channeled directions is important from both point of views: the underlying basic physics and practical applications. In the first case the data can test interatomic potentials and/or electronic excitation models used in range and atomic displacement calculations. From the practical point of view the data can be used as input of analytical or Monte-Carlo type of programs that calculate depth distributions and damage produced by ions implanted in channeled and random directions of the matrix.

Usually, energy loss of channeled ions has been determined by measuring the final energy of ions transmitted through thin single crystals. In spite of many advantages of this method, it strongly depends on the preparation of homogeneous self-supporting single crystals. In particular, in order to measure energy loss of ions heavier than protons or He at low or intermediate energies, extremely thin films must be employed.

In the last few years we have used an alternative method in order to determine the stopping of He ions channeled into the main directions of Si [2-4]. For this purpose we have used the standard Rutherford backscattering technique on SIMOX [5] targets. In this way the channeled energy loss can be obtained directly as will be described below. Results for the energy loss along the $\langle 110 \rangle$ direction [2] have shown that this backscattering technique yields channeled stopping powers well consistent with those obtained from transmission techniques.

The stopping power data for ^{10}B in Si is scarce and incomplete. Concerning the channeling data it should be mentioned that the pioneering work of Eisen [6] for ^{11}B in Si was performed in a very narrow energy range using the transmission technique.

Later works [7-9] have used range measurements of ^{10}B implanted in channeled directions in order to obtain in an indirect way the corresponding channeling stopping powers.

Following our theoretical-experimental systematic study [2-4] of He stopping in channeling directions we have investigated the stopping of ^{10}B in Si $\langle 100 \rangle$ direction. This study was performed using the backscattering method in a 500-9000 keV energy range. The present results are compared with the previously published results [6-9] and with current calculations.

2. Experimental procedure

2.1 Measuring conditions

Two different thin single crystals, 750 and 1500 Å thick, were used for the stopping-power measurements in channeling direction. These crystals form part of SIMOX type samples consisting of thin Si $\langle 100 \rangle$ crystal layers on top of 5000 Å SiO_2 buried layers produced in $\langle 100 \rangle$ Si wafers.

The samples were prepared at IBM, T.J. Watson Research Center, New York. They were thinned by thermal oxidation and chemical etching. Then, they were mounted onto a three axes goniometer of 0.005° precision. The experiments were done in the 500-9000 keV energy range. For energies lower than 800 keV, a $^{10}\text{B}^{++}$ beam was produced by the 400 kV ion implanter at Porto Alegre. For energies higher than 800 keV, the boron beam was provided by the 3 MV tandem accelerator at the Max Planck Institut für Kernphysik (MPI.K), Heidelberg. In both cases the angular divergence of ^{10}B beam was better than 0.03° .

The energy loss measurements were carried out using the beam impinging on the sample at channeled and random directions. The backscattered ^{10}B particles were detected by Si surface barrier detectors. At Porto Alegre, the measurements were carried out by using three different backscattering geometries with the Si detector at 165° , 130° and 120° with respect to the incident ^{10}B beam. At Heidelberg, three different detectors were used placed at different geometries, but always subtending an angle of 165° with respect to the impinging beam. The overall resolution of the detection systems at Porto Alegre and Heidelberg was always better than 25 keV. In

addition to the measurements at different geometries, several sets of measurements were performed under the same conditions. In all the cases it was found that the results were reproducible at the 5% level.

The energy difference between the Si/SiO₂ interface positions in the random and channeled spectra gives the corresponding differences in the energy lost in the path before the backscattering. As will be described in the next section, this difference gives the information about the stopping-power in the channeling direction. In addition to energy-loss, the RBS technique simultaneously provides information about the dechanneling of the ions traversing the sample.

2.2 Data analysis

Typical RBS random and channeling spectra in the Si <100> direction for 800 keV and 8 MeV are shown in figures 1(a) and (b). E_c and E_r are the detected energies of the ¹⁰B backscattered particles at the Si/SiO₂ interface in the channeled and random incidence, respectively.

The detected energies (using the mean energy approximation [10]) are:

$$E_c = K \left[E_0 - \left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}_{in}}^c \ell_{in} \right] - \left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}_{out}}^r \ell_{out} \quad (1)$$

and

$$E_r = K \left[E_0 - \left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}'_{in}}^r \ell'_{in} \right] - \left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}'_{out}}^r \ell'_{out} \quad (2)$$

where the apostrophe ' refers to random incidence, K is the kinematic factor, E₀ the incident beam energy, $\left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}_{in}}^c$ and $\left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}_{in}}^r$ the channeled and random specific energy loss, respectively. ℓ_{in} and \bar{E}_{in} (ℓ'_{in} and \bar{E}'_{in}) are length and mean energy of the inward (outward) path.

Combining Eqs. (1) and (2), we obtain

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}_{in}}^c = \left[\frac{KE_0 - E_c}{KE_0 - E_r} \left(\beta_1 + \frac{\cos\theta_1}{\cos\theta'_1} \right) - \beta_2 \right] \left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}_{in}}^r \quad (3)$$

where

$$\beta_1 = \frac{\left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}'_{out}} \cos\theta_1}{K \left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}'_{in}} \cos\theta'_2}, \quad (4)$$

and

$$\beta_2 = \frac{\left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}_{out}} \cos\theta_1}{K \left. \frac{dE}{dx} \right|_{\bar{E}_{in}} \cos\theta_2}; \quad (5)$$

θ_1 and θ_2 are the angles between beam and sample normal and sample normal and detector direction, respectively.

An inspection of equations (3), (4) and (5) shows that for the present backscattering method the determination of the Si crystal-layer thickness is not necessary. This feature makes the technique very attractive. The energy loss for the channeled particles is obtained from geometrical factors, the detected E_c and E_r energies and the specific energy loss in random direction.

The backscattered E_c and E_r energies corresponding to the Si/SiO₂ interface were determined by fitting the channeled and random spectra with an algorithm which in addition to the error function (accounting for particle straggling and detector resolution) contains the Rutherford cross section dependence with energy.

3. Results and discussions

According to the procedure outlined above we have determined the energy loss of channeled ¹⁰B ions along the <100> of Si. Figure 2 shows our results for the channeled stopping power as a function of the ion energy. The channeling stopping power increases from 42.4 eV/Å at about 50 keV/amu to 79.7 eV/Å at around 500 keV/amu. Then, it steadily decreases down to 62 eV/Å at 900 keV/amu. The broad maximum in the channeled stopping power around 500 keV/amu arises from the maximum in the contribution of the L shell to the electronic stopping power. This observation is in agreement with preliminary results obtained with the Plane-Wave

Born Approximation (PWBA) calculations [11] which were done using scaled hydrogen like wave functions.

In the inset of figure 3 are shown the present data points corresponding to the low energy ($E < 800$ keV) interval as a function of E^p . A linear fit through the points gives as a result $p = 0.55 \pm 0.05$ in very good agreement with the prediction $p = 0.5$ of the LSS theory.

In the same figure, and for comparison we have plotted the previous results obtained by Eisen [6], La Ferla et al. [7] and Bogen et al. [8]. The data point of Eisen [6] at 12.8 keV/amu and the lower energy points of La Ferla et al. [7] are out of the present studied energy range. On the other hand, the highest energy point of reference [7] is in good agreement with the present data. It should be stressed that the data of Bogen et al. [8] are systematically higher than the present and previous published data. The reason for this behaviour is unknown. It should be pointed out, however, that the indirect procedure used in reference [8] could be responsible for the observed discrepancies.

In figure 3 we show the ^{10}B random stopping power as extracted from ref. 10 (full line) as well as the α ratio between the channeled and random stopping powers (full circles). It can be observed that the α ratio is weakly dependent on the ion energy. Its value ranges from 0.6 at 500 keV, increases up to $\alpha = 0.82$ at $E = 5000$ keV and decreases to 0.72 at 9000 keV.

4. Conclusions

In the present work, we report experimental results of ^{10}B stopping-powers in Si $\langle 100 \rangle$ direction by using a backscattering technique.

The ^{10}B stopping-power in the Si $\langle 100 \rangle$ direction shows two main features: First, in the low energy region ($E < 800$ keV) they follow an $dE/dx \propto kE^p$ regime with $p = 0.55 \pm 0.05$. This value is very near to the LSS predicted one of $p = 0.5$ and in fair agreement with the result deduced by La Ferla et al. [7] from their experimental data ($p = 0.469 \pm 0.01$). Second, the high energy data ($E > 1500$ keV) show a maximum around 5000 keV, which arises from the maximum in the contribution of the Si L shell to the electronic stopping power. This assumption is corroborated by preliminary PWBA calculations.

References

- [1] J.F. Ziegler, J.P. Biersack and U. Littmark, *The Stopping and Ranges in Solids*, Vol. 1 (Pergamon Oxford, 1985).
- [2] J.H.R. dos Santos, P.L. Grande, H. Boudinov and M. Behar, *Proceedings of the Ion Implantation Technology 94 Conference*. S. Coffa, G. Ferla, F. Priolo, E. Rimini (eds.) pag. 711.
- [3] J.H.R. dos Santos, P.L. Grande, H. Boudinov, M. Behar, Chr. Klatt and S. Kalbitzer, *Nucl. Instrum. and Meth. B* **106** (1995) 51.
- [4] J.H.R. dos Santos, P.L. Grande, M. Behar, H. Boudinov and G. Schiwietz, to be published in *Phys. Rev. B*.
- [5] K. Izumi, M. Doken and H. Ariyoshi, *Electron. Lett.* **14** (1978) 593.
- [6] F.H. Eisen, *Canad. J. of Phys.* **46** (1968) 561.
- [7] A. La Ferla, G. Galvagno, V. Raineri, R. Setola, E. Rimini, A. Carnera and A. Gasparotto, *Nucl. Instrum. and Meth. B* **66** (1994) 339.
- [8] S. Bogen, L. Gong, L. Frey and H. Ryssel, *Nucl. Instrum. and Meth. B* **80/81** (1993) 659.
- [9] V. Raineri, G. Galvagno, E. Rimini, J.P. Biersack, T. Nakagawa, A. La Ferla and A. Carnera, *Rad. Eff. and Def. in Sol.* **116** (1991) 211.
- [10] W.K. Chu, J.W. Mayer and M.A. Nicolet, *Backscattering Spectrometry* (Academic Press, New York, 1978).
- [11] P.L. Grande, private communication.

Figure Captions

Figure 1a) RBS random and channeling spectra in Si <100> direction for 800 keV ^{10}B ions. E_c and E_r are the detected energies of the backscattered particles at the Si/SiO₂ interface in the channeling and random directions, respectively.

Figure 1b) Similar to 1a) but for ^{10}B ions at 8 MeV of energy.

Figure 2. Channeling stopping powers of ^{10}B in Si <100> as a function of the energy. Full circles corresponds to the present results (the dashed line is only to guide the eye). Full line are the data of Bogen et al. [8]. Squares corresponds to the data of La Ferla et al. [7]. Triangle is the data point of Eisen [6]. In the inset are shown the present low energy data points as a function of E^p . The straight line is a fit trough the experimental data with $p = 0.55 \pm 0.01$.

Figure 3. The full line represents the random stopping power of ^{10}B in Si. The full circles represent the α ratio between the channeling and the corresponding random stopping powers (the dashed line is only to guide the eye).

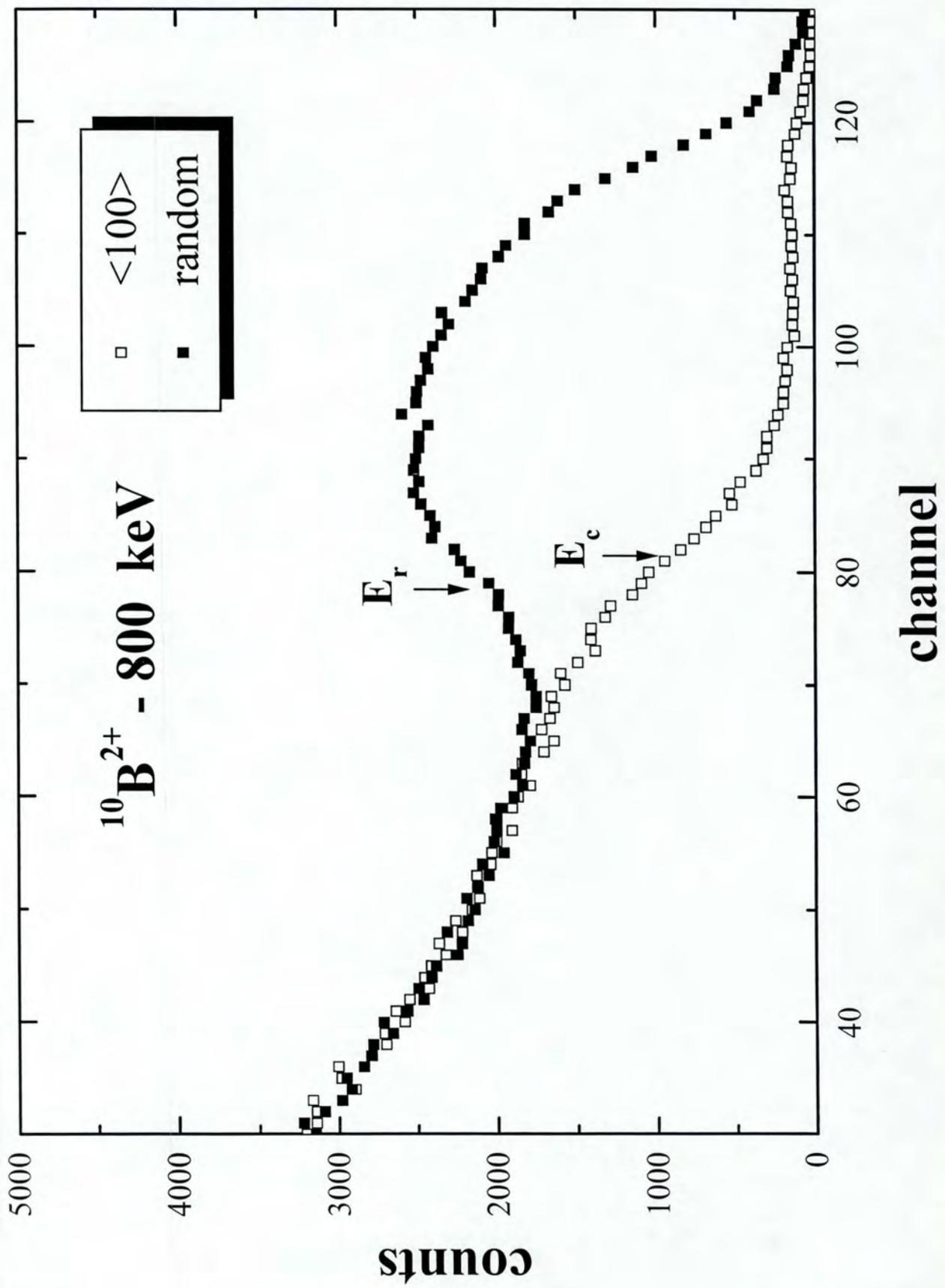
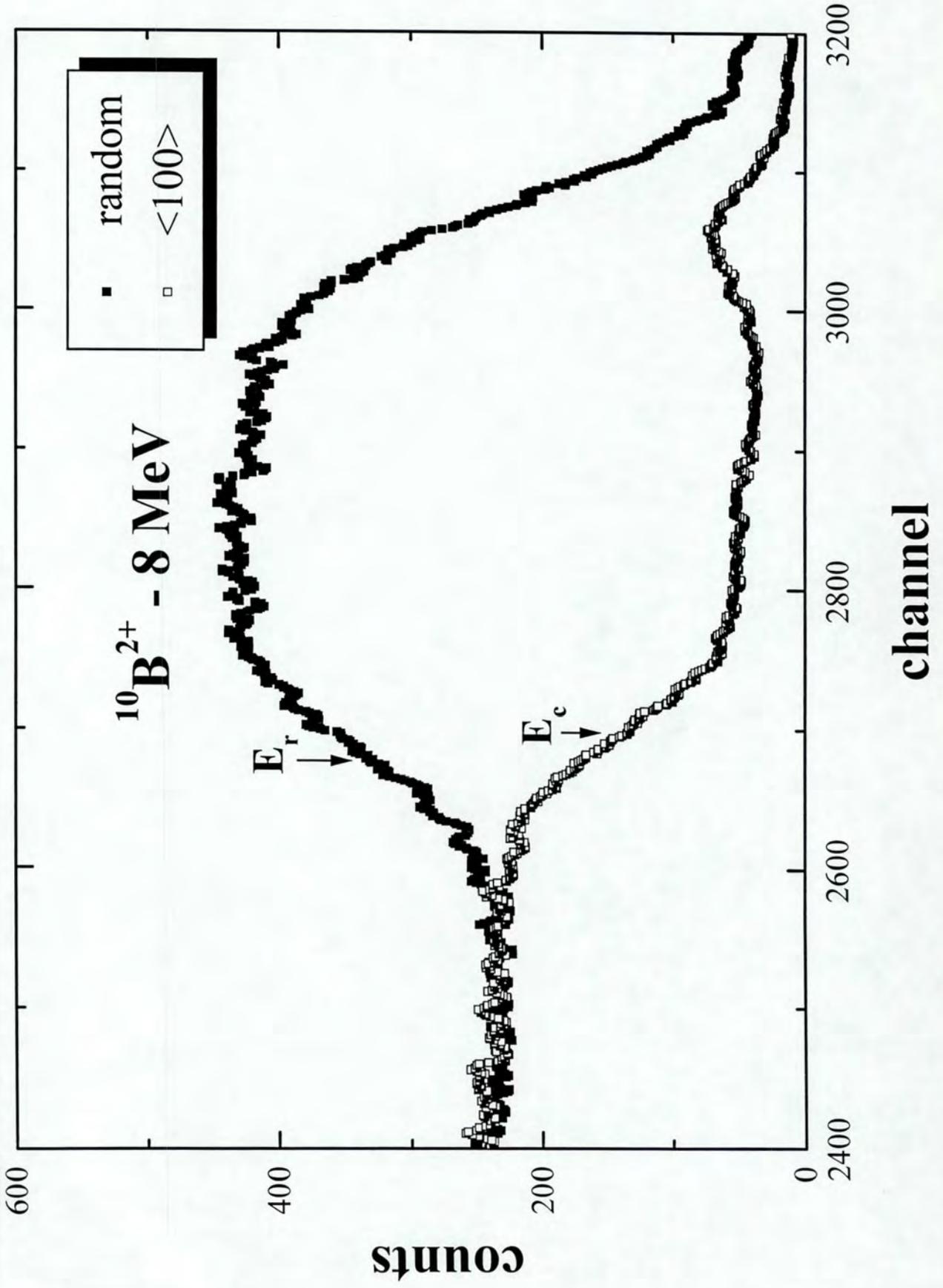


Fig. 1a



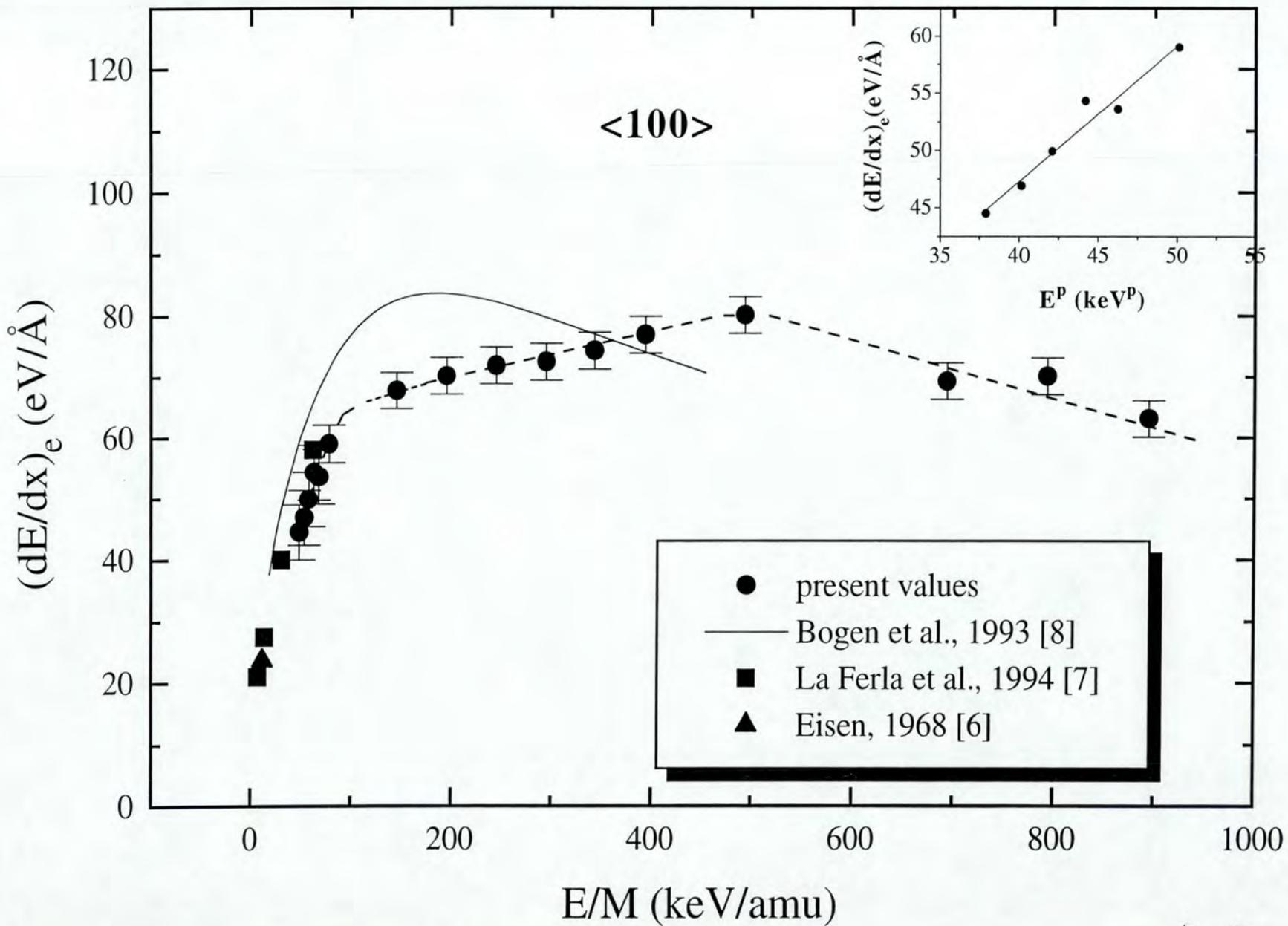


Fig. 2

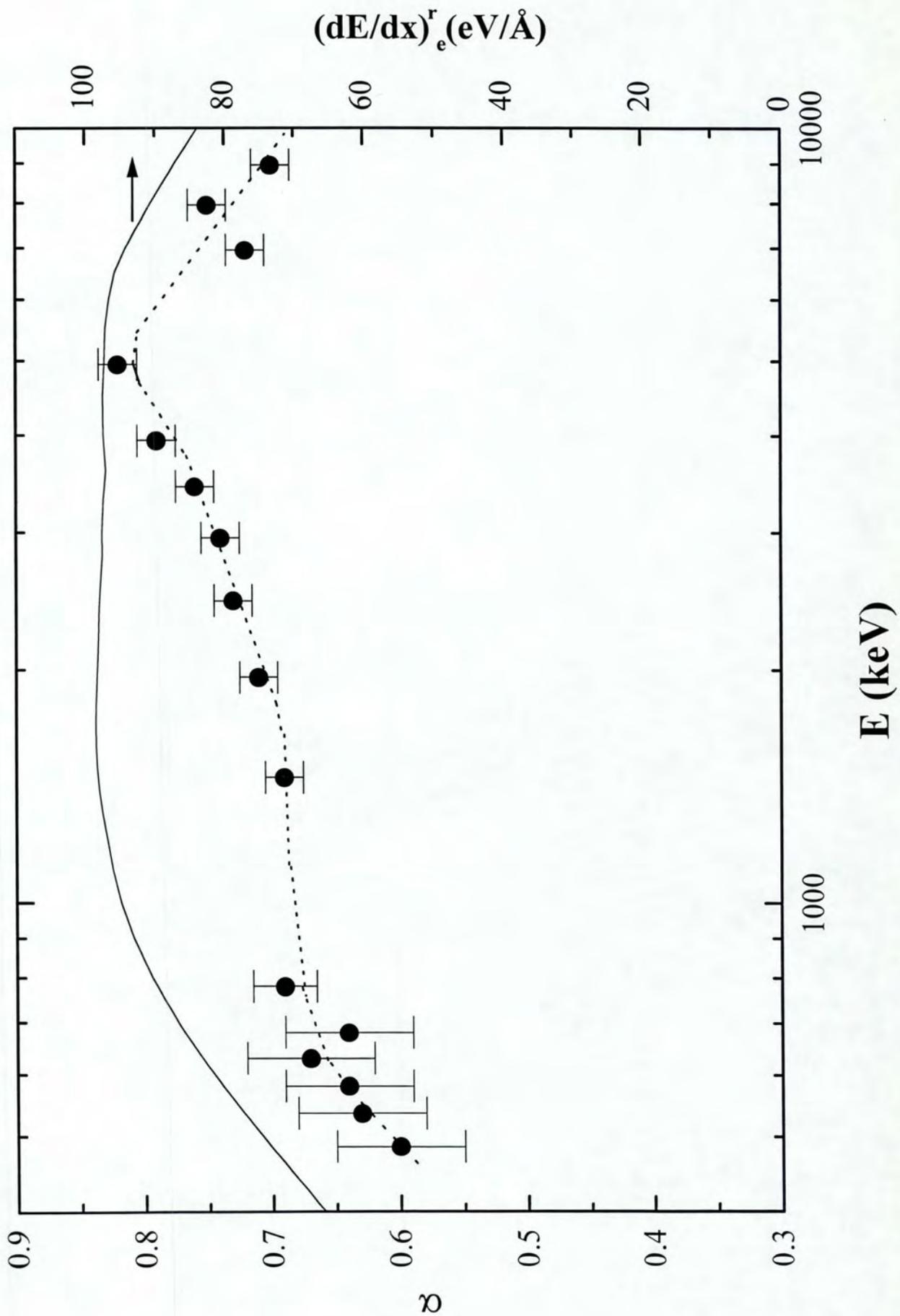


fig. 3

Angular dependence of the electronic energy loss of 800-keV He ions along the Si(100) direction

J. H. R. dos Santos, P. L. Grande, M. Behar, and H. Boudinov

Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Avenida Bento Gonçalves 9500, 91501-970, Porto Alegre, Brazil

G. Schiwietz

Bereich F, Hahn-Meitner-Institut Berlin, Glienicke Strasse 100, D-14109 Berlin, Germany

(Received 12 June 1996; revised manuscript received 11 September 1996)

We present measurements of the stopping power of 800-keV ^4He ions channeled along the Si(100) axis, as a function of the incidence angle. We compare the experimental results with theoretical calculations by using the impact-parameter-dependent energy loss obtained from the solution of the time-dependent Schrödinger equation through the coupled-channel method. This nonperturbative calculation provides reliable energy-loss results which are in good agreement with the experimental results. [S0163-1829(97)08607-4]

PACS number(s): 61.85.+p, 34.50.Bw, 34.10.+x

I. INTRODUCTION

The energy loss of energetic ions moving along the major directions of crystals has been studied for many years. In addition to the underlying physics which is involved in the channeling phenomenon, many applications such as studies of atomic surfaces,^{1,2} location of foreign atoms,^{3,4} defect profiles^{5,6} and deep implantation⁷ demand accurate knowledge of He stopping powers of channeled ions. However, a full analysis of the stopping of channeled ions turns out to be a complex task because it requires a precise description of both the electronic energy loss as a function of impact parameter for different projectile charge states, and also the ion flux distribution across the channel.

Measurements of the channeling energy loss as a function of the incidence angle provide information on the impact-parameter dependence of the electronic energy loss. There are very few measurements of the angular dependence of the electronic energy loss under channeling conditions.^{8,9} All of them were performed at high energies, where the energy losses due to charge-exchange processes are of minor importance. Here we study the angular dependence of the electronic stopping power for channeled ions in silicon from the experimental as well as theoretical points of view with He projectiles at 800 keV. This energy is near the stopping power maximum where charge-exchange processes occur, and only nonperturbative models are able to give reliable energy-loss values.

Early energy-loss models are based on different approaches: the local-density approximation,¹⁰ the local stopping analysis,¹¹ approximations of first-order theory for inner¹² and outer shells,^{13,14} and combinations of these approaches.⁹ A full first-order calculation was only recently used to describe the impact-parameter dependence of the electronic energy loss arising from inner-shell ionization of the target.¹⁵ Such a treatment is reliable for light projectiles at velocities large compared to the mean orbital velocities of the target electron involved. Nowadays the computational power has reached a level where such *ab initio* calculations may replace previous semiempirical formulas.¹⁶ Currently there is only one model that yields reliable

impact-parameter¹⁷ and scattering-angle¹⁸ dependencies for heavier projectile as well as at lower incident energies (for localized bound states).

The channeled ion trajectories are usually obtained either by analytical models based on the statistical equilibrium assumption,¹¹ or by Monte Carlo simulations.¹⁹ Both models yield similar results for the ion flux distribution for depths larger than ≈ 100 nm. A full treatment of ion channeling including a reliable energy-loss model, channeled ion trajectories, and projectile charge distributions is still lacking, and this work includes the first steps of such a treatment.

In this paper, we present measurements of the azimuthally averaged energy loss as a function of the ion incidence angle for 800-keV He ions along the Si(100) direction by using the backscattering technique described in Ref. 20. The basic principles behind the backscattering experiments are discussed in Sec. II. The results from the axial channeling measurements are presented in Sec. III. We compare our experimental results with theoretical calculations based on an atomic treatment of inner-shell electrons of Si. Since the energy loss to inner-shell electrons is strongly dependent on the trajectory distribution under channeling conditions, a reliable energy-loss model for these electrons must be adopted. Here we use the coupled-channel method^{21,22} in order to calculate the impact parameter dependence of the electronic energy loss for each charge state of the He ion in Si. This method is far more precise than the first-order calculations which have mostly been used in the literature. The theoretical procedure (coupled-channel method, charge-exchange treatment and ion flux distribution) used here to describe the angular dependence of channeled stopping power is discussed in Sec. IV. Finally, in Sec. V, the theoretical calculations obtained from the coupled-channel method are presented and compared to the experimental results.

II. EXPERIMENTAL PROCEDURE

In previous experiments, the energy loss of channeled ions has usually been determined by measuring the final energy of the ions transmitted through a thin single crystal. In spite of the many advantages of this method, it strongly de-

depends on the preparation of homogeneous, self-supported, thin single crystals. In order to measure the energy loss for heavy projectiles or even for protons at low energies, extremely thin targets should be employed. This requirement complicates the use of the transmission geometry, and alternative methods have been used in the past.^{23,24}

Here we use the experimental procedure described in Ref. 20 for measuring the energy loss under channeling conditions by using the standard Rutherford backscattering technique RBS.²⁵ We used a SIMOX target²⁶ from which the channeled energy loss can be obtained almost directly. Besides the energy loss values, the RBS technique simultaneously provides information about the dechanneling that occurs when the ions traverse the sample. Previous results for the energy loss of well-channeled He ions in Si along the $\langle 110 \rangle$ direction²⁷ have shown that the present backscattering technique yields channeled stopping power values that are consistent with those obtained from transmission experiments.²⁸

The SIMOX sample used in the present experiment consisted of a 1500-Å Si $\langle 100 \rangle$ crystal layer on top of a 5000 Å SiO₂ layer on a $\langle 100 \rangle$ Si wafer. The sample was prepared at the IBM T. J. Watson Research Center, New York, and, as revealed by transmission electron microscopy analysis, the interface was sharp (less than 50 Å of roughness), and the interface near region did not show any significant level of extended defects. The sample was thinned by thermal oxidation and chemical etching and, before each RBS experiment, the sample was cleaned and etched using 10% HF to remove the native surface oxide film. The sample was mounted on a three-axis goniometer with a 0.005° precision. The 800-keV He²⁺ beam was produced using the 400-kV ion implanter of the Institute of Physics, Porto Alegre. The He²⁺ beam divergence was less than 0.03° full width.

The measurements were carried out with the beam impinging on the sample at channeling and random directions. In what follows we are going to take as references the $\langle 100 \rangle$ axis ($\Psi = 0$) and the $\{100\}$ plane ($\phi = 0$). Based on a recent study,²⁹ we have chosen as a random direction the one defined by $\Psi = 6^\circ$ and $\phi = 15^\circ$. For the Si $\langle 100 \rangle$ direction, RBS spectra were recorded for several Ψ angles ranging between -1.5° and $+1.5^\circ$ (in 0.1° steps). In addition, and in order to average out planar channeling effects, we repeated the measurements at five different azimuthal angles ($\phi = 15^\circ, 26^\circ, 37^\circ, 56^\circ, \text{ and } 67^\circ$). Then we have taken the average value corresponding to each Ψ angle. The backscattered He particles were detected by a Si surface barrier detector placed at 165° with respect to the incident beam. The overall resolution of the detection system was better than 13-keV full width at half maximum.

Typical RBS energy spectra taken with a 800-keV He²⁺ beam at $\Psi = 0.5^\circ$ and 0.7° tilt angles are shown in Fig. 1 together with RBS spectra for random and channeling ($\Psi = 0.0^\circ$) directions. The channeling spectrum shows several features. First, the backscattering minimal yield χ_{\min} (Ref. 25) corresponding to the near Si surface is $\chi_{\min} = 2.5\%$. Second, the χ_{\min} which corresponds to the near Si/SiO₂ interface region is $\chi_{\min} = 4\%$. Third, the near Si/SiO₂ interface region does not show indications of the existence of significant number of extended defects. Fourth, the Si/SiO₂ edge is as sharp as the front Si one, if one takes into account the strag-

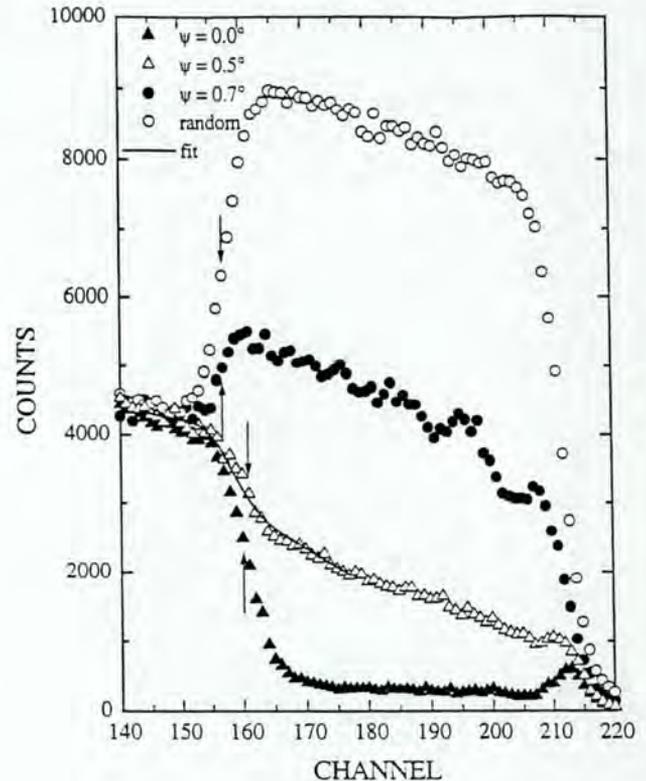


FIG. 1. Random and channeled RBS spectra for ${}^4\text{He}^{2+}$ at 0° , 0.5° and 0.7° about the Si $\langle 100 \rangle$ axis of a SIMOX target taken at 800 keV.

gling of the particles through the Si film. All these features indicate that (a) the Si film is of very good quality; and (b) the near-interface region is well defined and free of a significant level of linear defects. Both observations are in agreement with transmission electronic microscopy (TEM) results given by the supplier. The edge positions for channeling and random incidence are shown by arrows. They were determined by fitting the corresponding spectra with an algorithm which, in addition to the error function (accounting for particle straggling and detector resolution), contains the Rutherford cross-section dependence with energy. Then the energy loss for well-channeled particles can be straightforwardly obtained by comparing the energy of the edge positions for the normal channeled incidence with that for the random one.²⁰ However, for increasing incidence angles, the dechanneling part of the beam becomes larger, distorting the profile of channeled ions which are backscattered at the Si/SiO₂ interface. In fact, the energy spectrum of backscattered ions will correspond to the sum of dechanneled and channeled ions, so that the simple analysis considering only the edge positions will not provide precise results. For instance, according to Fig. 1, the energy loss for 0.5° seems to be smaller than the one for 0.0° . In order to circumvent this problem, we have to determine the dechanneling profile and remove it from the original RBS spectrum. This procedure is described in Sec. III and in the Appendix.

III. DATA ANALYSIS AND EXPERIMENTAL RESULTS

The backscattering of a particle that enters into a channel with an energy E_0 and an angle of incidence Ψ with respect

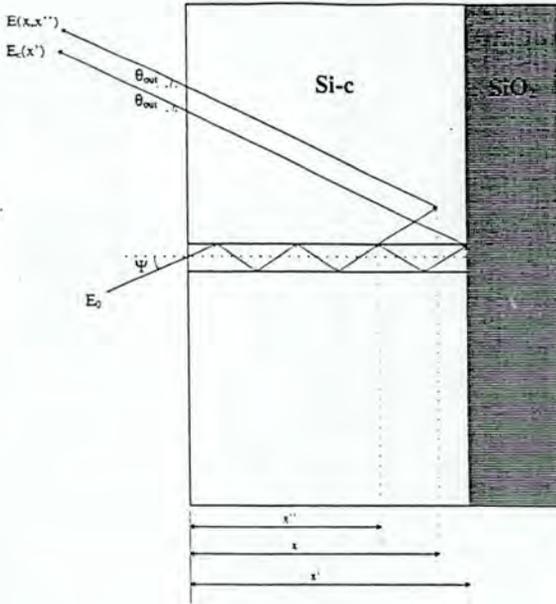


FIG. 2. Schematic representation of two most important contributions to the RBS spectrum. Particles that are backscattered at the Si/SiO₂, and particles that are dechanneled before being backscattered can have the same detected energies. Here x' coincides with the thickness of the film.

to the channel axis will be dominated by two different scattering scenarios:

(a) It can move along the Si<100> channel and then be backscattered at a depth x' by defects in the channel or by the Si and O atoms in the SiO₂ layer. It will emerge from the sample at an angle θ_{out} with an energy $E_c(x')$ [see Fig. 2].

(b) It can move in the channel up to a distance between x'' and $x'' + dx''$, and then be dechanneled. Still it may go in a forward direction almost parallel to the channel axis and finally, as shown by Fig. 2, it will be backscattered at a distance x , emerging from the sample with the same angle θ_{out} and energy $E(x, x'')$.

The total fraction of backscattered particles with an energy E_1 is given by the contribution of the channeled backscattered particles plus those which are first dechanneled, most likely in a random direction, and then backscattered:

$$f(E_1) = f_c(E_1) + f_d(E_1), \quad (1)$$

with

$$f_c(E_1) = \int_0^\infty dx' [1 - \chi(x')] P_{sc}^c(x') \delta(E_1 - E_c(x')) \quad (2)$$

and

$$f_d(E_1) = \int_0^\infty dx \int_0^x d\chi(x'') P_{sc}(x, x'') \delta(E_1 - E(x, x'')), \quad (3)$$

where $\chi(x')$ is the fraction of dechanneled particles at the depth x' , and $d\chi(x'')$, the fraction of particles dechanneled at the depth between x'' and $x'' + dx''$. $P_{sc}(x, x'')$ is the prob-

ability of the dechanneled particle being backscattered with a large angle at a depth x , emerging from the sample with an energy $E(x, x'')$ at an angle θ_{out} relative to the normal of the target surface. $P_{sc}^c(x')$ is the probability of a particle being backscattered inside the channel or in the SiO₂ matrix at a depth x' from the surface, and being detected at the angle θ_{out} with an energy $E_c(x')$. Equation (1) has been evaluated by assuming an exponentially decreasing channeling fraction $[1 - \chi(x') = \exp(-\lambda x')]$,³⁰ and using the backscattered probabilities P_{sc} and P_{sc}^c in terms of atomic densities and Rutherford cross sections.²⁵ In order to determine $E_c(x')$ and $E(x, x'')$ as functions of x' , x , and x'' , we used the random stopping powers of He in Si and SiO₂ of Refs. 31 and 32. Thus we fitted $f(E_1)$ after convoluting it with the energy straggling and energy resolution of the detection system, to the experimental spectra to obtain (a) the fraction of the dechanneled particles, and (b) the energy loss in the incoming path (channeling). For more details, see the Appendix. It should be stressed that in the fitting procedure there are only two free parameters: the channeled stopping power $(dE/dx)_c$ and λ . In addition we would like to mention that whenever the fraction of the dechanneled particles is less than, e.g., 15%, this analysis yields the same energy-loss value as the one given by the simple error-function-like fitting method.

The solid line in Fig. 1 shows the result of the fitting procedure applied to the RBS spectrum corresponding to $\Psi = 0.5^\circ$. In the same way we have obtained for all RBS spectra the channeling stopping power of the He particle as a function of the angle Ψ , and averaged over the azimuthal angle. In addition, we determined the ratio α between the channeled and the random stopping powers. Figure 3 shows these final results after averaging them about the axial direction. As can be observed, the ratio α has a half-width of about 0.4° which is almost half of the value of the corresponding channeling dip (0.7°) obtained from the dechanneling intensity profiles (also shown in Fig. 3). This means that, at large angles of incidence, channeled ions lose as much energy as in a random direction. This feature is a consequence of the different impact-parameter dependencies of the electronic and nuclear energy transfers, and is related to the spatial distribution and the low mass of the electrons.

IV. THEORETICAL PROCEDURE

The angular dependence of the electronic stopping power shown in Fig. 3 is a direct consequence of the impact-parameter dependence of the electronic energy loss. Let Ψ be the entrance angle of the He beam. Then the mean energy lost by the projectile after passing a thickness t through the Si crystal is given by

$$\Delta E(\Psi) = \frac{\int_{\mathcal{A}} d^2\rho \int_0^t dx \frac{dE}{dx}(\vec{\rho}) \Phi(\Psi, \vec{\rho}, x)}{\int_{\mathcal{A}} d^2\rho \int_0^t dx \Phi(\Psi, \vec{\rho}, x)}, \quad (4)$$

where \mathcal{A} is the transversal area of the Si<100> channel, $\vec{\rho}$ is the transversal distance ($\vec{\rho} = 0$ is the center of the channel), and Φ is the ion flux distribution at the distance $\vec{\rho}$ and depth

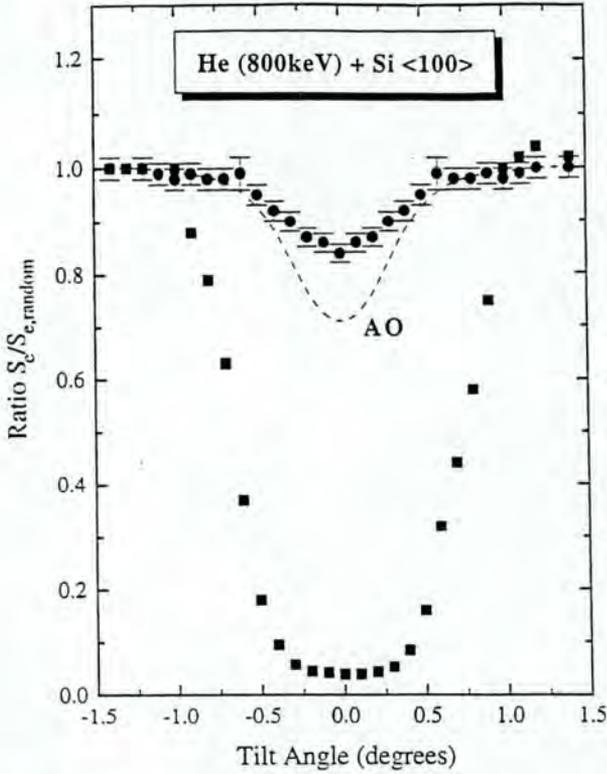


FIG. 3. Ratio α of channeled to random stopping power for 800-keV He ions along the Si(100) direction as a function of the incidence angle. The full circles are the present experimental results, and the dashed curve is the theoretical calculation based on the coupled-channel method. On the same scale the channeling dip (full squares) obtained from the dechanneling profiles is plotted.

x . The energy loss per traversed distance $dE/dx(\vec{\rho})$ may be divided into three contributions,

$$\frac{dE}{dx}(\vec{\rho}) = \left(\frac{dE}{dx}(\vec{\rho}) \right)_{\text{inner}} + \left(\frac{dE}{dx}(\vec{\rho}) \right)_{\text{valence}} + \left(\frac{dE}{dx}(\vec{\rho}) \right)_{\text{proj.-e}} \quad (5)$$

The first contribution corresponds to the energy loss due to inner-shell electrons of the Si atoms. Since these electrons are highly localized, and the corresponding energy loss depends strongly on the transverse distance and may be calculated accurately by considering the contribution of each Si atom.³³ Thus, neglecting any solid-state effects, the first term of Eq. (5) can be evaluated as

$$\left(\frac{dE}{dx}(\vec{\rho}) \right)_{\text{inner}} = \frac{Q(b_1) + Q(b_2) + Q(b_3) + Q(b_4)}{d}, \quad (6)$$

where $Q(b)$ is the mean energy transferred to the Si inner-shell electrons (K and L shells). The distance d corresponds to the interatomic distance (5.43 Å) along the $\langle 100 \rangle$ Si direction, and $b_1, b_2, b_3,$ and b_4 are the impact parameters relative to the four Si atoms equidistant from the center of the $\langle 100 \rangle$ channel. The contributions from other Si atoms are neglected, since they are close to zero.

The second term of Eq. (5) is due to the valence electrons of Si (M shell). These electrons are almost homogeneously

distributed. We assume this contribution to be independent of the ion transverse position $\vec{\rho}$. Using the local-density approximation, the spatial variation of the valence-electron contribution was calculated in Ref. 15 for the Si(100) and $\langle 110 \rangle$ directions. According to this work, the energy loss across the Si(100) channel is independent of the ion transverse position $\vec{\rho}$ to within 15%, leading to a variation of less than 3% for the ratio in Figs. 3 and 10. This situation is different for the widest channel, $\langle 110 \rangle$, where the position dependence of the electronic energy loss due to the valence electrons has to be considered.¹⁵

Finally, the last term in Eq. (5) corresponds to the energy loss due to projectile ionization and excitation. The incident ion He^{2+} can capture electrons from Si. This process leads to the formation of He^+ . The energy loss due to this capture process is already accounted for by the first two terms of Eq. (5). However, for projectiles carrying electrons, the projectile ionization and excitation is also a source of energy loss. The energy transfer due to projectile ionization and excitation depends strongly on the impact parameter of the He-Si collision. Consequently, the energy loss per traversed distance $(dE/dx(\vec{\rho}))_{\text{proj.-e}}$ for a Si crystal can also be determined in terms of the mean energy loss as a function of the impact parameter b , similar to Eq. (6). The orbital radius of ground-state He^+ (the main fraction of He^+ ions) is small compared to the interatomic distances in Si. Since the velocity is also low enough, coherence effects due to periodicity of the target atoms are expected to be of minor importance.

The electron of the He^+ ion can be removed due to Coulomb interactions with the Si atoms, producing He^{2+} . After repeated charge-state changing events (after passing just a few monolayers), an equilibrium charge-state distribution is attained. The values of charge-state fractions for channeled He ions in Si at 800 keV can be found in Ref. 34. The charge-state fraction for doubly ionized He ions f_{++} is about 0.65, and for singly ionized He ions f_{+} is about 0.35. The fraction f_0 for He^0 may be neglected.

Figure 4 shows a sketch of the basic energy-loss processes for a He ion penetrating Si, namely the Si ionization and excitation due to He^{2+} and He^+ impact, the projectile ionization and excitation due to Coulomb interactions with Si nuclei and electrons, and capture of the Si electrons into unoccupied He states. At high energies, the dominant process is the ionization and excitation of the Si atoms due to He^{2+} impact, which can be accurately described by first-order perturbation theory. However, in the present case (200 keV/amu), only nonperturbative calculations yield reliable energy-loss values. In the case of projectile ionization, first-order calculations overestimate the electron-loss cross section by a factor of 3 (for collisions with Ne atoms at 1000 keV),^{35,36} because ionization probabilities do exceed 100% in the case of the heavy target.

In order to obtain the ion flux distribution, we use the string potential model.^{37,38} Consequently, only the transverse motion (across the Si(100) channel) has to be determined. For Si(100) axial channeling, four Moliere string potentials³⁷ were added to calculate the potential energy as a function of position $\vec{\rho}$. We numerically solve Newton's equations of motion for an ensemble of ions impinging on the channel with entrance angle Ψ . Thus the two-dimensional transverse mo-

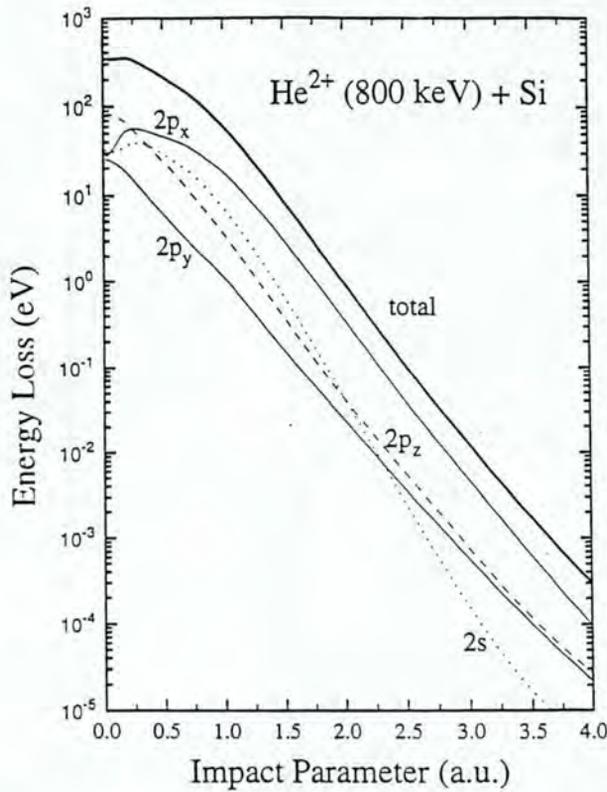


FIG. 5. Impact-parameter dependence of the electronic energy loss for 800-keV He^{2+} colliding with Si atoms calculated with the coupled-channel method. The labels indicate the Si inner shell to which the active electron is initially bound.

to the number of electrons in the initial orbital i . For the case of singly ionized He^+ , the energy loss comes not only from the Si inner-shell electrons, but also from projectile ionization and excitation. Consequently, the mean energy loss for the He^+ fraction is

$$Q_+(b) = \sum_i 2 \times Q_i^{\text{He}^+ - \text{Si}}(b) + Q_{1s}^{\text{Si} - \text{He}^+}(b), \quad (11)$$

and the energy loss averaged over the charge-state distribution is given by

$$\langle Q \rangle(b) = f_+ Q_+(b) + f_{++} Q_{++}(b), \quad (12)$$

which, in connection with Eqs. (5), (6), and (7), provides the angular dependence of the stopping power under channeling conditions. For bare incident ions, the active-electron projectile interaction is just the Coulomb potential. In the case where the projectile carries electrons, the potential seen by the active electron contains not only the Coulomb part due to the projectile-nuclear charge but also the static potential produced by the projectile electrons that screen the projectile nuclear charge. It is emphasized that the calculation of the energy loss due to the projectile electron is performed in a frame where the projectile is at rest. Thus the incoming perturbing particle is the neutral Si atom.

In the present coupled-channel calculations, we used a large number of continuum wave packets (up to 350 "gerade" states with partial waves up to $l=8$), since the computation of the electronic stopping power demands high accu-

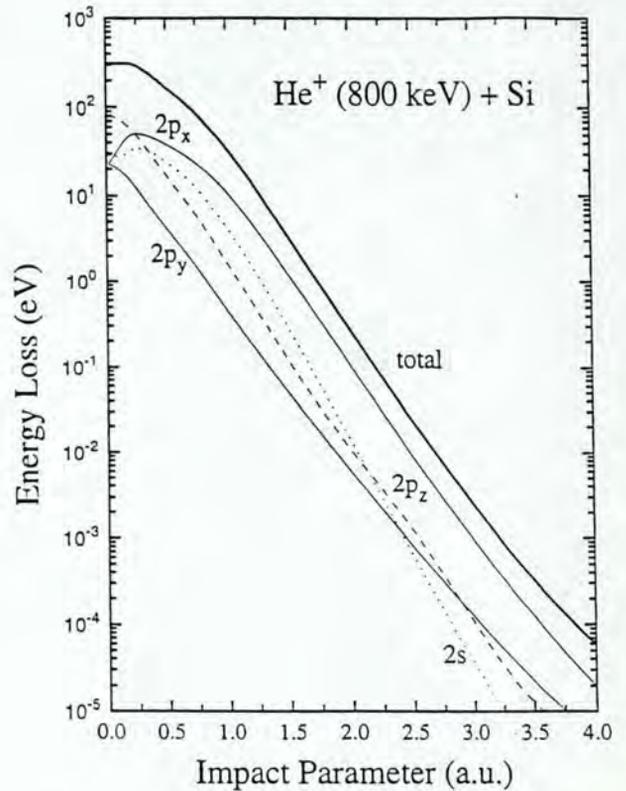


FIG. 6. The same as in Fig. 5, but for He^+ projectiles.

racy for the emitted-electron energy spectrum. In addition, the energy loss due to capture into projectile states is naturally included in a large-basis-set calculation. Further details of the calculation, e.g., the numerical treatment of continuum states, adopted basis set, treatment of screened projectiles, may be found in Refs. 21, 22, and 36.

V. THEORETICAL RESULTS AND DISCUSSION

In Figs. 5–7 we present the coupled-channel results for the impact-parameter dependence of the mean energy loss of singly and doubly ionized He ions colliding with Si. The theoretical curves in Figs. 5 and 6 are labeled with the corresponding initial occupied state. The difference between the $2p_x$, $2p_y$, and $2p_z$ orbitals. The contribution of the Si-K shell electrons is negligible, and therefore is not shown in Figs. 5 and 6. The sum of these curves multiplied by the number of electrons in each subshell is represented by a thick solid line, and corresponds to the inner-shell contribution to the energy loss. These contributions are also displayed in Fig. 7 (solid and dashed lines for He^{2+} and He^+ , respectively) with the energy loss corresponding to the He^+ projectile ionization and excitation (dashed line). Finally, the averaged energy loss (thick solid line) according to the charge-state distribution [Eq. (12)] is depicted as a function of the impact parameter. Using this curve in Eq. (6), we obtain the mean energy loss per traversed distance as a function of the ion transverse position $\bar{\rho}$ inside the channel.

The ion flux distribution calculated for normal incidence $\Psi=0$ and integrated along the depth (1500 Å) is presented

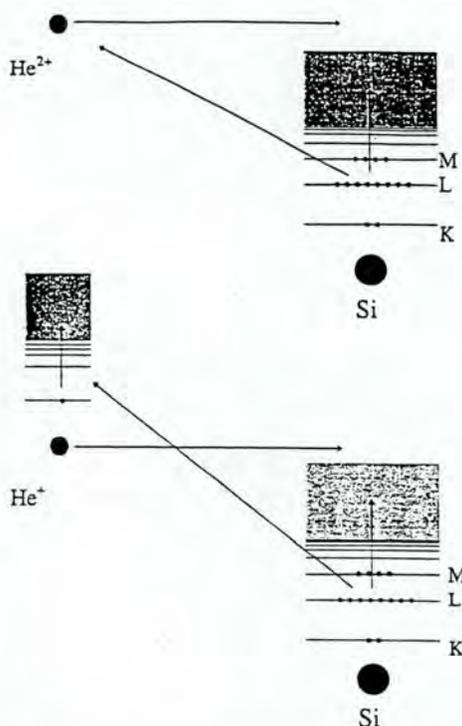


FIG. 4. Diagrammatic representation of the basic energy-loss processes of a He beam colliding with Si atoms.

tion and the ion flux distribution Φ as a function of the penetrated depth were calculated. The ion flux distribution could also be estimated by using the assumption of statistical equilibrium.¹¹ However, comparisons with the ion flux determined from the numerical solution of Newton's equations show that statistical equilibrium is not achieved for the target thickness used in this work.

The ratio α between the channeled stopping power and the random one can be written as

$$\alpha = \frac{\langle \Delta E \rangle (\Psi)}{\Delta E_{\text{random}}}, \quad (7)$$

where $\langle \Delta E \rangle$ is obtained from Eq. (4) after averaging the energy loss per traversed distance for each charge state distribution f_+ and f_{++} . Here we assume the ion flux distribution Φ to be independent of the projectile charge state for the He^{2-} and He^+ ions, since the ion trajectories are basically determined by the screened potential of Si. ΔE_{random} corresponds to the energy lost by the projectile after passing the target thickness t in a random direction, and was taken from the experimental value of stopping power for He in Si at random incidence.³¹

In the following we describe the calculation of the electronic energy-loss contribution due to Si inner-shell electrons and the projectile electron (for the He^+ fraction), which are responsible for the angular dependence of the channeling stopping power. The energy loss associated with the Si valence electrons is obtained here from the experimental stopping cross section of Ref. 31 by subtracting the contributions from other processes.

Coupled-channel atomic-orbital (AO) method

It is usually assumed that inner-shell excitations can be adequately treated as localized atomic events. It was shown by theoretical grounds in Ref. 33 that all high-energy excitations (inner- and outer-shell ionization) in solids may be treated using atomic-collision models, and that a free-atom model is sufficient to describe energy losses in solids for incident energies above about 10 keV/amu, even when the energy loss is dominated by conduction-band electrons. Here we will focus attention on atomic treatments of the energy-transfer process, putting aside intraband transitions and collective excitations such as bulk and surface plasmons in solid targets.

This calculation^{21,22} is based on the impact-parameter method.³⁹ The projectile following a classical trajectory provides a time-dependent perturbation on the target electrons. Hence the time-dependent Schrödinger equation is solved by expanding the electronic wave function in a truncated basis of states consisting of atomic orbitals. A set of first-order ordinary coupled differential equations for the coefficients originating from this expansion, the so called coupled-channel equations, is integrated numerically along the classical trajectory of the projectile for a given impact parameter b . The independent particle model is adopted for one active electron moving in the electrostatic field due to the nuclei and the other electrons, which is included in a frozen-core Hartree-Fock-Slater framework.

The essence of the present calculation is to solve numerically in time, step by step, the coupled-channel equations in order to obtain the amplitudes $a_{i \rightarrow f}$ for transitions from an initial occupied state i to an unoccupied bound or continuum state f after the collision ($t = \infty$). The excitation and ionization probabilities in a collision with impact parameter b are given by

$$P_{i \rightarrow f}(b) = \lim_{t \rightarrow \infty} |a_{i \rightarrow f}(t)|^2. \quad (8)$$

The active electron ground-state wave function ϕ_i and energy E_i , as well as the excited or continuum wave functions $\phi_{i \rightarrow f}$ and energies $E_{i \rightarrow f}$ (where a hole in the i th shell is left) are calculated by the Hartree-Fock-Slater procedure.⁴⁰ Since each excited or continuum state corresponds to a well-defined energy transfer ($\Delta E_{i \rightarrow f} = E_{i \rightarrow f} - E_i$), the average electronic energy loss due to one electron in the i th shell for a given impact parameter b can be written as

$$Q_i^{P-T}(b) = \sum_f P_{i \rightarrow f}(b) \Delta E_{i \rightarrow f}, \quad (9)$$

where P and T correspond to the projectile and target used in the calculations. It is noted that the above sum has to be replaced by an integral in the case of continuum states. The subscript i indicates the occupied initial state, and f the unoccupied bound and continuum states. For He^{2+} projectiles, the average electronic energy loss reads

$$Q_{++}(b) = \sum_i 2 \times Q_i^{\text{He}^{2+} - \text{Si}}(b), \quad (10)$$

where the initial states i correspond to Si K and L shells ($i = 1s, 2s, 2p_x, 2p_y, \text{ and } 2p_z$). The factor of 2 corresponds

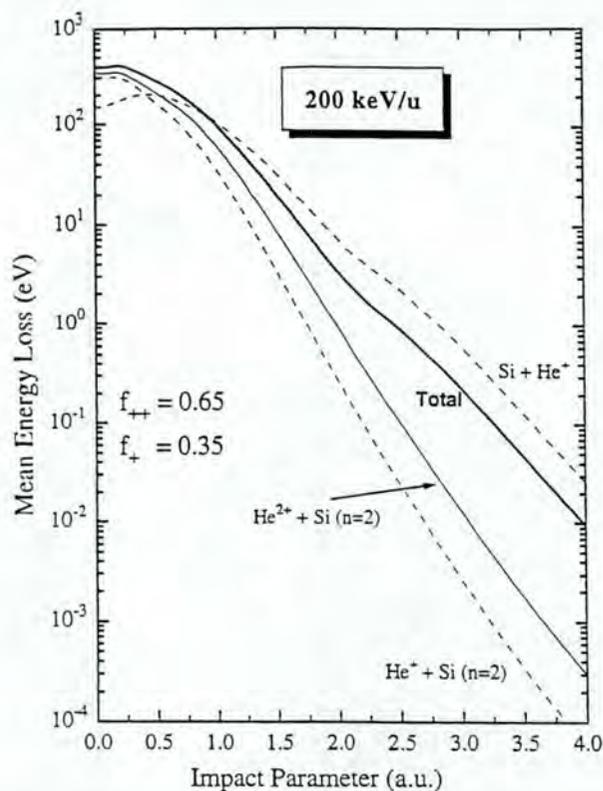


FIG. 7. Coupled-channel results for the impact parameter dependence of the energy loss for He ions colliding with Si atoms. Ionization and excitation of the projectile, in the case of the He^+ charge-state fraction is accounted for by considering the collision system $\text{Si} + \text{He}^+$.

in Fig. 8. The flux peaking in the center is responsible for the decrease of the channeled ion stopping power, since the energy loss per traversed distance has a minimum at the center of the channel. By increasing the incidence angle Ψ , the flux distribution becomes more uniform. For large angles, the flux distribution is constant like the one for random directions (not shown here). With the angle-dependent flux distribution and the averaged energy loss per traversed distance, we obtain the energy loss as a function of the incidence angle.

The calculated ratio α between the channeled and random energy loss [Eq. (7)] is depicted in Fig. 3 as a dashed line (labeled by AO). Although the calculations predict a half-width similar to that obtained from the experimental results, the value of the ratio α for the normal incidence is underestimated by about 13%. This disagreement comes from the straightforward use of Eq. (4) without considering any experimental and/or theoretical corrections.

Regarding the experimental conditions, some comments can be made. No further cleaning was performed in vacuum, so the deposition of hydrocarbon and the formation of a native oxide layer may influence the ion flux distribution and hence the measurements of energy loss. In a series of auxiliary experiments, the quantity of carbon deposited on the Si surface was estimated. The effect of a maximal quantity of about 20 Å of carbon and 20 Å of amorphous SiO_2 due to the formation of native oxide film on the $\text{Si}\langle 100 \rangle$ channel was considered in the calculations. A layer of amorphous mate-

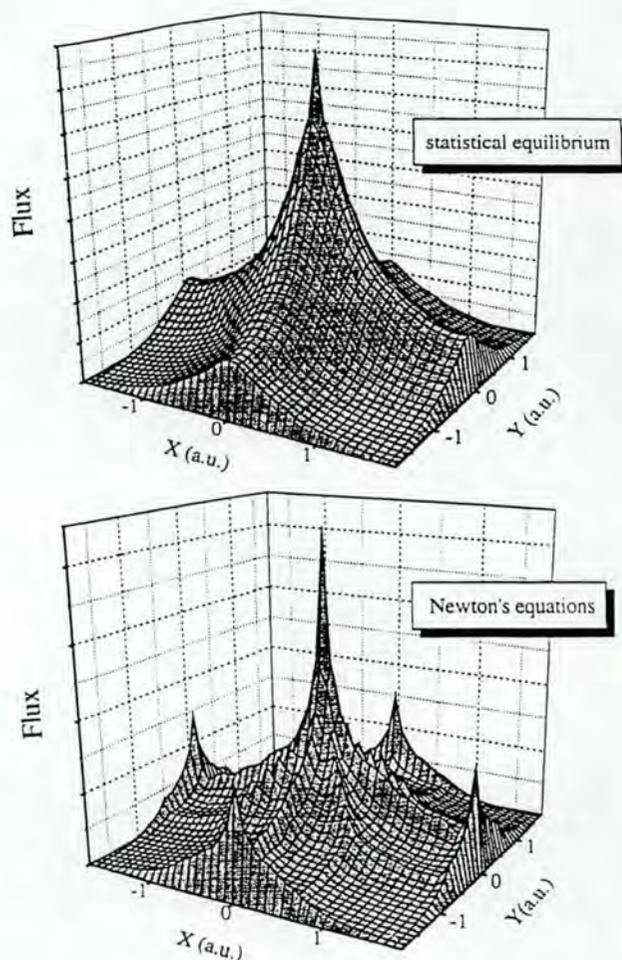


FIG. 8. The flux distribution averaged over 1500 Å of the ions across the $\text{Si}\langle 100 \rangle$ channel.

rial on top of a crystal leads to an angular spreading of the incident ions after penetrating this layer. This angular spreading was calculated with the Monte Carlo simulation TRIM95.³² The simulated profile of angles Ψ from the crystal axis and the beam divergence were used to calculate the ion flux distribution. The ratio α increases as a consequence of the angular spreading by less than 2% at normal incidence. Other corrections for the ion flux distribution such as inelastic multiple scattering and atomic thermal displacements were also taken into account according to Ref. 37, but they are negligible (less than 1%). The effect of the temperature is also not significant for energy-loss measurements, since the thermal vibrations induce only small changes on the impact-parameter distribution. The averaged electronic energy loss is not sensitive to such small variations.

On the other hand, at a theoretical level, the independent particle model used to take into account all Si inner-shell electrons may strongly overestimate the energy loss in the case of capture events and multiple ionization. Special attention must be drawn to the use of Eqs. (10) and (11) to calculate the total energy loss due to Si inner-shell electrons. The sum of each subshell contribution used in Eqs. (10) and (11) is based on the independent-particle model, and accounts for ionization, excitation, and capture processes.

However, a complete breakdown of the independent-particle model occurs in the case of multiple capture of target electrons into projectile states because the projectile He^{2+} (He^{2+}) cannot capture more than one (two) electron(s) into the ground state due to the Pauli-exclusion principle. The simple sum of capture probabilities corresponding to each Si inner electron therefore incorporates unphysical capture processes.

In the present calculations, we cannot distinguish the electron capture by the projectile from the ionization process, since we used only target-centered states in the atomic orbital (AO) expansion. In order to obtain the capture contribution to the calculated energy loss, in Fig. 9 we compare the energy loss of He^{2+} ions interacting with the $2s$ Si electron. The solid line corresponds to coupled-channel calculation (AO), and the dashed line represents the energy-loss calculations using the boundary-corrected first-order born approximation⁴¹ for electron capture into the He ground state. The latter calculation takes into account only the capture process in first-order perturbation theory. Both calcula-

tions give the same results for impact parameters larger than 0.6 a.u. We can observe two important aspects from this figure. The first one corresponds to the coupled-channel calculation. Even using only target-centered states, this method provides reliable values for capture probabilities as already observed in Ref. 22. Second, the capture process is the main source of energy loss predominating over target inner-shell ionization. For He^{2+} impact ions, we obtain similar results to the ones shown in Fig. 9. Further evidence of the dominant capture process is a peak around the electron energy corresponding to the capture energy transfer which was observed in the calculated singly differential cross section for collisions of He^{2+} and He^{+} with the Si L -shell electrons ($2s$ and $2p$).

Assuming that the capture of Si inner-shell electrons into the He ground state is the dominant energy loss process, we must exclude all unphysical multiple processes in order to obtain more accurate energy-loss values. Thus, for He^{2+} projectiles, we use the following expression to suppress the unphysical multiple-capture processes

$$Q^{\text{excl.}}(b) = 2Q_{2s}(b)(1 - P_{2s}^{\text{react.}})(1 - P_{2p_x}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_z}^{\text{react.}})^2 + 2Q_{2p_x}(b)(1 - P_{2s}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_x}^{\text{react.}})(1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})^2 \\ \times (1 - P_{2p_z}^{\text{react.}})^2 + 2Q_{2p_y}(b)(1 - P_{2s}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_x}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})(1 - P_{2p_z}^{\text{react.}})^2 \\ + 2Q_{2p_z}(b)(1 - P_{2s}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_x}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_z}^{\text{react.}}) + Q^{\text{two-electron}}(b), \quad (13)$$

with

$$Q^{\text{two-electron}}(b) = 2Q_{2s}(b)P_{2s}^{\text{react.}}(1 - P_{2p_x}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_z}^{\text{react.}})^2 + 2Q_{2p_x}(b)P_{2p_x}^{\text{react.}}(1 - P_{2s}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_z}^{\text{react.}})^2 \\ + 2Q_{2p_y}(b)P_{2p_y}^{\text{react.}}(1 - P_{2s}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_x}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_z}^{\text{react.}})^2 + 2Q_{2p_z}(b)P_{2p_z}^{\text{react.}}(1 - P_{2s}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_x}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})^2 \\ + 2(Q_{2s}(b)P_{2p_x}^{\text{react.}} + Q_{2p_x}(b)P_{2s}^{\text{react.}})(1 - P_{2p_x}^{\text{react.}})(1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})(1 - P_{2p_z}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_z}^{\text{react.}})^2 + \dots, \quad (14)$$

where $P_i^{\text{react.}} = \sum_f P_{i \rightarrow f}$ is the reaction probability, i.e., the sum over ionization, excitation, and capture probabilities for one electron from the i th Si inner-shell. Therefore, $(1 - P_i^{\text{react.}})$ corresponds to the probability of the electron remaining in the ground state. Thus Eq. (13) provides all one- and two-electron processes leading to the energy loss. It is pointed out that the above expression still allows for other double ionization and excitation processes involving an inner-shell electron and a valence-band electron. It is noted that electron capture of valence-band electrons is quite unlikely because of the low orbital velocity in comparison with the projectile velocity and the energy mismatch between target and projectile states.

In the case of He^{+} projectiles, we must exclude other than single-electron processes. Moreover, the Pauli principle has to be explicitly taken into account in the case of the capture into the He^{+} ground state. In this case, the projectile cannot capture a Si electron with the same spin direction as the projectile electron. Then the energy loss due to capture into He^{+} ground state is

$$Q(b) = Q_{2s}(b)(1 - P_{2s}^{\text{react.}})(1 - P_{2p_x}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})^2 \\ \times (1 - P_{2p_z}^{\text{react.}})^2 + Q_{2p_x}(b)(1 - P_{2s}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_x}^{\text{react.}}) \\ \times (1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_z}^{\text{react.}})^2 + Q_{2p_y}(b)(1 - P_{2s}^{\text{react.}})^2 \\ \times (1 - P_{2p_x}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})(1 - P_{2p_z}^{\text{react.}})^2 + Q_{2p_z}(b) \\ \times (1 - P_{2s}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_x}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_y}^{\text{react.}})^2(1 - P_{2p_z}^{\text{react.}}). \quad (15)$$

Thus we have performed corrections on the independent-particle model. In this correction (called AO*), we consider Eq. (13) for the He^{2+} projectiles, and Eq. (15) for the He^{+} projectiles. We are assuming only capture into the He^{+} ground state, since the capture into projectile excited states are of minor importance.

The energy-loss ratio α calculated by excluding the unphysical capture processes according to the procedure AO* described above is shown in Fig. 10 by a solid line. For

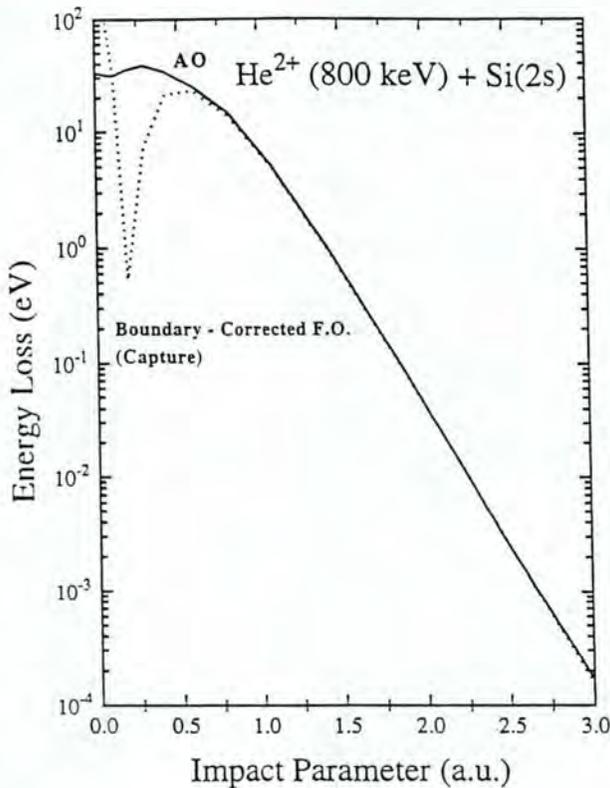


FIG. 9. Comparison between the energy loss due to the Si 2s shell calculated from the coupled-channel method with the one obtained for the capture from the Si 2s shell into the He^{2+} ground state in the boundary-corrected first-order Born approximation (Ref. 41).

comparison, the experimental data from Fig. 3 are also presented with the original AO calculations. A very good agreement is found between the AO* theoretical results and the experimental ones. This figure shows that by excluding the multiple processes involving the Si inner-shell electrons in the coupled-channel results for one electron, we obtain reliable values of the impact-parameter-dependent energy loss.

VI. CONCLUSIONS

In this work we measured and calculated the energy loss of 800-keV He ions channeled along the Si $\langle 100 \rangle$ axis as a function of the incidence angle. The measurements were performed by using the standard Rutherford backscattering technique on SIMOX targets. A special algorithm was developed in order to analyze the RBS spectra, and extract the channeled component from the raw spectrum. The results show that the ratio α between the channeled and random stopping powers has a half-width of about 0.4° , which is much smaller than the corresponding Si $\langle 100 \rangle$ channeling dip (0.7°), obtained from the yield of dechanneled He particles. This feature is a direct consequence of the different impact-parameter dependencies of the electronic and nuclear energy transfers.

From the theoretical point of view, a full analysis of the stopping power of channeled particles was performed by considering the impact-parameter-dependent energy loss,

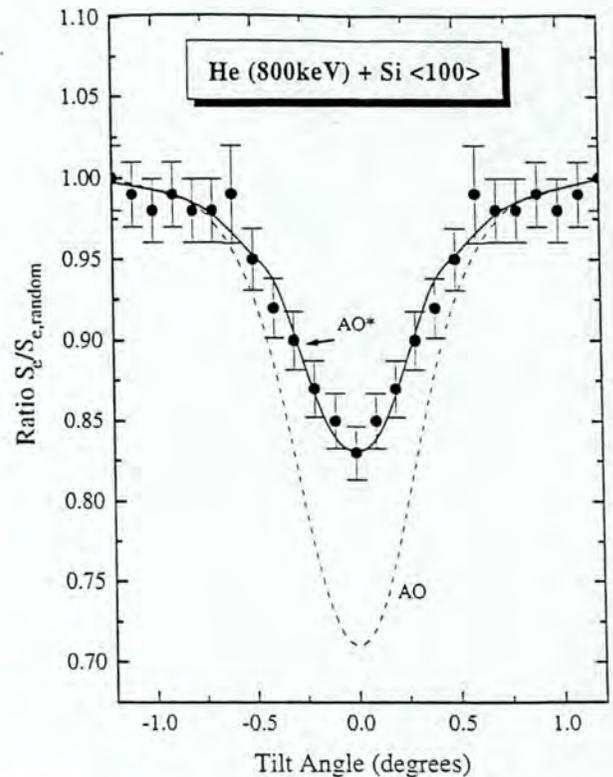


FIG. 10. Ratio α of channeled to random stopping power for 800-keV He ions moving along the Si $\langle 100 \rangle$ direction as a function of the incidence angle. The full circles and solid line (AO) are taken from Fig. 3. The theoretical curve denoted by AO* is the result of the coupled-channel calculations excluding unphysical capture processes.

projectile charge states, and ion flux distribution. The energy-loss calculations were based on a numerical solution of the coupled-channel equations for each Si inner-shell electron, and also for the projectile electron in the case of singly ionized He projectiles. The independent-particle model was used to obtain the total energy loss.

Near the stopping power maximum (at 800 keV), the angular dependence of the stopping power is basically due to projectile electron loss and capture process from Si inner-shell electrons. The ratio α is well reproduced by coupled-channel calculations by excluding multiple-electron processes involving the Si inner-shell electrons. In this way, very good agreement with the experimental results has been achieved without using any free parameters or further approximations. Moreover, the present results provide tools for a better understanding of the energy loss of ions under channeling conditions.

ACKNOWLEDGMENTS

The numerical work was performed on the Cray YMP-2E at the Supercomputing Center of Universidade Federal do Rio Grande do Sul (CESUP). This work was partially supported by the Brazilian agencies Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) and Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP). The authors would also like to thank Dr. D. K. Sadana from the IBM T. J.

Watson Research Center, New York, for supplying the Si-MOX samples.

APPENDIX

According to Sec. III, the total fraction of backscattered particles detected with an energy E_1 is given by the contribution of (a) the channeled backscattered particles, and (b) those which are first dechanneled (most likely in a random direction) and then backscattered. In order to evaluate Eq. (2), we first have to obtain

$$E_c(x') = \begin{cases} KE_0 - [S_c]x', & \text{for } x' \leq t \\ KE_0 - [S_c]t - [S]^{SiO_2}(x' - t), & \text{for } x' > t, \end{cases} \quad (A1)$$

with K being the kinematic factor for Si, E_0 the incident beam energy, t the crystal layer thickness, and with the energy-loss factor

$$[S_c] \equiv \frac{K}{\cos\theta_1} \left(\frac{dE}{dx} \right)_c + \frac{1}{\cos\theta_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_r \quad (A2)$$

for the Si layer. Here θ_1 and θ_2 are the angles between the beam and the sample normal and between the sample normal and the detector direction respectively, $(dE/dx)_c$ is the channeled specific energy loss (to be determined), and $(dE/dx)_r^{out}$, the random one along the outward path (for the

present case, $\theta_1 = \Psi$ and $\theta_2 = \theta_{out}$). The factor $[S]^{SiO_2}$ is similar to expression (A2) for the SiO_2 matrix.

The backscattering probability for the channeled fraction of the beam is given by

$$P_{sc}^c(x') dx' = N^c(x') \sigma(E') dx', \quad (A3)$$

σ being the Rutherford backscattering differential cross section, and N^c the density of silicon atoms as seen by the channeled fraction of the ions. The energy E' just before backscattering in this case is

$$E' = \begin{cases} E_0 - \left(\frac{dE}{dx} \right)_c \frac{x'}{\cos\theta_1}, & \text{for } x' \leq t \\ E_0 - \left(\frac{dE}{dx} \right)_c \frac{t}{\cos\theta_1} - \left(\frac{dE}{dx} \right)_{in}^{SiO_2} \frac{x' - t}{\cos\theta_1}, & \text{for } x' > t. \end{cases} \quad (A4)$$

We now assume that the differential dechanneling probability $d\chi$ at a depth ξ is proportional to the fraction of channeled particles,

$$d\chi(\xi) = \lambda(1 - \chi)d\xi, \quad (A5)$$

where λ is a dechanneling rate.

Using the expressions for $E_c(x')$ [Eq. (A1)], P_{sc}^c [Eq. (A3)], and χ [Eq. (A5)] in Eq. (2), we obtain the following expression for $f_c(E_1)$:

$$f_c(E_1) = \begin{cases} \frac{N_{Si}^{SiO_2}}{[S]_{Si}^{SiO_2}} \sigma_0 \frac{1}{\left(1 - \frac{1}{E_0 \cos\theta_1} \left[\left(\frac{dE}{dx} \right)_c t + \left(\frac{dE}{dx} \right)_{in}^{SiO_2} \frac{KE_0 - E_1 - [S_c]t}{[S]^{SiO_2}} \right] \right)^2} \times e^{-\lambda t} & \text{for } E_1 \leq KE_0 - [S_c]t \\ 0 & \text{for } E_1 > KE_0 - [S_c]t \end{cases} \quad (A6)$$

where $\sigma_0 \equiv \sigma(E_0)$ and $N_{Si}^{SiO_2}$ is the partial density of Si in SiO_2 .

Concerning expression (3), the detected energy of a particle which is dechanneled at x'' and backscattered at $x \geq x''$ reads

$$E(x, x'') = KE_0 - [S_r]x + K\Delta S_{eff}x'', \quad (A7)$$

where

$$\Delta S_{eff} \equiv \frac{\left(\frac{dE}{dx} \right)_r^{in} - \left(\frac{dE}{dx} \right)_c}{\cos\theta_1} \quad (A8)$$

for the silicon matrix. The probability of backscattering for the dechanneled fraction of the beam is also given by

$$P_{sc}(x, x'') dx = N(x) \sigma(E) dx, \quad (A9)$$

N being the partial density of Si atoms as seen by the dechanneled fraction of the ions (N_{Si} for the Si layer and $N_{Si}^{SiO_2}$ for the SiO_2 matrix),

$$E^x = E_0 - \left(\frac{dE}{dx} \right)_r \frac{x}{\cos\theta_1} + \Delta S_{eff}x''. \quad (A10)$$

After combining Eqs. (A5), (A7), (A9), and (3), we obtain

$$f_d(E_1) = \frac{\exp(\lambda b) \sigma_0}{[S_r]} \times \begin{cases} N_{Si}^{SiO_2} \left[I\left(\frac{t+b}{c}\right) - I\left(\frac{b}{c}\right) \right] & \text{for } E_1 < KE_0 - [S_r]t \\ N_{Si} \left[I(t) - I\left(\frac{b}{c}\right) \right] + N_{Si}^{SiO_2} \left[I\left(\frac{t+b}{c}\right) - I(t) \right], & \text{for } KE_0 - [S_r]t \leq E_1 < KE_0 - [S_c]t \\ N_{Si} \left[I\left(\frac{b}{c-1}\right) - I\left(\frac{b}{c}\right) \right] & \text{for } E_1 \geq KE_0 - [S_c]t \end{cases} \quad (A11)$$

where

$$I \equiv \int dx \frac{\exp(-\lambda cx)}{(1-ax)^2}, \quad (A12)$$

$$a \equiv \frac{\left(\frac{dE}{dx}\right)_r^{\text{in}}}{E_0 \cos \theta_1}, \quad (A13)$$

$$c \equiv \frac{[S_r]}{K \Delta S_{\text{eff}}}, \quad (A14)$$

$$b(E_1) \equiv \frac{KE_0 - E_1}{K \Delta S_{\text{eff}}}. \quad (A15)$$

and

After convoluting expressions (A6) and (A11) with the energy straggling and energy resolution of the detection system, we can fit the experimental spectrum and obtain $(dE/dx)_c$ from the fitting procedure. It should be stressed that, in the above fitting procedure, the only free parameters are the channeling stopping power $(dE/dx)_c$ and the (constant) dechanneling rate λ .

¹L. C. Feldman, P. J. Silverman, J. S. Williams, T. E. Jackman, and I. Stensgaard, Phys. Rev. Lett. **41**, 1396 (1978).

²N. W. Cheung, R. T. Culbertson, L. C. Feldman, D. J. Silverman, K. W. West, and J. W. Mayer, Phys. Rev. Lett. **45**, 120 (1980).

³W. R. Wampler, Phys. Rev. B **51**, 4998 (1995).

⁴M. A. Boshart, A. A. Bailes, A. Dygo, and L. E. Seiberling (unpublished).

⁵*Ion Beam Handbook for Material Analysis*, edited by J. W. Mayer and E. Rimini (Pergamon, Oxford, 1978).

⁶E. Albertazzi, M. Bianconi, G. Lulli, and R. Nipoli, in *Title*, edited by Editor(s), Proceedings of the 12th International Conference on Ion Beam Analysis 1995, IBA 12 [Nucl. Instrum. Methods (to be published)].

⁷A. La Ferla, E. Rimini, A. Camera, A. Gasparotto, G. Ciavola, and G. Ferla, Radiat. Eff. **129**, 133 (1994), and references therein.

⁸H. S. Jin and W. M. Gibson, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B **13**, 76 (1986).

⁹A. Dygo, M. A. Boshart, M. W. Grant, and L. E. Seiberling, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B **93**, 117 (1994).

¹⁰J. Lindhard and A. Winther, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. **34**, 4 (1964).

¹¹J. Lindhard, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. **34**, 14 (1965).

¹²K. Dettmann, Z. Phys. A **272**, 227 (1975).

¹³L. R. Logan, C. S. Murthy, and G. R. Srinivasan Phys. Rev. A **46**, 5754 (1992).

¹⁴P. L. Grande and G. Schiwietz, Phys. Lett. A **163**, 439 (1992).

¹⁵A. Dygo, M. A. Boshart, L. E. Seiberling, and N. M. Kabachnik, Phys. Rev. A **50**, 4979 (1995).

¹⁶O. Oen and M. Robinson, Nucl. Instrum. Methods **132**, 647 (1976).

¹⁷P. L. Grande and G. Schiwietz, Phys. Rev. A **44**, 2984 (1991).

¹⁸G. Schiwietz, P. L. Grande, C. Auth, H. Winter, and A. Salin, Phys. Rev. Lett. **14**, 2159 (1994).

¹⁹P. J. M. Smulders and D. O. Boerma, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B **29**, 471 (1987).

²⁰J. H. R. dos Santos, P. L. Grande, H. Boudinov, M. Behar, R. Stoll, Chr. Klatt, and S. Kalbitzer, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B **106**, 51 (1994).

²¹G. Schiwietz, Phys. Rev. A **42**, 296 (1990).

²²G. Schiwietz and P. L. Grande, Nucl. Instrum. Methods Phys.

Res. Sect. B **69**, 10 (1992); P. L. Grande and G. Schiwietz, Phys. Rev. A **47**, 1119 (1993).

²³G. Götz, K. D. Klinge, and F. Schwabe, Expt. Tech. Phys. **23**, 167 (1975).

²⁴F. Cembali and F. Zignani, Radiat. Eff. **31**, 169 (1977).

²⁵W. K. Chu, J. W. Mayer, and M.-A. Nicolet, *Backscattering Spectrometry* (Academic, New York, 1978).

²⁶K. Izumi, M. Doken, and H. Ariyoshi, Electron. Lett. **14**, 593 (1978).

²⁷J. H. R. dos Santos, P. L. Grande, H. Boudinov, and M. Behar (unpublished).

²⁸F. H. Eisen, G. J. Clark, J. Bøttiger, and J. M. Poate, Radiat. Eff. **13**, 93 (1972).

²⁹A. Dygo, W. N. Lennard, and I. V. Mitchell, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B **84**, 23 (1994).

³⁰Koji Morita and Noriaki Itoh, J. Phys. Soc. of Jpn. **30**, 1430 (1971).

³¹D. Niemann, P. Oberschachtsiek, S. Kalbitzer, and H. P. Zeindl, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B **80/81**, 37 (1993).

³²J. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids* (Pergamon, New York, 1985).

³³G. Schiwietz and P. L. Grande, Radiat. Eff. Defects Solids **130**, 137 (1994).

³⁴R. J. Petty and G. Dearnaley, Phys. Lett. **50A**, 273 (1974).

³⁵M. M. Sant'Anna, W. S. Melo, A. C. F. Santos, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B **99**, 46 (1995).

³⁶P. L. Grande, G. Schiwietz, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, Phys. Rev. A (to be published).

³⁷*Channeling: Theory, Observation, and Applications*, edited by D. V. Morgan (Wiley, New York, 1973).

³⁸D. S. Gemmel, Rev. Mod. Phys. **46**, 129 (1974).

³⁹J. Bang and J. M. Hansteen, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. **31**, 13 (1959); L. Willets and S. J. Wallace, Phys. Rev. **169**, 84 (1968); M. R. Flannery and K. J. MacCann, Phys. Rev. A **8**, 2915 (1973).

⁴⁰F. Herman and S. Skillmann, *Atomic Structure Calculations* (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1963).

⁴¹D. P. Dewangan and J. Eichler, J. Phys. B **19**, 2939 (1986); Dz. Belkic, R. Gayet, J. Hanssen, and A. Salin, *ibid.* **19**, 2945 (1986).

**Electronic stopping power of ^{10}B in Si in random and
< 100 >
channeling directions**

J.H.R. dos Santos, M. Behar, P.L. Grande, H. Boudinov

Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul,
Avenida Bento Gonçalves 9500, 91501-970, Porto Alegre, Brazil

R. Stoll, Chr. Klatt and S. Kalbitzer

Max-Planck-Institut für Kernphysik, P. O. Box 103980, D-69029 Heidel-
berg, Germany

Abstract

In the present work we report measurements of ^{10}B stopping powers in random and Si < 100 > directions. The measurements were carried out in the 500-9000 keV energy range for the channeling case and in the 300-800 keV for the random one. For the channeling measurements, the low energy data (500-800 keV) follow a v^s regime with $s = 0.90 \pm 0.06$ whereas, for the random data, $dE/dx \propto v^s$ with $s = 1.1 \pm 0.2$. Both results are in good agreement with the prediction of current theories. On the other side, the experimental random ^{10}B stopping power values (for energies up to 650 keV) are in fair agreement with the ones obtained from a scaling procedure by Ziegler, Biersack and Littmark. However, for energies higher than 650 keV, slight but systematic differences are observed.

PACS numbers : 34.50.Bw, 79.20.Nc, 61.80.Mk, 34.120. + x

I Introduction

The slowing down of energetic ions penetrating the matter has been intensively studied for many years. As a consequence a large number of range measurements on a variety of projectile-target combinations have been performed in order to test current theories [1]. On the other hand in the same period of time much less stopping-power measurements have been performed and most of them have been done in random directions [1]. Furthermore, most of the published works on energy loss of energetic ions in channeling directions deal with protons and in less extent with He ions along the main Si axes.

Accurate knowledge of stopping powers for both random and channeling directions is important from both points of view: the underlying physics and practical applications. In the first case the data can test interatomic potentials and/or electronic excitation models used in range and atomic displacement calculations. From the practical point of view the data can be used as input of analytical or Monte-Carlo type of programs that calculate depth distributions and damage produced by ions implanted into channeling and random directions of the matrix.

Usually, the energy loss of channeled ions has been performed by measuring the final energy of ions transmitted through thin single crystals. However the use of this method strongly depends on the preparation of homogeneous self-supporting single crystals. In particular, in order to measure the energy loss of ions heavier than protons or He at low or intermediate energies, extremely thin films must be employed.

In the last few years we have used an alternative method in order to determine the stopping of He ions channeled along the Si $\langle 100 \rangle$ and $\langle 110 \rangle$ directions [2-4]. In this way, the channeling energy loss before the backscattering can be obtained almost directly. The channeled ions are detected after being backscattered at some marker specially introduced for this purpose. Results for the energy loss along the $\langle 110 \rangle$ direction [2] have shown that this backscattering technique yields channeling stopping powers well consistent with the ones obtained from transmission techniques.

The stopping power data for B in Si are scarce and incomplete. Concerning the channeling data it should be mentioned the pioneering work of Eisen [5] for ^{11}B in Si which was performed in a very narrow energy range using the transmission technique. Later works [6-8] have used range measurements of B implanted in channeling directions

to obtain the corresponding channeling stopping powers. Finally it should be mentioned that the only available random stopping power data for ^{10}B in Si is the one given by the RSTOP subroutine of the TRIM program [1]. These data are not experimental, but were obtained by a scaling procedure as described in ref.[1].

Most of the stopping power tabulations [9, 10] and semiempirical models [1] extrapolate their results from intermediate and higher energies to lower ones, using velocity dependencies which are based on simple models. This is due to the fact that there are no *ab initio* theories that can describe precisely the low energy electronic stopping processes for ions in metals, semiconductors or insulators. In particular the Firsov model [11] and the Lindhard electron-gas theory [12] predict a linear dependence of the electronic stopping power with the projectile velocity. More recently this behavior was corroborated by calculations performed for metals [13-16].

Following our theoretical-experimental study [2-4] of He stopping in channeling directions we have investigated the stopping of ^{10}B in random and Si $\langle 100 \rangle$ directions. The channeling experimental study was performed using the backscattering method in a 500-9000 keV energy range. The contribution to the electronic stopping power due to valence electrons from the Si was calculated using the free electron model [17]. On the other side the random stopping-power measurements were performed in a much restricted 300-800 keV energy range. The present results are compared to the previously published ones [5-7] and discussed in terms of current calculations.

II Experimental procedure

II.1 Channeling experiments

II.1.1 Experimental set-up

We have used SIMOX [18] type samples consisting of thin Si $\langle 100 \rangle$ crystal layers on top of 5000 Å SiO₂ buried layers, produced in $\langle 100 \rangle$ Si wafers. Two different thin single crystal layers, 750 and 1500 Å thick, were used for the stopping-power measurements in the $\langle 100 \rangle$ channeling direction.

The samples were prepared at IBM, T.J. Watson Research Center, New York. They were thinned by thermal oxidation and chemical etching. For each experiment the sample

was cleaned and etched to remove the native oxide film on the surface using 10% HF just before the RBS measurements. Then, they were mounted on a three axis goniometer of 0.005° precision. The experiments were done in the 500-9000 keV energy range. For energies lower than 800 keV, the $^{10}\text{B}^{++}$ beam was produced by the 400 kV ion implanter of the Institute of Physics at Porto Alegre. For energies higher than 800 keV, the boron beam was provided by the 3 MV tandem accelerator at the Max Planck Institute für Kernphysik (MPI-K), Heidelberg. In both cases the ^{10}B beam angular divergence was better than 0.03° .

The energy loss measurements were carried out using the beam impinging on the sample at channeling and random directions. Based on a recent study [19] and taking as references the $\langle 100 \rangle$ axis ($\Psi = 0$) and the $\{100\}$ plane ($\phi = 0$), we have chosen as a random direction the one defined by $\Psi = 6^\circ$ and $\phi = 15^\circ$. The backscattered ^{10}B particles were detected by Si surface barrier detectors. At Porto Alegre the measurements were carried out using three different backscattering geometries with the Si detector at 165° , 130° and 120° with respect to the incident ^{10}B beam. At Heidelberg three different detectors were used, placed at different geometries, but always forming an angle of 165° with respect to the impinging beam direction. The overall resolution of the detection systems at Porto Alegre and Heidelberg was always better than 25 keV. In addition to the experiments done at different geometries, several sets of measurements were performed under the same conditions. In all the cases, the results were reproducible at a 5% level.

The energy difference between the Si/SiO₂ interface positions in the random and channeling RBS spectra gives the corresponding difference in the energy lost in the path before the backscattering. As will be described in the next section, this difference provides the information about the stopping-power in the channeling direction. In addition to energy-loss, the RBS technique also simultaneously yields information about the dechanneling of the ions traversing the sample.

II.1.2 Data analysis

Typical RBS random and channeling spectra in the Si $\langle 100 \rangle$ direction for 800 keV and 8 MeV are shown in figures 1a) and b). E_c and E_r are the detected energies of the ^{10}B backscattered particles at the Si/SiO₂ interface in the aligned and random incidence

respectively.

The detected energies (using the mean energy approximation [20]) are:

$$E_c = K[E_0 - \frac{dE}{dx} |_{\bar{E}_{in}^c} l_{in}] - \frac{dE}{dx} |_{\bar{E}_{out}^r} l_{out} \quad (1)$$

and

$$E_r = K[E_0 - \frac{dE}{dx} |_{\bar{E}'_{in}} l'_{in}] - \frac{dE}{dx} |_{\bar{E}'_{out}} l'_{out}, \quad (2)$$

where the apostrophe ' refers to the random incidence, K is the kinematic Si factor, E_0 the incident beam energy, $\frac{dE}{dx}|^c$ the channeling specific energy loss (to be determined) and $\frac{dE}{dx}|^r$ the random one. \bar{E}_{in} and l_{in} (\bar{E}_{out} and l_{out}) are the mean energy and length of the inward (outward) path. Combining Eqs. 1 and 2 we obtain

$$\frac{dE}{dx} |_{\bar{E}_{in}^c} = \left[\frac{KE_0 - E_c}{KE_0 - E_r} \left(\beta_1 + \frac{\cos\theta_1}{\cos\theta'_1} \right) - \beta_2 \right] \frac{dE}{dx} |_{\bar{E}'_{in}}, \quad (3)$$

with

$$\beta_1 \equiv \frac{\frac{dE}{dx} |_{\bar{E}'_{out}} \cos\theta_1}{K \frac{dE}{dx} |_{\bar{E}'_{in}} \cos\theta'_2}, \quad (4)$$

$$\beta_2 \equiv \frac{\frac{dE}{dx} |_{\bar{E}_{out}^r} \cos\theta_1}{K \frac{dE}{dx} |_{\bar{E}'_{in}} \cos\theta_2}, \quad (5)$$

where θ_1 and θ_2 are the angles between beam and sample's normal and sample's normal and detector directions, respectively.

An inspection of equations 3, 4 and 5 shows that, for the present backscattering method, the determination of the Si crystal-layer thickness is not necessary. The energy loss of the channeled particles is obtained from geometrical factors, the detected E_c and E_r energies and the specific energy loss in the random direction.

The E_c and E_r energies corresponding to the Si/SiO₂ interface were determined by fitting the channeling and random spectra with an algorithm which in addition to the error function (accounting for particle straggling and detector resolution) includes the Rutherford cross section dependence with the ion energy.

II.2 Random stopping power

II.2.1 Experimental set-up

For this experiment, we have used a Bi marker implanted into an amorphized Si layer. First, we have determined the projected range R_p of the Bi ion distribution by using a He^{++} beam. Then, we have determined the energy position of the same Bi marker by using a ^{10}B beam at different energies. With both informations we were able to determine the random stopping powers of ^{10}B in Si as described below.

The sequence of experiments was the following: first we have amorphized a Si $\langle 100 \rangle$ wafer using an Ar ($\phi = 2 \times 10^{14}$ at/cm², $E = 300$ keV) beam. After that, the sample was implanted with a 30 keV Bi beam at a fluence $\phi = 10^{15}$ at/cm², which is too low to modify the material, and, on the other hand, high enough to provide sensitivity for the backscattering experiments. Then, we have determined the range of the implanted Bi peak by using a 800 keV He^{++} beam from the 400 kV ion implanter of Porto Alegre. The backscattered He^{++} particles were detected by a Si surface barrier detector placed at 165° with respect to the beam direction. The overall electronic resolution was better than 12 keV. The range measurements were done at two different type of geometries: a) with the sample at normal angle with respect to the beam (normal geometry) and b) with the sample at five different angles ranging between 15 and 60° with respect to the beam (tilted geometry). A typical RBS spectrum for the normal geometry is shown in figure 2a.

The energy to depth conversion was carried out using the recent He stopping power values reported by Niemann et al. [21]. We have then obtained $R_p = 144 \pm 8$ Å. It should be stressed that the above value was obtained as an average of ten different range measurements taken at normal and tilted geometries. The quoted errors are the ones which arise from the statistical treatment of the individual measurements plus those which came from the uncertainties in the determination of the He stopping power (estimated at a 1% level) [21]. Other sources of errors, like geometry and ion beam energy uncertainties, are considered to be much less important.

In a next step, we have determined the energy position $[E(R_p)]$ of the Bi implanted peak by using ^{10}B beams with energies which varied between 350 and 800 keV. Figure 2b displays a RBS spectrum taken with a 800 keV ^{10}B beam. The energy position cor-

responding to the maximum of the Bi distribution is marked in this figure as $E(R_p)$.

Considering the expression for the random energy loss factor

$$[S(B)]_{Bi}^{Si} = \frac{K_{Bi}E_0 - E(R_p)}{R_p}, \quad (6)$$

we can obtain the values for the electronic stopping power of ^{10}B in Si through the relation between the energy loss factor and the energy loss per unit length dE/dx (in the surface energy approximation [20]):

$$[S(B)]_{Bi}^{Si} = \frac{K_{Bi}}{\cos \theta_1} \frac{dE}{dx} \Big|_{E_0} + \frac{1}{\cos \theta_2} \frac{dE}{dx} \Big|_{K_{Bi}E_0}. \quad (7)$$

It can be observed from expressions 6 and 7 that at least two measurements of $E(R_p)$ (performed at different geometries) must be done in order to determine the energy loss dE/dx at the E_0 and $K_{Bi}E_0$ energies. In the present experiment for each ^{10}B energy we have performed four different measurements, changing the angle between the incident beam direction and the sample's normal. For each energy, the set of measurements were repeated several times being the results reproducible at a 5% level.

II.2.2 Data Analysis

As mentioned before in the present data analysis we have used the surface energy approximation [20]. This procedure is justified because the Bi marker is located at the very near surface region.

Expression 7 can be rewritten in the following way:

$$\frac{dE}{dx} \Big|_{K_{Bi}E_0} = m \frac{dE}{dx} \Big|_{E_0} + n, \quad (8)$$

with: $m \equiv -K_{Bi} \frac{\cos \theta_2}{\cos \theta_1}$ and $n \equiv [S(B)]_{Bi}^{Si}$.

By changing θ_1 and/or θ_2 it can be obtained a family of straight lines in the $\frac{dE}{dx} \Big|_{E_0}$ versus $\frac{dE}{dx} \Big|_{K_{Bi}E_0}$ plane. The intersection of two straight lines gives - for each ^{10}B energy - the corresponding $\frac{dE}{dx} \Big|_{E_0}$ and $\frac{dE}{dx} \Big|_{K_{Bi}E_0}$ values.

In order to minimize the errors we have modeled the experiment. This was done by choosing θ_1 (and consequently θ_2) to obtain the maximum possible angle between the straight lines. We have performed for each ^{10}B energy, four experiments under different geometrical conditions. A typical $\frac{dE}{dx} \Big|_{E_0}$ versus $\frac{dE}{dx} \Big|_{K_{Bi}E_0}$ plot for ^{10}B at 700 keV is displayed in figure 3.

It should be noted that, for each energy there are at most six sets of different $\frac{dE}{dx}|_{E_0}$ and $\frac{dE}{dx}|_{K_{Bi}E_0}$ values which arise from the indefiniteness of the intersection point. Then, we have taken the corresponding mean values and those are the ones further quoted. The errors were calculated taking into account: a) the statistical dispersion and b) the reported uncertainties in the He stopping power [21].

III Results and discussions

III.1 Channeling stopping powers

According to the procedure outlined in II.1.2 we have determined the energy loss of channeled ^{10}B ions along the $\langle 100 \rangle$ Si direction. Figure 4 shows our results for the channeling stopping power as a function of the ion energy. The channeling stopping power increases from 42.4 eV/Å at about 50 keV/amu to 79.7 eV/Å at around 500 keV/amu. Then, it steadily decreases down to 62 eV/Å at 900 keV/amu. The broad maximum in the channeling stopping power around 500 keV/amu probably arises from the maximum in the contribution of the L shell to the electronic stopping power as indicated by Plane Wave Born Approximation (PWBA) calculations [22].

In the same figure, and for comparison we have plotted the previous results obtained by Eisen [5], La Ferla et al. [6] and Bogen et al. [7]. The data point of Eisen [5] at 12.8 keV/amu and the lower energy points of La Ferla et al. [6] are out of the present studied energy range. On the other hand, the highest energy point of reference [6] is in good agreement with the present data. It is pointed out that the data of Bogen et al. [7] are systematically higher than the present and previous published data. The reason for this behavior is unknown. It should be noted however, that the indirect procedure, used in ref. [7] (based on range measurements) could be responsible for the observed discrepancies.

In figure 5 we show the α ratio between the channeling and random stopping powers (full circles) as well as the ^{10}B random stopping power as extracted from ref. [1] (solid line). It can be observed that the α ratio is weakly dependent on the ion energy. Its value ranges from 0.6 at 500 keV up to 0.82 at $E = 5000$ keV and decreases to 0.72 at 9000 keV.

We have calculated, on the basis of the free electron model[17], the contribution to

the electronic stopping power of the valence electrons scattered by the effective potential of the moving ion. In principle, this procedure is only valid for a degenerate electron gas. However, for ^{10}B ions of hundreds keV of energy, the projectile maximum energy transfer to the target electrons is high enough (in comparison to the gap width) and, therefore, the effect of the band gap can be neglected. The atomic potential responsible for the scattering of the target electrons was calculated according to the Hartree-Fock-Slater method [23]. Here the long Coulomb range part of the potential has been exponentially screened by the valence target electrons, according to the Debye screening [24]. The calculations of the transport cross-section and the electronic energy loss through the phase shifts method [17] were carried out for a 2+ charge state, which according to Betz [25] should be the equilibrium charge state for the present energy range. In addition we have repeated the calculations for the B neutral charge state which is the equilibrium one for $v \rightarrow 0$.

The results of the calculations are presented in figure 6 as a function of the ion velocity ratio, v/v_0 (being v_0 the Bohr velocity). In addition the present (up to 800 keV) and previously published results [5, 6] are shown. An inspection of this figure shows several interesting features. First, up to $v/v_0 \approx 0.8$ the calculations reproduce quite well the experimental data. Second, for increasing velocities ($v/v_0 \geq 0.8$) two different behaviors appear: the calculated values which show a broad maximum around $v/v_0 = 1.6$ whereas the experimental data increase with increasing velocity. Third, for all the studied energy range, there is no significant difference between the calculations performed with charge 2+ or a neutral one. Forth, the experimental points can be fitted with a power law expression - dash-dotted line - which gives the following result: $dE/dx = (35 \pm 1)(v/v_0)^{0.90 \pm 0.06}$ eV/Å. The above mentioned features clearly show that the basic energy loss mechanism for low velocities ($v/v_0 \leq 0.8$) is due to the scattering of the target valence electrons by the effective potential of the incoming ion. For higher velocities ($v/v_0 > 0.8$), the difference between the experimental and theoretical results is attributed to other energy loss contributions such as excitation and/or ionization of inner-shell electrons as well as capture and/or loss of electrons by the ^{10}B ions. In addition it should be observed that for $v/v_0 = 1.5$, the scattering of the valence electrons by the projectile is responsible for 80% of the total energy loss.

Finally it should be pointed out that the whole set of data follows an almost linear

relationship with the ion velocity, as predicted by current theories [11-16].

III.2 Random stopping powers

In figure 7, the ^{10}B random stopping powers obtained in the present experiment in the 300-800 keV energy range are shown. The open circles represent our experimental data whereas the full circles were obtained by recalculating our data using the He stopping powers from the ZBL procedure[1]. The typical error bars in the first case are of the order of 7% being a little bit higher (9%) for the second one due to the larger reported He energy loss uncertainties. In addition we show with a full line the ^{10}B random stopping data obtained from the RSTOP subroutine [1].

An inspection of figure 7 shows some interesting features. In first place, the ^{10}B random stopping powers deduced from the ZBL [1] He stopping powers are systematically higher (by around 5%) than those deduced from Niemann et al. [21]. This is a consequence of the fact that the reported He stopping power values by Niemann et al. [21] in the present studied energy region are about 7.5% lower than the ones of reference [1]. In second place, it should be noted, the good agreement between the ^{10}B random stopping data extracted from the RSTOP subroutine (full line) and the present experimental one (deduced with the ZBL He data). Only at energies higher than 650 keV slight but systematic differences of around 5% are observed.

This last feature can be also deduced from ^{10}B range measurements in amorphous silicon. In the work of Behar et al. [26], the ^{10}B projected ranges and range stragglings in a 9.5-2000 keV energy interval were investigated. For energies lower than 500 keV the agreement between the experimental projected ranges and the TRIM predictions was better than 2 %. However for energies higher than 700 keV the experimental R_p became larger than the predicted ones, being the difference of the order of 6-10%. These results were very much consistent with the ones obtained by Oosterhoff [27]. This means that the ^{10}B stopping powers of the RSTOP subroutine are larger than the ones which result from the range measurements. These observations are in full agreement with the present results.

In figure 8, we have plotted, the calculated values from fig. 6 and our lower energy (300-650 keV) experimental results, as function of the ion velocity. There are not low enough

energy experimental data in order to make a meaningful comparison. However, we can emphasize one major point. In the present case and for the same velocity, the theoretical-experimental difference is much larger than the one observed for the channeling case. In particular for $v/v_0 = 1.5$ the experimental random value is twice the calculated one, while in the channeling experiments, it was only around 1.25 - see figure 6. This means that in the random case, the contribution of the excitation and/or ionization processes of inner-shell electrons is much larger - as expected - than in the channeling one.

Finally we want to state that a least square fit to the data presented in figure 8 yields $dE/dx = (49 \pm 3)(v/v_0)^{1.1 \pm 0.2} \text{eV/\AA}$. This velocity dependence is also in good agreement with the predictions of current theories [11-16].

Regarding the ^{10}B channeling stopping power results, it should be pointed out that we have used as input the ^{10}B random energy loss extracted from the RSTOP subroutine - see II.1.2. This was due to the fact that the present measured random stopping values only correspond to a very narrow (300-800 keV) energy interval as compared to the one needed as input for the channeling results. Considering this fact, it is possible that for higher energies ($E > 650$ keV) the channeling stopping powers might be systematically lower by 5 % with respect to the present quoted results.

IV Conclusions

In the present work we report experimental results of ^{10}B stopping-powers along the $\text{Si} \langle 100 \rangle$ axis as well as for random directions by using a backscattering technique. For the low energy regime, both are nearly proportional to the ^{10}B velocity in agreement with the predictions of the current theories. The high energy channeling data ($E > 1500$ keV) show a maximum around 5000 keV, which likely arises from the maximum in the contribution of the L shell of the Si atoms to the B electronic stopping power.

Calculations based on free electron gas theory indicate that the most important energy loss mechanism for the low energy ^{10}B ions comes from the scattering of valence electrons by the incoming projectile.

Furthermore, we report - for the first time - ^{10}B in Si experimental random stopping-power data. The present results are in quite good agreement with the ones given by the

subroutine RSTOP. Only at energies higher than 650 keV, slight but systematic differences are observed. This feature was also seen in previous ^{10}B in Si range measurements, where experimental-theoretical discrepancies of the order of 6-10% were observed for energies higher than 700 keV. All these results indicate that for energies higher than 700 keV the ^{10}B random stopping powers compiled in the RSTOP subroutine are 5 to 10 % larger than the ones deduced from experimental observations.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work was partially supported by the Brazilian agencies Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) and Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul (FAPERGS).

References

- [1] J.F. Ziegler, J.P. Biersack and U. Littmark, The Stopping and Ranges in Solids, in **The Stopping and Ranges of Ions in Matter**, edited by J.F. Ziegler (Pergamon, New York, 1985), vol. 1 and references therein.
- [2] J.H.R. dos Santos, P.L. Grande, H. Boudinov and M. Behar, in **Ion Implantation Technology - 94**, edited by S. Coffa, G. Ferla, F. Priolo and E. Rimini, p.711.
- [3] J.H.R. dos Santos, P.L. Grande, H. Boudinov, M. Behar, Chr. Klatt and S. Kalbitzer, Nucl. Instr. and Meth. **B106** (1995) 51.
- [4] J.H.R. dos Santos, P.L. Grande, M. Behar, H. Boudinov and G. Schiwietz, Phys. Rev. **B55**, 1(1997).
- [5] F.H. Eisen, Can. J. Phys. **46** (1968) 561.
- [6] A. La Ferla, G. Galvagno, V. Raineri, R. Setola, E. Rimini, A. Carnera and A. Gasparotto, Nucl. Instr. and Meth. **B66** (1992) 339.
- [7] S. Bogen, L. Gong, L. Frey and H. Ryssel, Nucl. Instr. and Meth. **B80/81** (1993) 659.

- [8] V. Raineri, G. Galvagno, E. Rimini, J.P. Biersack, T. Nakagawa, A. La Ferla and A. Carnera, *Rad. Eff. and Def. in Sol.* **116** (1991) 211.
- [9] H. Andersen and J.F. Ziegler, Hydrogen Stopping Powers and Ranges in all elements, in **The Stopping and Ranges of Ions in Matter**, edited by J.F. Ziegler (Pergamon, New York, 1977), vol. 3.
- [10] F. Janni, *At. Data Nucl. Tables* **27** (1982) 147.
- [11] O.B. Firsov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **36** (1959) 1517.
- [12] J. Lindhard, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vidensk. Selsk.* **28**, No. 8 (1954); J. Lindhard and M. Scharff, *Phys. Rev.* **124** (1961) 128; J. Lindhard, M. Scharff, and H.E. Schiøtt, *Mat. Fys. Medd. Vidensk. Selsk.* **33**, No. 8 (1963).
- [13] P.L. Grande and G. Schiwietz, *Phys. Lett.* **A163** (1992) 439.
- [14] P.M. Echenique, R.M. Nieminen, and R.H. Ritchie, *Solid State Commun.* **37** (1981) 779; P.M. Echenique, R.M. Nieminen, J.C. Ashley, and R.H. Ritchie, *Phys. Rev.* **A33** (1986) 897.
- [15] P. Sigmund, in **Interaction of Charged Particles with Solid and Surfaces**, vol. 271 of NATO Advanced Study Institute, Series B: Physics, edited by A. Grass-Marti, H.M. Urbassek, N.R. Arista, and F. Flores (Plenum, New York, 1991) and related papers.
- [16] G. Schiwietz and P.L. Grande, *Nucl. Instr. and Meth.* **B90** (1994) 10.
- [17] K. Schönhammer, *Phys.Rev.* **B37** (1988) 7735; P. M. Echenique and M. E. Uranga, in **Interaction of Charged Particles with Solid and Surfaces**, vol. 271 of NATO Advanced Study Institute, Series B: Physics, edited by A. Grass-Marti, H.M. Urbassek, N.R. Arista, and F. Flores (Plenum, New York, 1991) and references therein.
- [18] K. Izumi, M. Doken and H. Ariyoshi, *Electron. Lett.* **14** (1978) 593.
- [19] A. Dygo, W. N. Lennard and I. V. Mitchell, *Nucl. Instr. and Meth.* **B84** (1994) 23.
- [20] W.K. Chu, J.W. Mayer and M.A. Nicolet, **Backscattering Spectrometry** (Academic Press, New York, 1978).

- [21] D. Niemann, P. Oberschachtsiek and S. Kalbitzer, Nucl. Instr. and Meth. **B80/81** (1993) 37.
- [22] P.L. Grande and G. Schiwietz, unpublished results. The first-order Born calculations were performed for $B^{q+} + Si$ with scaled hydrogen-like projectile wave functions, and target screening was accounted for.
- [23] F. Herman and S. Skilmann, **Atomic Structure Calculations** (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1963). The numerical calculations of the e-projectile potential was calculated using the NUM program [16].
- [24] C. Kittel, **Introduction to Solid State Physics** (Wiley, New York, 1986).
- [25] H. - D. Betz, Rev. Mod. Phys. **44** (1972) 465.
- [26] M. Behar, P.F.P. Fichtner, P.L. Grande and F.C. Zawislak, Mat. Sci. Eng. Rep. **15**, n. 1/2(1995).
- [27] S. Oosterhoff, Nucl. Instr. and Meth. **B30** (1988) 1.

Figure Captions

Figure 1a) RBS random and channeling spectra in Si $\langle 100 \rangle$ direction for 800 keV ^{10}B ions. E_c and E_r are the detected energies of the backscattered particles at the Si/SiO₂ interface in the channeling and random directions, respectively.

Figure 1b) Similar to 1a) but for ^{10}B ions at 8 MeV of energy.

Figure 2a). RBS spectrum of a 30 keV Bi marker implanted in Si obtained with a 800 keV, He⁺⁺ beam.

Figure 2b) The same as a) but obtained with a 800 keV ^{10}B beam.

Figure 3. $\frac{dE}{dx}|_{E_0}$ versus $\frac{dE}{dx}|_{K_{Bi}E_0}$ plot for ^{10}B in Si at 700 keV. The straight lines correspond to the specified geometries. The intersection point of two straight lines gives the measured dE/dx values along the inward and outward path.

Figure 4. Channeling stopping powers of ^{10}B in Si $\langle 100 \rangle$ as a function of the energy. Full circles corresponds to the present results. Full line are the data of Bogen et al. [7].

Squares corresponds to the data of La Ferla et al. [6]. Triangle is the data point of Eisen [5].

Figure 5. The full line represents the random stopping power of ^{10}B in Si. The full circles represent the α ratio between the channeling and the corresponding random stopping powers (the dashed line is only to guide the eye).

Figure 6. Calculated electronic stopping powers (for a 2+ and neutral charge state) as a function of the ion velocity ratio, v/v_0 (being v_0 the Bohr velocity). In addition are shown the present (up to 800 keV) and previously published experimental results [5, 6] for the channeling energy-loss. All the experimental points were fitted with a power law expression - dash-dotted line - $dE/dx = (35 \pm 1)(v/v_0)^{0.90 \pm 0.06}$ eV/Å.

Figure 7. Random electronic stopping power of ^{10}B in Si. Full line correspond to the values extracted from ref. [1]. Open circles are present experimental results obtained using the He stopping powers of ref. [21] - see text. Full circles are present experimental results obtained using the He stopping powers of ref. [1] - see text.

Figure 8. Low energy random stopping power as a function of the ion velocity together with the calculated electronic stopping powers. The straight dash-dotted line is a fit through the experimental points - see text - which yields: $dE/dx = (49 \pm 3)(v/v_0)^{1.1 \pm 0.2}$ eV/Å.

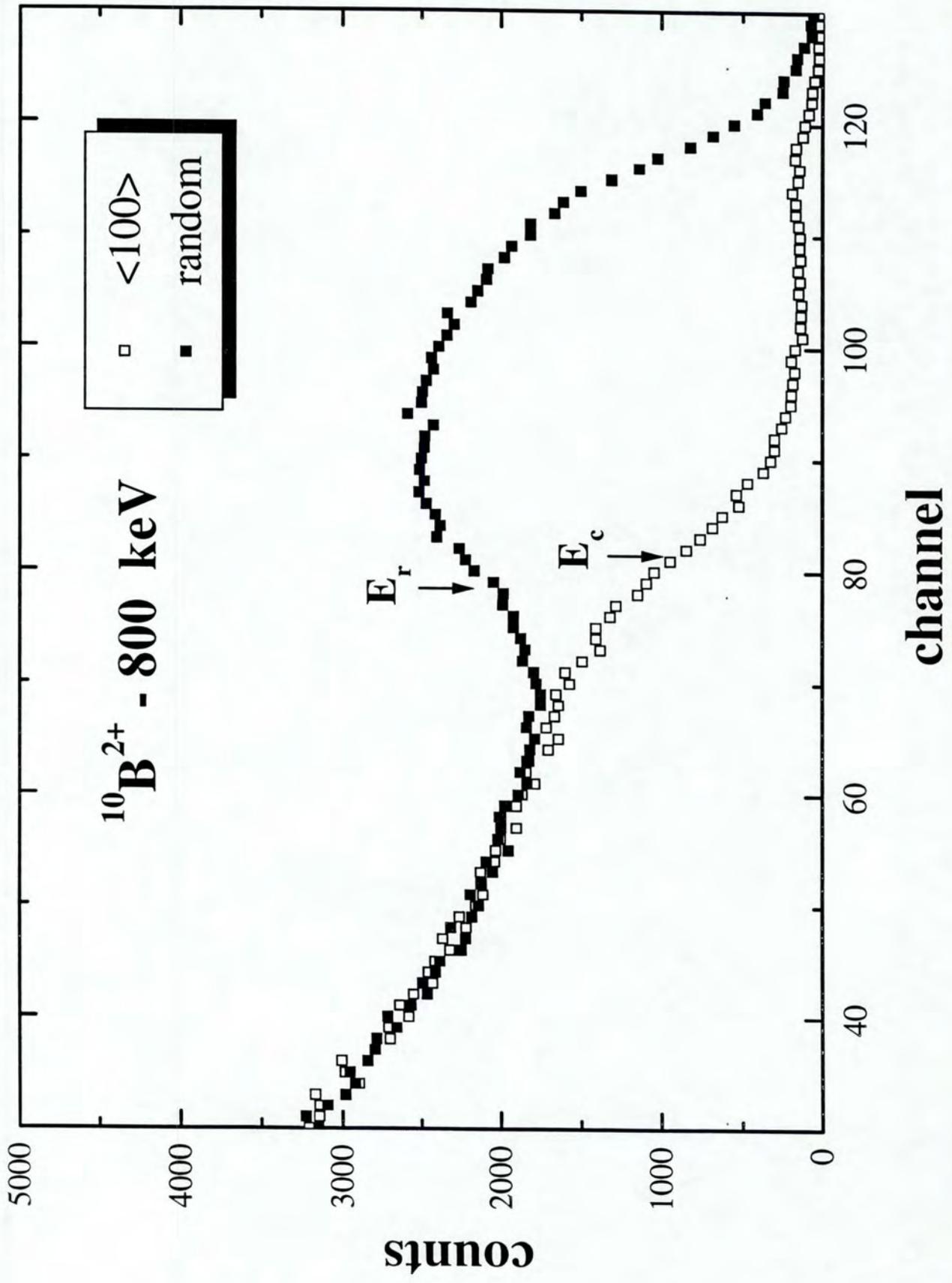
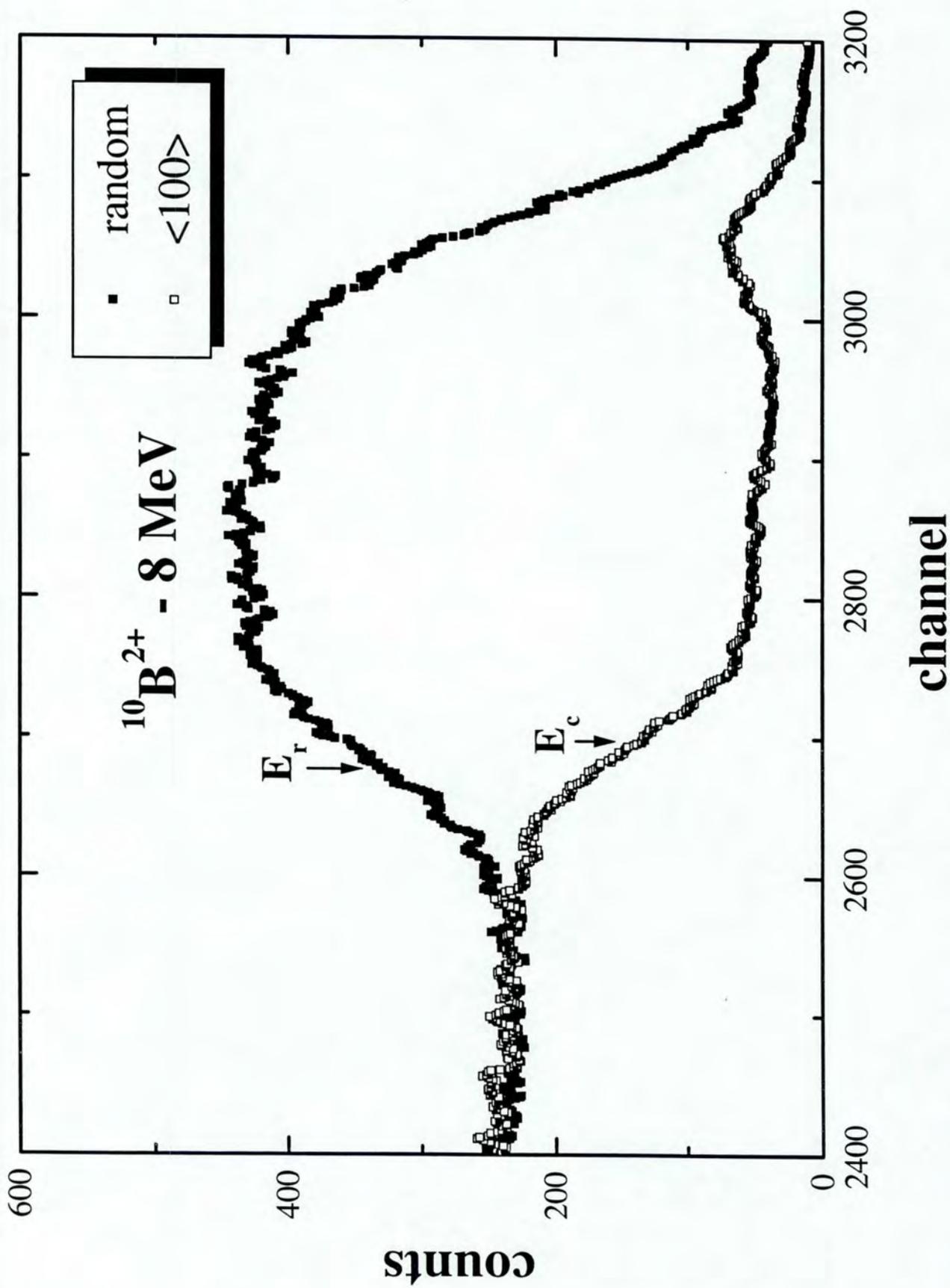
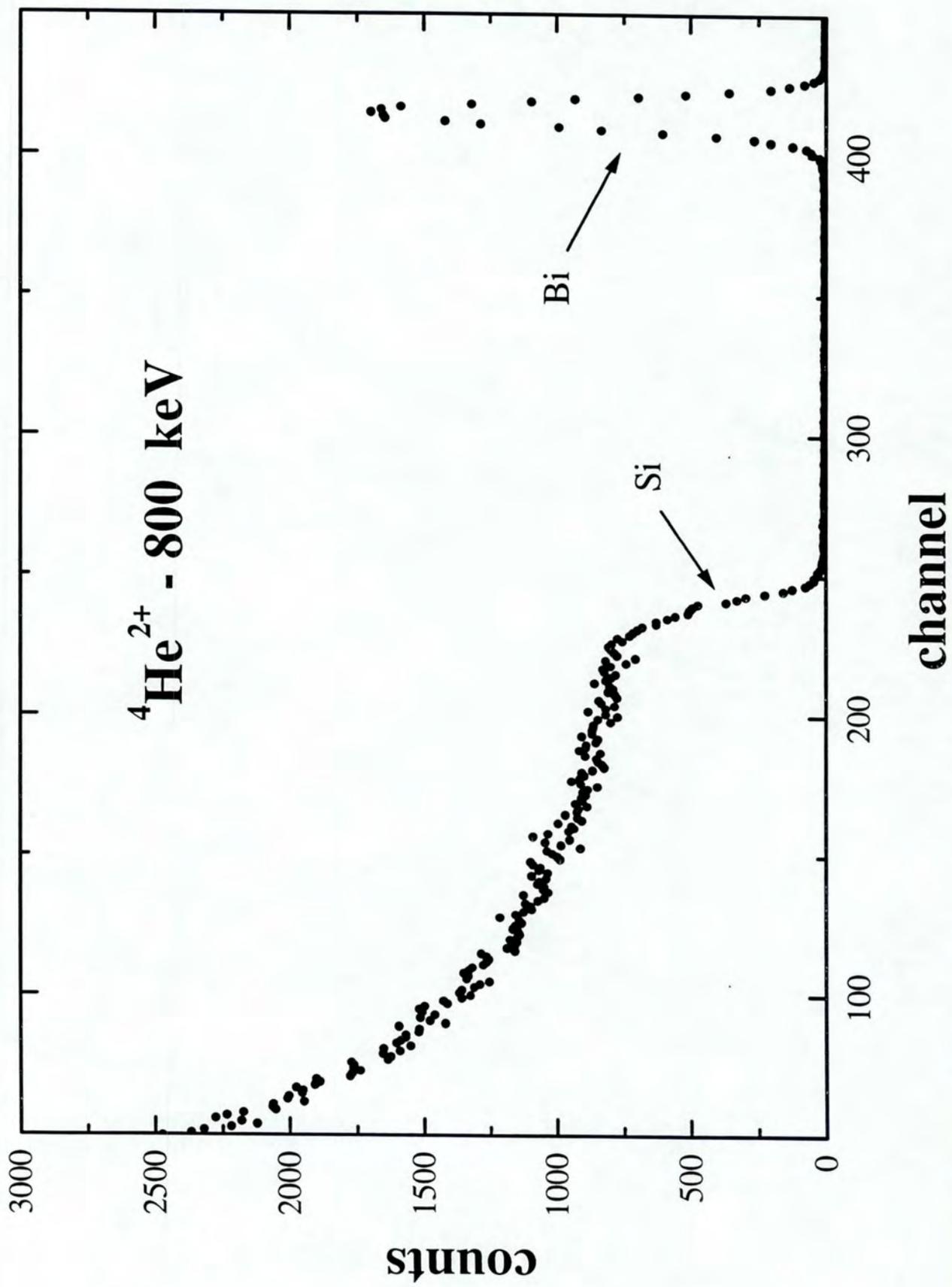
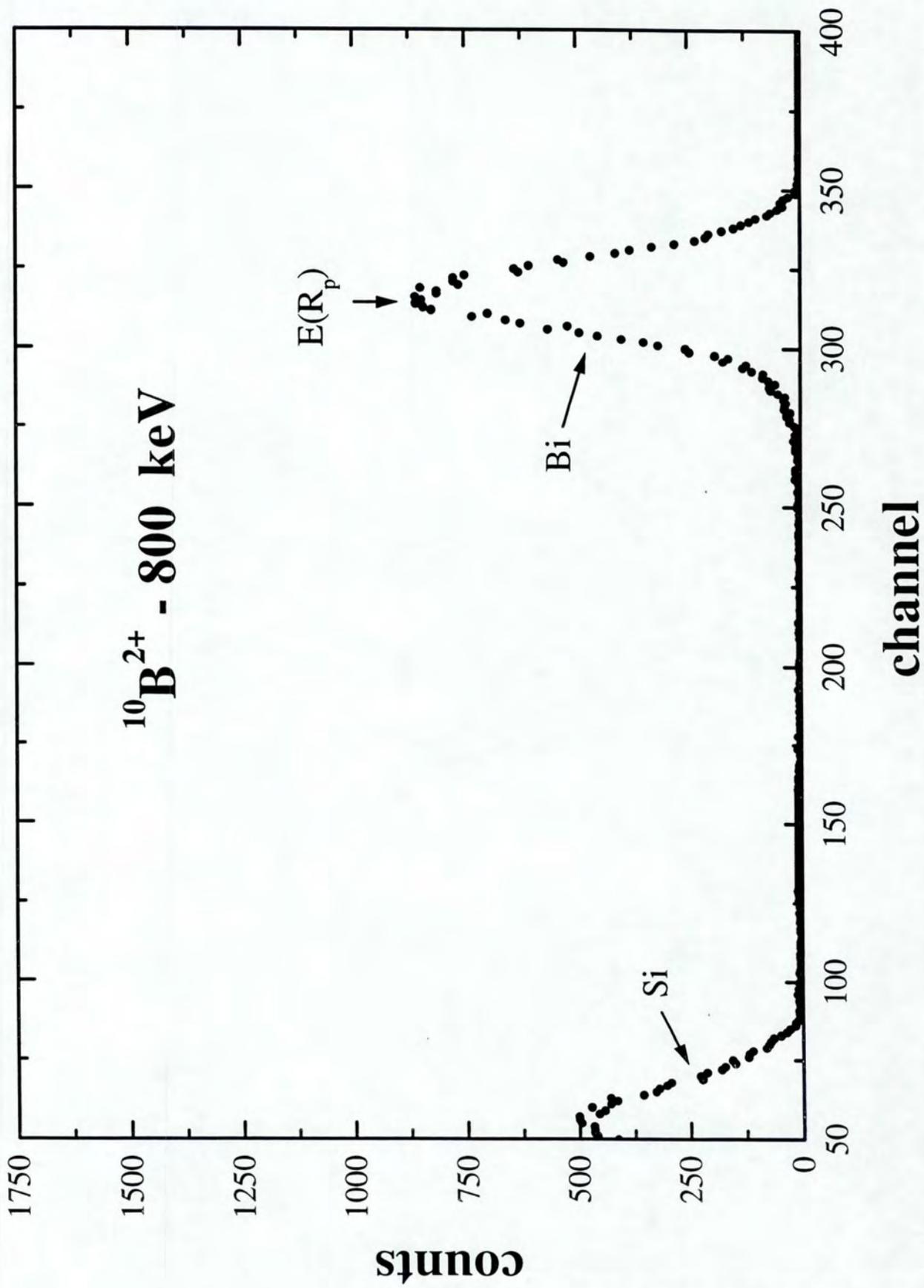


Fig. 1a







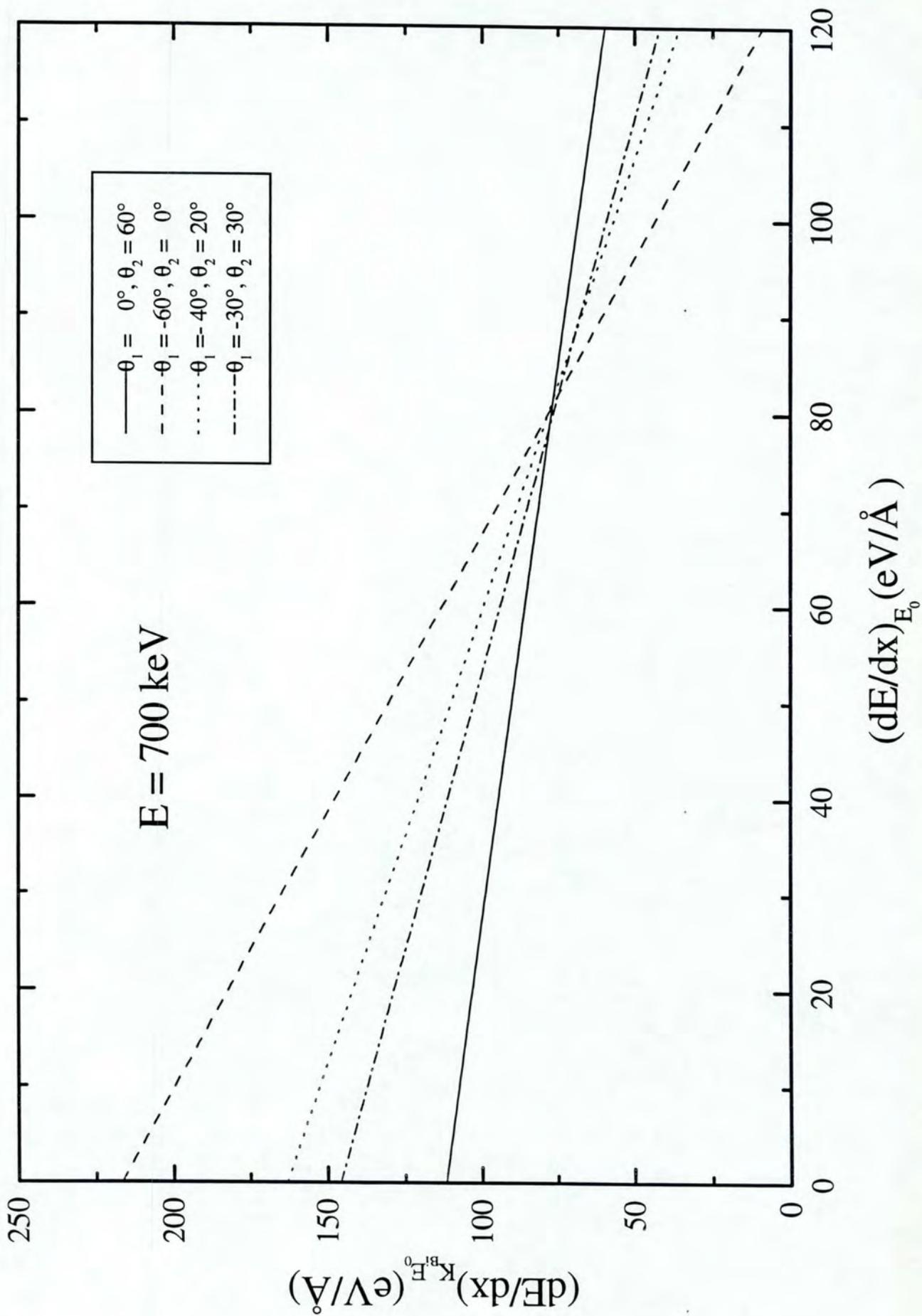
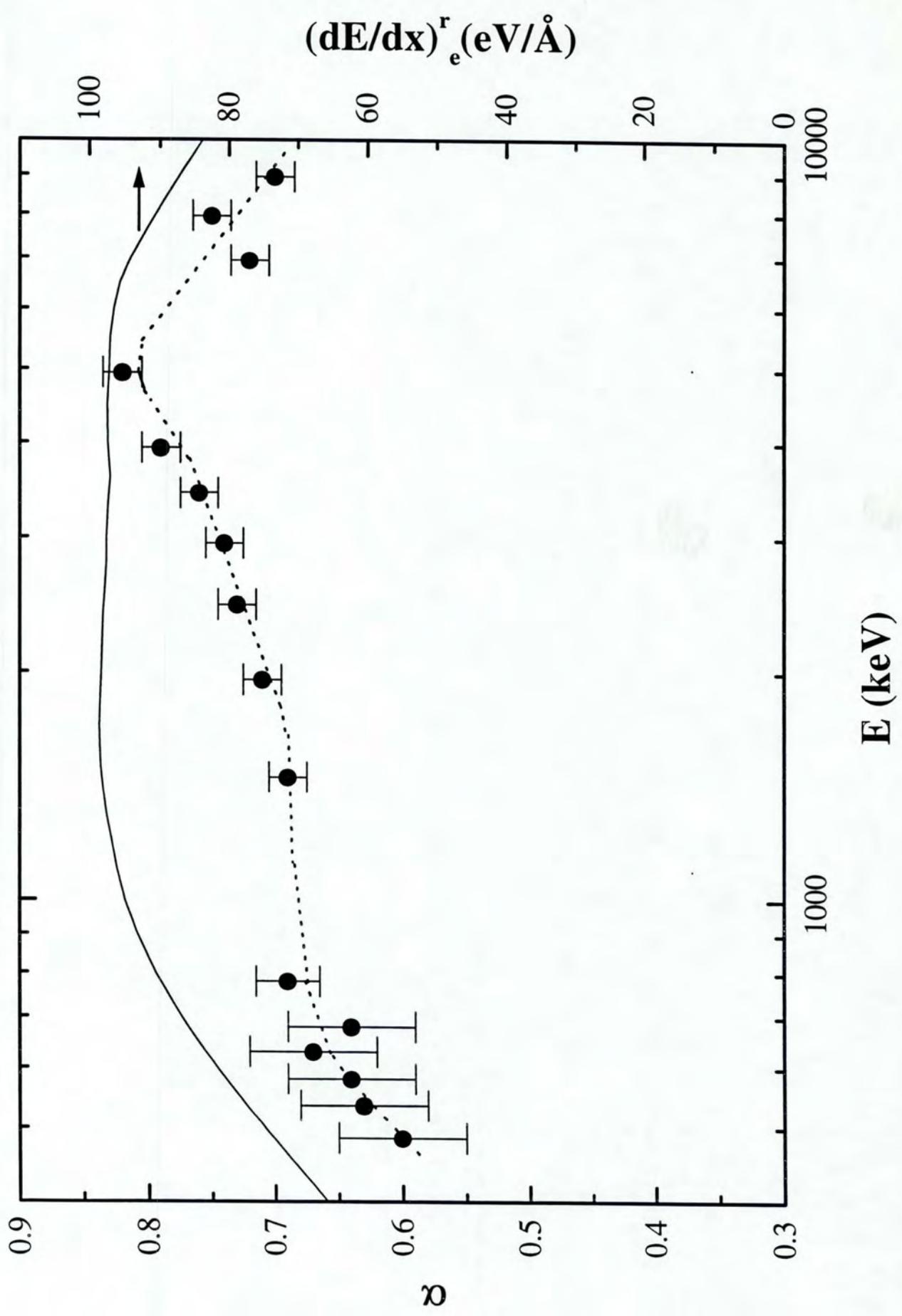


fig. 3



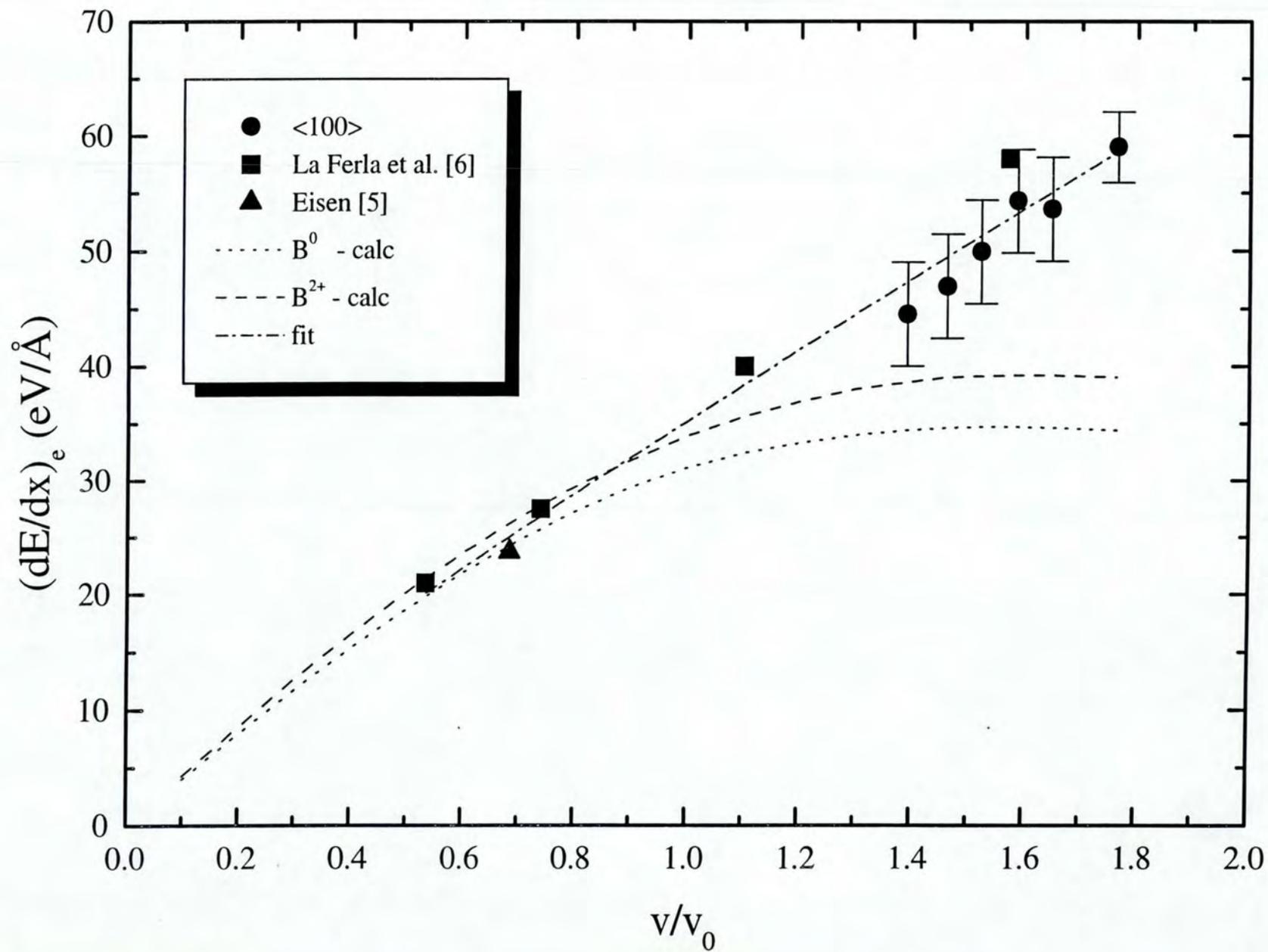
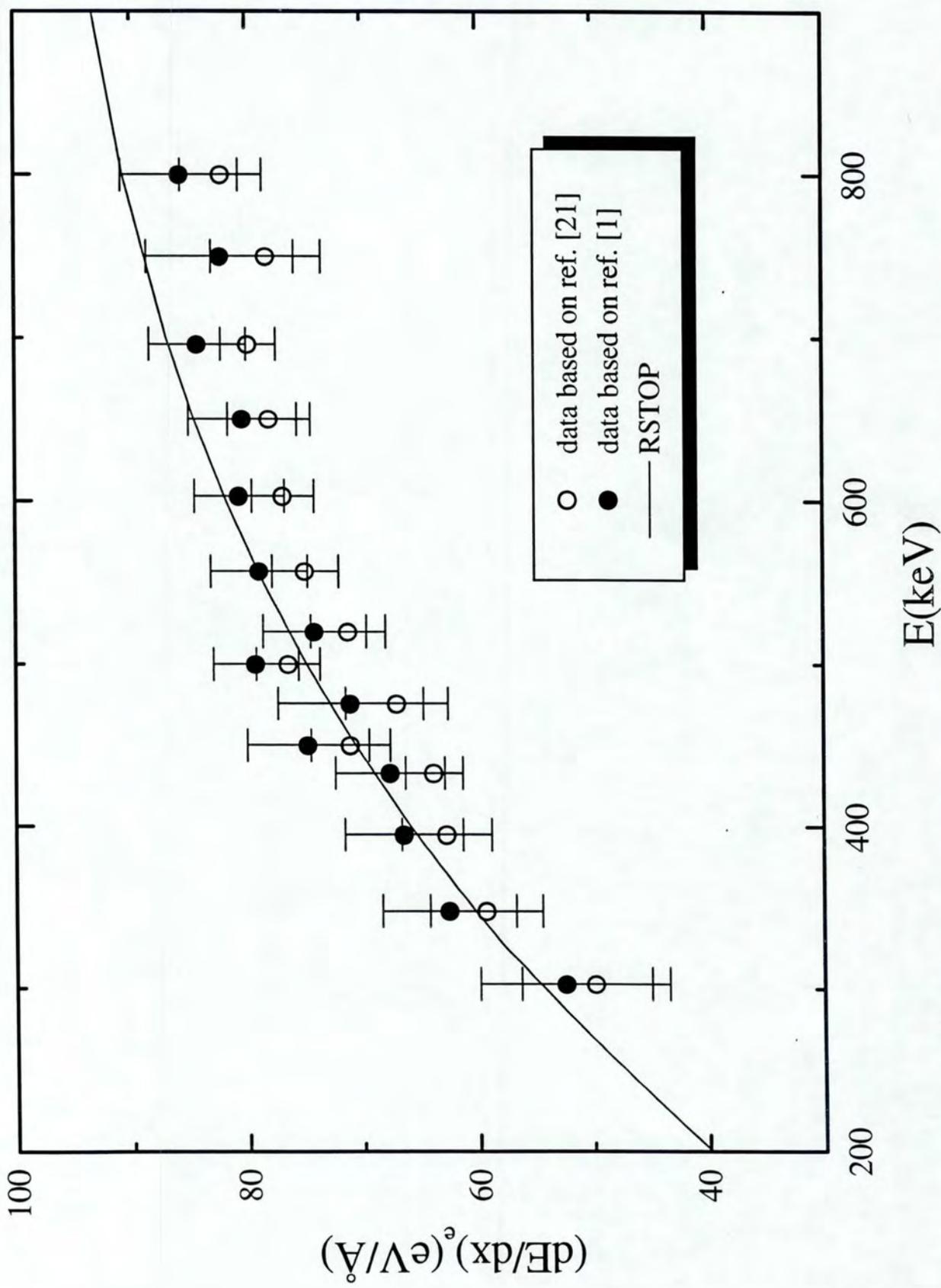
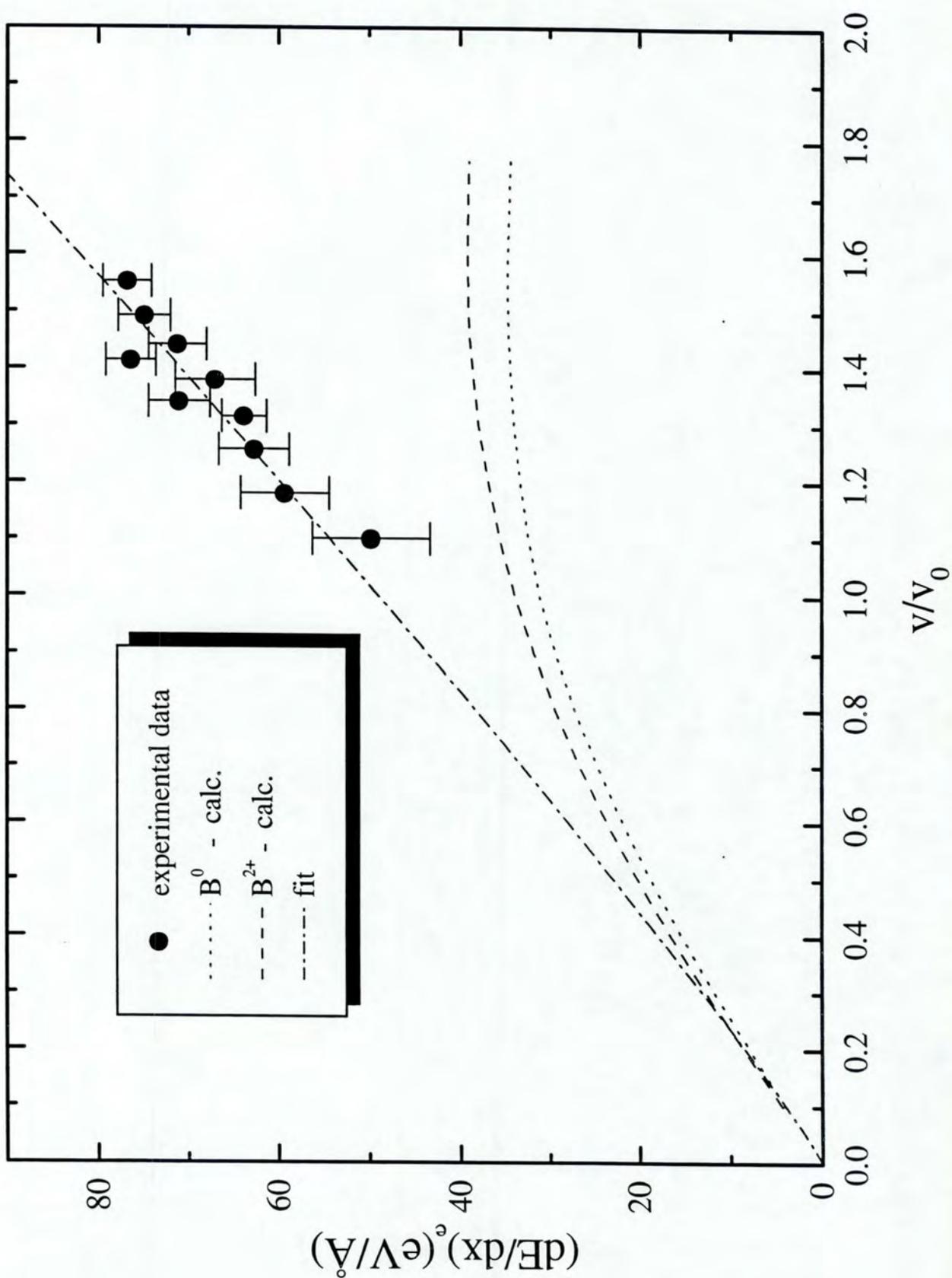


fig. 6





BIBLIOGRAFIA

ALBERTAZZI, E., BIANCONI, M., LULLI, G., NIPOTI, R., 1995. 12th International Conference on Ion Beam Analysis, IBA12. A ser publicado em **Nucl. Instr. Meth. B**.

ALTMAN, M.R., FELDMAN, L.C., GIBSON, W.M., 1970. **Phys. Rev. Lett.**, v. 24, p. 464.

ANDERSEN, H.H., ZIEGLER, J.F., 1977. Hidrogen stopping powers and ranges in all elements. In: ZIEGLER, J.F. **Stopping and ranges of ions in matter**. New York: Pergamon. v. 3.

ANDREEN, C.J., HINES, R.L., 1966. **Phys. Rev.**, v. 151, p. 341.

ANDREEN, C.J., HINES, R.L., MORRIS, W. WEBER, D., 1965. **Phys. Lett.**, v. 19, p. 116.

ANDREEN, C.J., WASSERMANN, E.F., HINES, R.L., 1966. **Phys. Rev. Lett.**, v. 16, p. 782.

APPLETON, B.R., DATZ, S., MOAK, C.D., ROBINSON, M.T., 1971. **Phys. Rev. B**, v. 4, p. 1452.

APPLETON, B.R., ERGYNSOY, C., GIBSON, W.M., 1967. **Phys. Rev.**, v. 161, p. 330.

APPLETON, B.R., ERGYNSOY, C., WEGNER, H.E., GIBSON, W.M., 1965. **Phys. Lett.**, v. 19, p. 185.

BARRET, J.H., 1971. **Phys. Rev. B**, v. 3, p. 1527.

BATES, P.R., GRIFFING, G., 1953. **Proc. Phys. Soc. A**, v. 66, p. 1961.

BAUR, G., PAULI, M., TRAUTMANN, D., 1974. **Nucl. Phys. A**, v. 211, p. 333.

BEHAR, M., FICHTNER, P.F.P., GRANDE, P.L., ZAWISLAK, F.C., 1995. **Mat. Sci. Eng. Rep.**, v. 15, n.1/2.

BETHE, H.A., JACKIW, R.W., 1968. **Intermediate quantum mechanics**. 2.ed. London: W.A. Benjamin.

BETZ, H.-D., 1972. **Rev. Mod. Phys.**, v. 64, p. 465.

BIERSACK, J.P., HAGGEMARK, L.G., 1980. **Nucl. Instrum. and Methods**, v. 174, p.

- 257.
- BOGEN, S., GONG, L., FREY, L., RYSSEL, H., 1993. *Nucl. Instr. Meth. B*, v. 80/81, p. 659.
- BOHR, N., 1948. *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, v. 18, n. 8.
- BOSHART, M.A., BAILES, A.A., DYGO, A., SEIBERLING, L.E., 1995. **12th International Conference on Ion Beam Analysis, IBA12.**
- BOSHART, M.A., DYGO, A., SEIBERLING, L.E., 1995. *Phys. Rev. A*, v. 51, p. 2637.
- BÖTTIGER, J., BASON, F., 1969. *Rad. Eff.*, v. 2, p. 105.
- BRANDT, W., 1968. *Sci. Am.*, v. 218, p. 90.
- BRANDT, W., KITAGAWA, M., 1982. *Phys. Rev. B*, v. 25, p. 5631.
- CALKIN, M.G., NICHOLSON, P.J., 1967. *Rev. Mod. Phys.*, v. 39, p. 361.
- CHADDERTON, L.T., ANDERSON, M.G., 1968. *Phys. Lett. A*, v. 27, p. 665.
- CEMBALI, F. ZIGNANI, F., 1977. *Radiat. Eff.*, v. 31, p. 169.
- CHEUNG, N.W., CULBERTSON, R.T., FELDMAN, L.C., SILVERMAN, D.J., WEST, K.W., MAYER, J.W., 1980. *Phys. Rev. Lett.*, v. 45, p. 120.
- CHU, W.-K., MAYER, J.W., NICOLET, M.-A., 1978. **Backscattering spectrometry.** New York: Academic.
- CLARK, G.J., DEARNALEY, G., MORGAN, D.V., POATE, J.M., 1969. *Phys. Lett. A*, v. 30, p. 11.
- CLARK, G.J., MORGAN, D.V., POATE, J.M., 1970. In: PALMER, D.W., THOMPSON, M.W. ed. **Atomic collisions in solids.** Amsterdam: North-Holland, p. 388.
- CRUZ, S.A., 1986. *Radiat. Eff.*, v. 88, p. 159.
- DATZ, S., MOAK, C.D., APPLETON, B.R., ROBINSON, M.T., OEN, S., 1970. In: PALMER, D.W., THOMPSON, M.W. ed. **Atomic collisions in solids.** Amsterdam: North-Holland, p. 374.
- DATZ, S., MOAK, C.D., NOGGLE, T.S., APPLETON, B.R., LUTZ, H.O., 1969. *Phys. Rev.*, v. 179, p. 315.
- DATZ, S., NOGGLE, T.S., MOAK, C.D., 1965a. *Nucl. Instrum. and Methods*, v. 38, p. 221.
- DATZ, S., NOGGLE, T.S., MOAK, C.D., 1965b. *Phys. Rev. Lett.*, v. 15, p. 254.
- DEARNALEY, G., 1964. *IEEE. Trans. Nucl. Sci.*, NS-11, p. 249.
- DEARNALEY, G., FARMERY, B.W., MITCHELL, I.V., NELSON, R.S., THOMPSON,

M.W., 1968a. In: **Solid state physics research with accelerators**, Brookhaven National Laboratory Report, n. BNL-50083, p. 125.

DEARNALEY, G., MITCHELL, I.V., NELSON, R.S., HARVWEL, A.E.R.E., FARMERY, B.W., 1968b. **Philos. Mag.**, v. 18, p. 985.

DELLA MEA, G., DRIGO, A.V., LO RUSSO, S., MAZZOLDI, P., BENTINI, G.G., 1971. **Phys. Rev. Lett.**, v. 27, p. 1194.

DELLA MEA, G., DRIGO, A.V., LO RUSSO, S., MAZZOLDI, P., BENTINI, G.G., 1972. **Radiat. Eff.**, v. 27, p. 1194.

DYGO, A., BOSHART, M.A., SEIBERLING, L.E., KABACHNIK, N.M., 1994a. **Phys. Rev. A**, v. 13, p. 115.

DYGO, A., LENNARD, W.N., MITCHEL, I.V., 1994b. **Nucl. Instrum. and Methods Phys. Res. Sect. B**, v. 84, p. 23.

DYGO, A., BOSHART, M.A., SEIBERLING, L.E., KABACHNIK, N.M., 1995. **Phys. Rev. A**, v. 50, p. 4979.

ECHENIQUE, P.M., NIEMINEN, R.M., RITCHIE, R.H., 1981. **Solid State Commun.**, v. 37, p. 779.

ECHENIQUE, P.M., NIEMINEN, R.M., ASHLEY, J.C., RITCHIE, R.H., 1981. **Phys. Rev. A**, v. 33, p. 897.

ECHENIQUE, P.M., RITCHIE, R.H., BRANDT, W., 1979. **Phys. Rev. B**, v. 20, p. 2567.

ECHENIQUE, P.M., URANGA, E., 1991. Density functional theory of stopping power. In: GRASS-MARTI, H.M., URBASSEK, H.M., ARISTA, N.R., FLORES, F. **Interaction of charged particles with solids and surfaces**. New York: Plenum. v. 271 de "NATO Advanced Study Institute", Série B: Physics.

EISEN, F.H., 1966. **Phys. Lett.**, v. 23, p. 401.

- 1968. **Can. J. Phys.**, v. 46, p. 561.

EISEN, F.H., CLARK, G.J., BÖTTIGER, J., POATE, J.M., 1972. **Radiat. Eff.**, v. 13, p. 93.

EISEN, F.H., ROBINSON, M.T., 1971. **Phys. Rev. B**, v. 4, p. 1457.

ERGINSOY, C., WEGNER, H.E., GIBSON, W.M., 1964. **Phys. Rev. Lett.**, v. 13, p. 530.

ERIKSSON, L., 1967. **Phys. Rev.**, v. 13, p. 530.

ERIKSSON, L., DAVIES, J.A., JESPERGAARD, P., 1967. **Phys. Rev.**, v. 161, p. 219.

- FARMERY, B.W., NELSON, R.S., SIZMANN, R., THOMPSON, M.W., 1965. **Nucl. Instrum. and Methods**, v. 38, p. 231.
- FELDMAN, L.C., SILVERMAN, P.J., WILLIAMS, J.S., JACKMAN, T.E., STENSGAARD, I., 1978. **Phys. Rev. Lett.**, v. 41, p. 1396.
- FIRSOV, O.B., 1959. **Sov. Phys. JETP**, v. 36, p. 1076.
- FUJIMOTO, F., KOMAKI, K., OZAWA, K., MANNAMI, M., SAKURAI, T., 1969. **Phys. Lett. A**, v. 23, p. 332.
- GEMMELL, D.S., 1974. **Rev. Mod. Phys.**, v. 46, p. 129.
- GEMMELL, D.S., MIKKELSON, R.C., 1972a. **Phys. Rev. B**, v. 6, p. 1613.
- GEMMELL, D.S., MIKKELSON, R.C., 1972b. **Radiat. Eff.**, v. 12, p. 21.
- GIBSON, W.M., ERGINSOY, C., WEGNER, H.E., APPLETON, B.R., 1965. **Phys. Rev. Lett.**, v. 15, p. 357.
- GIBSON, W.M., GOLOVCHENKO, J., 1972. **Phys. Rev. Lett.**, v. 28, p. 1301.
- GIBSON, W.M., RASMUSSEN, J.B., AMBROSIAZ-OLESEN, P., ANDREEN, C.J., 1969. **Can. J. Phys.**, v. 46, p. 551. Erratum: **Can. J. Phys.**, v. 47, p. 1756, 1969.
- GOLDSTEIN, H., 1980. **Classical mechanics**. 2.ed. Reading: Addison-Wesley.
- GOMBÁS, P., 1956. Statistische Behandlung des Atoms. In: FLÜGE, S. ed. **Handbuch der Physik**. Berlin: Springer-Verlag. Band XXXVI, S.109.
- GÖTZ, von G., KLINGE, K.D., SCWABE, F., 1975. **Exper. Tech. Phys.**, v. 223, p. 167.
- GRANDE, P.L., 1989. **Estudo do alcance de íons pesados ($29 \leq Z_1 \leq 83$) em alvos de berílio, carbono e dióxido de silício**. Tese de doutoramento. Porto Alegre, Curso de Pós-graduação em Física, UFRGS.
- GRANDE, P.L., SCHIWIEZ, G., 1992. **Phys. Lett. A**, v. 163, p. 439.
- GRANDE, P.L., SCHIWIEZ, G., 1993. **Phys. Rev. A**, v. 47, p. 1119.
- GRANDE, P.L., SCHIWIEZ, G., SIGAUD, G.M., MONTENEGRO, 1996. A ser publicado no **Phys. Rev. A**.
- HAMILTON, G.F., QUINTON, A.R., 1966. **Phys. Lett.**, v. 22, p. 312.
- HERMAN, F., SKILMANN, S., 1963. **Atomic structure calculations**. Englewood Cleffs: Prentice-Hall.
- HINES, R.L., 1970. **Phys. Lett. A**, v. 33, p. 348.
- HÖGBERG, G., NORDÉN, H., SKOOG, R., 1970. **Phys. Stat. Sol.**, v. 42, p. 441.
- HOLLAND, O.W., APPLETON, B.R., 1977. In: **Proceedings of the 4th Conference on**

the Scientific and Industrial Applications of Small Accelerators, Denton, Texas, USA, 27-29 Oct. 1976. New York, USA: IEEE, p. 585.

IBEL, K., SIZMANN, R., 1968. *Phys. Stat. Sol.*, v. 29, p. 403.

JACKSON, J. D., 1983. *Eletrodinâmica clássica*. 2.ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois.
von JAN, R., 1967. *Phys. Rev. Lett.*, v. 18, p. 303.

JANS, S., OBERSCHACHTSIEK, P., KALBITZER, S., BEHAR, M., 1993. *Nucl. Instrum. and Methods Phys. Res. Sect. B*, v. 83, p. 1.

JIN, H.S., GIBSON, W.M., 1986. *Nucl. Instrum. and Methods Phys. Res. Sect. B*, v. 13, p. 76.

KITTEL, C., 1978. *Introdução à física de estado sólido*. 5.ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois.

KONONOV, B.A., STRUTS, V.K., 1969. *Fiz. Tverd. Tela*, v. 11, p. 3577. [Sov. Phys.-Solid State, v. 11, p. 2994, 1970.]

LA FERLA, A., GALVAGNO, G., RAINERI, V., SETOLA, R., RIMINI, E., CARNERA, A., GASPAROTO, A., 1992. *Nucl. Instrum. and Methods Phys. Res. Sect. B*, v. 66, p. 339.

LA FERLA, A., RIMINI, E., CARNERA, A., GASPAROTO, A., CIAVOLA, G., FERLA, G., 1994. *Radiat. Eff.*, v. 129, p. 133 e referências lá contidas.

LINDHARD, J., 1954. *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, v. 28, n.8.

LINDHARD, J., 1965. *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, v. 34, n.14.

LINDHARD, J., SCHARFF, M., 1953. *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, v. 27, n.15.

LINDHARD, J., SCHARFF, M., 1954. *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, v. 22, n.8.

LINDHARD, J., SCHARFF, M., 1961. *Phys. Rev.*, v. 124, p. 128.

LINDHARD, J., SCHARFF, M., SCHIØTT, H.E., 1963. *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, v. 33, n.8.

LINDHARD, J., WINTHER, Aa., 1964. *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.*, v. 34, n.4.

LUNTZ, M., BARTRAM, R.H., 1968. *Phys. Rev.*, v. 175, p. 468.

LUTZ, H.O., AMBROS, R., MAYER-BÖRICHKE, C., REICHELDT, K., ROGGE, M., 1971. *Z. Naturforsch. A*, v. 26, p. 1105.

LUTZ, H.O., DATZ, S., MOAK, C.D., NOGGLE, T.S., 1966. *Phys. Rev. Lett.*, v. 17, p.

285.

MCDOWELL, M.R.C., COLEMAN, J.P., 1970. **Introduction to the theory of ion - atom collisions**. Amsterdam: North-Holland.

MACHLIN, E.S., PETRALIA, S., DESALVO, A., MISSIROLI, G.F., ZIGNANI, F., 1968. **Nouovo Cimento B**, v. 55, p. 263.

MACHLIN, E.S., PETRALIA, S., DESALVO, A., ROSA, R., ZIGNANI, F., 1970. **Philos. Mag.**, v. 22, p. 101.

MANN, A., BRANDT, W., 1981. **Phys. Rev. B**, v. 25, p. 4999

MANNAMI, M., FUJIMOTO, F., OZAWA, K., 1968. **Phys. Lett. A**, v. 26, p. 201.

MANNAMI, M., SAKURAI, T., OZAWA, K., FUJIMOTO, F., KOMAKI, K., 1970. **Phys. Stat. Sol.**, v. 38, K1.

MARION, J.B., 1970. **Classical dynamics of particles and systems**. New York: Academic.

MONTENEGRO, E.C., MEYERHOF, W.E., 1991. **Phys. Rev. A**, v. 43, p. 2289.

MORGAN, D.V. ed., 1973. **Channeling: theory, observations and applications**. London: John Willey.

MORGAN, D.V., van VLIET, D., 1971. **Radiat. Eff.**, v. 8, p. 51.

MORITA, K., ITOH, N., 1971. **J. Phys. Soc. Jap.**, v. 30, p. 1430.

NIEMANN, D., OBERSHACHTSIEK, P., KALBITZER, S., ZEINDL, H.P., 1993. **Nucl. Instrum. and Methods Phys. Res. Sect. B**, v. 80/81, p. 37.

OEN, O.S., ROBINSON, M.T., 1963. **Appl. Phys. Lett.**, v. 2, p. 83.

OOSTERHOFF, S., 1988. **Nucl. Instrum. and Methods Phys. Res. Sect. B**, v. 30, p. 1.

PIERCY, G.R., McCARGO, M., BROWN, F., DAVIES, J.A., 1964. **Can. J. Phys.**, v. 42, p. 1116.

RAINERI, V., GALVAGNO, G., RIMINI, E., BIRSACK, J.P., NAKAGAWA, S.T., LA FERLA, A., CARNERA, A., 1991. **Radiat. Eff.**, v. 116, p. 211.

REMILLIEUX, J., SAMUELI, J.J., SARAZIN, A., 1967. **Journal de Physique**, v. 28, p. 832.

RITCHIE, R.H., 1959. **Phys. Rev.**, v. 114, p. 644.

SANT'ANNA, M.M, MELO, W.S., SANTOS, A.C.F., SIGAUD, G.M., MONTENEGRO, E.C., 1995. **Nucl. Instrum. and Methods Phys. Res. Sect. B**, v. 99, p. 46.

- dos SANTOS, J. H. R., GRANDE, P. L., BEHAR, M., BOUDINOV, H., SCHIWIEZ, G., 1997. **Phys. Rev. B**, v. 55, p. 1.
- dos SANTOS, J. H. R., GRANDE, P. L., BEHAR, M., BOUDINOV, H., STOLL, R., KLATT, Chr., KALBITZER, S., 1996. Submetido ao **Phys. Rev. B**.
- dos SANTOS, J. H. R., GRANDE, P. L., BOUDINOV, H., BEHAR, M., 1994. In: S. Coffa, G. Ferla, F. Priolo, E. Rimini (eds.). **Ion Implantation Technology - 94**, p.711.
- dos SANTOS, J. H. R., GRANDE, P. L., BOUDINOV, H., BEHAR, M., STOLL, R., KLATT, Chr., KALBITZER, S., 1995. **Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. B**, v. 106, p. 51.
- dos SANTOS, J. H. R., GRANDE, P. L., BOUDINOV, H., BEHAR, M., STOLL, R., KLATT, Chr., KALBITZER, S., 1996. Aceito para publicação no **Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B**.
- SATTLER, A.R., BRICE, D.K., 1968. In: **Solid state physics research with accelerators**, Brookhaven National Laboratory Report, n. BNL-50083, p. 96.
- SATTLER, A.R., DEARNALEY, G., 1965. **Phys. Rev. Lett.**, v. 15, p. 59.
- SATTLER, A.R., DEARNALEY, G., 1967. **Phys. Rev.**, v. 161, p. 244.
- SATTLER, A.R., VOOK, F.L., 1968. **Phys. Rev.**, v. 175, p. 526.
- SCHIWIEZ, G., 1990. **Phys. Rev. A**, v. 42, p. 296.
- SCHIWIEZ, G., GRANDE, P.L., 1992. **Nucl. Instrum. and Methods Phys. Res. Sect. B**, v. 69, p. 10.
- SCHIWIEZ, G., GRANDE, P.L., 1994a. **Nucl. Instrum. and Methods Phys. Res. Sect. B**, v. 90, p. 10.
- SCHIWIEZ, G., GRANDE, P.L., 1994b. **Radiat. Eff. Defects in Solids**, v. 130, p. 137.
- SHIPATOV, E.T., 1968. **Fiz. Tekh. Poluprovodn.**, v. 2, p. 1690. [**Sov. Phys.-Semicond.**, v. 2, p. 1408, 1969.]
- SHIPATOV, E.T., 1968. **Fiz. Tverd. Tela**, v. 10, p. 2709. [**Sov. Phys.-Solid State**, v. 10, p. 2132.]
- SIGMUND, P., 1991. Statistics of charged particles penetration. In: GRASS-MARTI, H.M., URBASSEK, H.M., ARISTA, N.R., FLORES, F. **Interaction of charged particles with solids and surfaces**. New York: Plenum. v. 271 de "NATO Advanced Study Institute", Série B: Physics.
- Stedile, Fernanda C., 1993. **Análise por feixes de íons de filmes finos dielétricos depositados por sputtering reativo e crescidos termicamente**. Tese de doutoramento. Porto Alegre, Curso de Pós-graduação em Física, UFRGS.

STOEMENOS, J., 1988. **Solid State Phenomena**, v. 182, p. 115.

TESMER, J., NASTASI, M. ed., 1995. **Handbook of modern ion beam materials analysis**. Pittsburg: Materials Research Society.

WAMPLER, W.R., 1995. ~~Phys. Rev. B~~, v. 51, p. 4998.

WEGNER, H.E., ERGINSOY, C., GIBSON, W.M., 1965. **IEEE Trans. Nucl. Sci.**, NS-12, p. 240.

WILSON, R.G., 1987. **J. Appl. Phys.**, v. 61, p. 2489.

ZIEGLER, J.F., BIRSACK, J.P., LITTMARK, U., 1985. The stopping and range in solids. In: ZIEGLER, J.F. ed. **The stopping and ranges of ions in matter**. New York: Pergamon. v. 1.