Problema 1: Espectrometría de Retrodispersión de Rutherford[1] (25 puntos)

Una técnica moderna para caracterizar capas delgadas de distintos materiales, conocida como *Espectrometría de Retrodispersión de Rutherford* (ERR) se basa en hacer que incidan iones ligeros de masa y energía cinética conocidas sobre la superficie de una muestra y medir la energía cinética de los iones rechazados en determinada dirección. Con el adecuado procesamiento de las mediciones de la cantidad de iones dispersados en función de la energía cinética, se pueden conocer cuántos y cuáles elementos químicos componen la muestra, en que proporciones están, sus perfiles de concentración, cuántas capas delgadas se tiene (en caso de que haya más de una) y el espesor de cada una. Los siguientes incisos de este problema son, de hecho, una buena primera aproximación a la ERR, utilizando conocimientos de Física General.

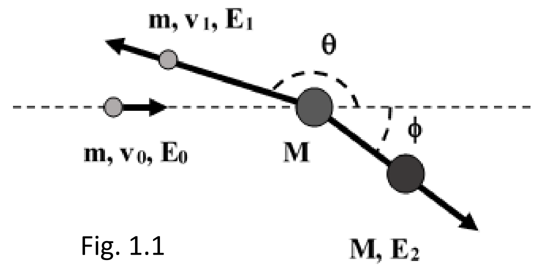

Fig. 1.1

En el sistema de referencia del laboratorio, un choque de dos partículas puede representarse como en la figura 1.1. Cuando una partícula de masa m y energía cinética E_0 choca elásticamente con otra de masa M ($M > m$) que está en reposo en el sistema de referencia del laboratorio, la partícula incidente es rechazada con una energía cinética E_1 según un ángulo θ en relación con la dirección de incidencia. El cociente:

$$\frac{E_1}{E_0} = K\ (m, M, \theta)$$

es llamado *factor cinemático* y satisface la siguiente igualdad:

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

Para valores prefijados de m y θ, el valor de K depende sólo de M y se puede escribir $K_M = \frac{E_1}{E_0}$. La tabla I contiene los valores de K_M para algunos elementos químicos.

Tabla I

Elemento químico	Z	M (u)	K_M [Iones: ^4He, $\theta = 165^0$]
He	2	4.003	-
C	6	12.011	0.255
O	8	15.999	0.366
Al	13	26.981	0.549
Si	14	28.086	0.567
Ti	22	47.900	0.719
Zn	30	65.370	0.784
Te	52	127.600	0.884
Pt	78	195.090	0.922
Au	79	196.670	0.923
Pb	82	207.190	0.927

a) Cuando un haz de iones de energía cinética E_0 incide sobre una muestra sólida, una parte de ellos es dispersadaal chocar con núcleos atómicos en la superficie de la muestra y otra parte al chocar con núcleos dentro del material. La energía de los iones retrodispersados en la superficie por núcleos de masa M en la dirección θ es $K_M E_0$. Por otra parte, los que penetran en la muestra,

[1]El espectro reportado en este problema está inspirado en el utilizado en el artículo: S. Larramendi, F. C. Zawislak, M. Behar, E. Pedrero, M. Hernández Vélez, O. de Melo, J. Crystal Growth 312 (2010) 892- 896

pierden energía cinética durante su movimiento dentro de ella y los que emergen en la dirección θ, tienen una energía cinética $K_M E_0 - \Delta E_M$. Asumiendo que la capa delgada superficial tiene un espesor d y que la pérdida de energía cinética por unidad de longitud ($\frac{dE}{dx} > o$) es constante, demuestre que:

$$\Delta E_M = (K_M + \frac{1}{|\cos\theta|})(\frac{dE}{dx})d \qquad (2)$$

b) Un haz de iones de ^4_2He con energía cinética de 3 MeV incide en dirección normal a la superficie de una muestra consistente de una capa delgada que ha sido depositada sobre un sustrato. Un detector mide la energía cinética de los iones dispersados según un ángulo $\theta = 165^0$. Si la distribución de energía cinética de los iones dispersados que llegan al detector es como la representada en la Fig. 1.2. i) ¿Cuántos elementos componen la muestra irradiada con esos iones?; ii) ¿cuáles elementos componen la capa delgada de espesor *d*?; iii) ¿cuál es el espesor de la capa delgada de la muestra?; iv) ¿cuáles elementos componen el substrato? [Utilice los datos que necesite de la tabla 1 y la Fig. 1.2].

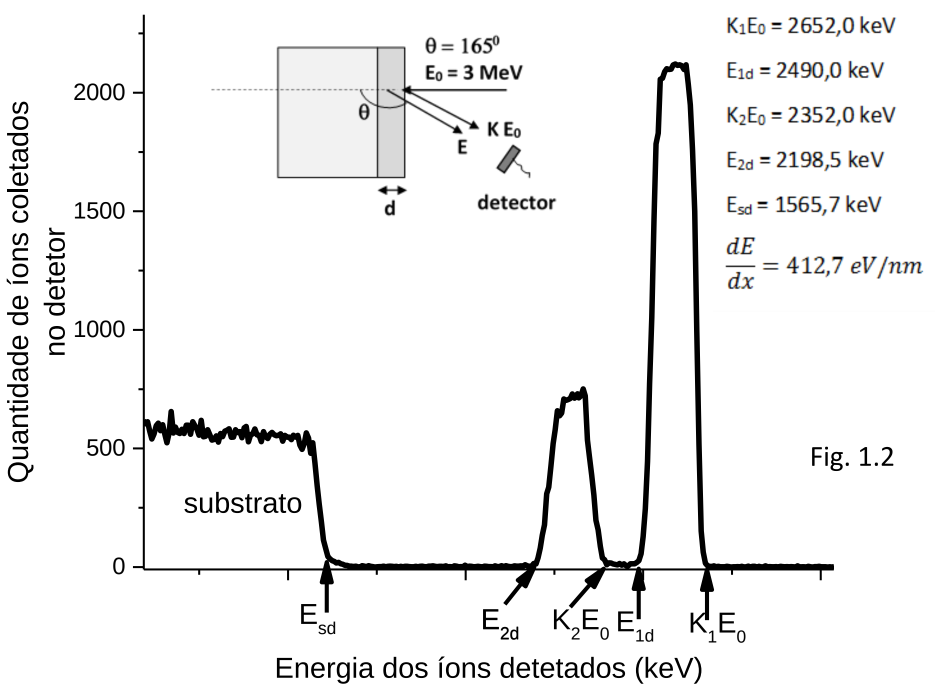

Fig. 1.2

c) Demuestre que el factor cinemático $\frac{E_1}{E_0} = K\ (m, M_2\ , \theta)$ está dado por la fórmula (1).

Respuesta a la pregunta a (5 ptos.)

De acuerdo con el enunciado, durante el movimiento de los iones dentro de la muestra éstos pierden energía cinética a una razón constante $\frac{dE}{dx}$, lo cual significa que desde que los iones entran en la muestra por la superficie exterior hasta que alcanzan la otra superficie de la capa de espesor d, pierden una cantidad de energía $\Delta_{int} = \left(\frac{dE}{dx}\right) d$, en tanto que los iones dispersados en la segunda superficie (situada a una profundidad d desde la primera), durante el trayecto desde la superficie posterior hasta que salen de la muestra hacia el detector, pierden una cantidad energía cinética $\Delta_{out} = \left(\frac{dE}{dx}\right) \frac{d}{|\cos\theta|}$.

Sea E_{0d} la energía de los iones que atravesaron la capa delgada desde la superficie exterior hasta la otra, que separa la capa del sustrato. Entonces $E_{0d} = E_0 - \Delta_{int}$ = $E_0 - \left(\frac{dE}{dx}\right) d$. [Nota: Al poner el signo negativo delante de $\left(\frac{dE}{dx}\right)$, s está asumiendo $\left(\frac{dE}{dx}\right) > 0$].

Por otra parte, los iones dispersados en la superficie posterior de la capa delgada en dirección al detector inician el recorrido con una energía cinética $KE_{0d} = K\left[E_0 - \left(\frac{dE}{dx}\right) d\right]$. Los iones que emergen de la capa delgada en dirección al detector, recorren una distancia $\frac{d}{|\cos\theta|}$ por lo que pierden una energía $\left(\frac{dE}{dx}\right)\frac{d}{|\cos\theta|}$ en ese segmento de trayectoria.

Así, en total, dentro de la muestra, los iones pierden una energía cinética dada por

$$\Delta E_M = KE_0 - \left[KE_{0d} - \left(\frac{dE}{dx}\right)\frac{d}{|\cos\theta|}\right] = KE_0 - K\left[E_0 - \left(\frac{dE}{dx}\right) d\right] + \left(\frac{dE}{dx}\right)\frac{d}{|\cos\theta|} =$$

$$KE_0 - KE_0 + K\left(\frac{dE}{dx}\right) d + \left(\frac{dE}{dx}\right)\frac{d}{|\cos\theta|} = K\left(\frac{dE}{dx}\right) d + \left(\frac{dE}{dx}\right)\frac{d}{|\cos\theta|} = \left(\frac{dE}{dx}\right) d\left[K + \frac{1}{|\cos\theta|}\right]$$

O sea, $\Delta E_M = \left[K + \frac{1}{|\cos\theta|}\right]\left(\frac{dE}{dx}\right) d$ LQQD

Esta última fórmula es genérica en el sentido de que válida para cualquiera sea el elemento químico contra cuyos átomos chocan los iones. En particular, si sólo hay i (i=1, 2, …) elementos, de masas M_i, entonces

$\Delta E_i = \Delta E_i = \left(K_i + \frac{1}{|\cos\theta|}\right)\left(\frac{dE}{dx}\right) d.$ **LQQD**

Respuesta a la pregunta b (10 ptos.)

i) ¿cuántos elementos componen la muestra irradiada con esos iones? (1 pto)

Como en la Fig. 2 sólo hay dos picos de energía cinética de los iones detectados, cuyos máximos valores son $K_1 E_0$ y $K_2 E_0$, respectivamente, entonces la capa superficial de espesor d tiene solamente dos elementos, de masas M_1 y M_2, donde $M_1 > M_2$. Los valores de energía $\leq K_s E_d$ corresponden al sustrato.

Por tanto, la muestra está compuesta por 3 elementos: dos en la capa delgada de espesor d y uno en el sustrato.

ii) ¿Cuáles elementos componen la capa delgada de espesor *d*? (3 Ptos)

De acuerdo con los datos de la Fig. 2, la energía cinética con que salen rechazados los iones en la primera superficie al chocar con átomos de mayor masa es,

$$E_1 = K_1 \cdot E_0 \ = 2652.0 \ keV$$

de donde 2652,0 $keV = K_1(\ 3000{,}0\ keV)$

$$\frac{E_1}{E_0} = \ K_1 = \frac{2652{,}0\ keV}{3000{,}0\ keV} = 0.884$$

En la tabla I este valor de $K_1 = K\ \left(M_{\ ^4He}, M_1\ , 165^0\right)$ corresponde al teluro (Te)

Análogamente, al chocar los iones en la superficie con los núcleos de masa M_2:

$$E_2 = K_2 \cdot E_0 \ = 2352.0 \ keV$$

de donde 2352,0 $keV = K_2(\ 3000{,}0\ keV)$,

$$\frac{E_2}{E_0} = \ K_2 = \frac{2352{,}0\ keV}{3000{,}0\ keV} = 0.784$$

Este otro valor de K_i corresponde al elemento zinc (Zn) en la tabla I.

Luego, los elementos son: teluro y zinc. La capa semiconductora es de ZnTe.

iii) ¿Cuál es el espesor d de la capa superficial de la muestra? (3 ptos)

El espesor se puede calcular despejando d en la (3) y sustituyendo los valores calculados de K y los de θ, $\frac{dE}{dx}$, ΔE dados en la Fig. 2, para cualquiera de los dos picos.

Para el pico de teluro, sustituyendo $\theta = 165^0, \frac{dE}{dx} = 412.7 \frac{eV}{nm} = 0.4127 \frac{keV}{nm},\ K_1 = K_{Te} =$ 0,884 y $\Delta E_1 = \Delta E_{Te} = K_1 \cdot E_0 - E_{1d}\ = 2652.0\ \text{keV} - 2490.0\ \text{keV} = 162.0\ \text{keV}$ en

$d_1 = \frac{\Delta E_1}{(K_1 + \frac{1}{|\cos\theta|})(\frac{dE}{dx})} = \frac{162.0 \; keV}{(0.884 + \frac{1}{|\cos 165^0|})(0.4127 \frac{keV}{nm})} = \frac{162.0 \; keV}{(0,884 + \frac{1}{|-0.9659258263|})(0.4127 \frac{keV}{nm})} = \frac{162,0 \, keV}{(0.884 + 1.03527618)(0.4127 \frac{keV}{nm})} = \frac{162,0}{(1.81927618)(0.4127)} nm = \frac{162,0}{0.7920852795} nm \approx 204.5234 \, nm \approx 204.5 \, nm.$

$$d_1 = 204.5 \, nm$$

Para el pico de zinc, sustituyendo $\theta = 165^0, \frac{dE}{dx} = 412.7 \frac{eV}{nm} = 0.4127 \frac{keV}{nm}, \; K_2 = K_{Zn} = 0.784$

y $\Delta E_2 = \Delta E_O = K_2 \cdot E_0 - E_{2d} = 2352.0 \, keV - 2198.5 \text{ keV} = 153.5 \text{ keV}$ en

$$d_2 = \frac{\Delta E_2}{(K_2 + \frac{1}{|\cos\theta|})(\frac{dE}{dx})} = \frac{153.5 \, keV}{(0.784 + \frac{1}{|\cos 165^0|})(0.400 \frac{keV}{nm})}$$
$$= \frac{153.5 \, keV}{(0.784 + \frac{1}{|-0.9659258263|})(0.400 \frac{keV}{nm})}$$
$$= \frac{153.5 \, keV}{(0.784 + 1.03527618)(0.4127 \frac{keV}{nm})} = \frac{153.5}{(1.81927618)(0.4127)} nm$$
$$= \frac{153.5}{0.7508152795} nm \approx 204.4444 \, nm$$

$$d_2 = 204.44 \, nm$$

iv) ¿Cuáles elementos componen el sustrato? (3 Ptos)

Los valores de $E \leq E_{sd} = 1565{,}7 \, keV$ corresponden al sustrato, porque los iones chocan con los núcleos atómicos luego de:

i) perder una cantidad de energía $\geq (\frac{dE}{dx})d$para atravesar la capa de Te y Zn, por lo cual llegan a la superficie(interface) sustrato/capa delgada con energía $E_{0d} = E_0 - (\frac{dE}{dx})d$,

ii) ser dispersados con energía $K_s \left[E_0 - (\frac{dE}{dx})d\right]$en esa superficieal chocar con átomos del sustrato,

iii) perder otra cantidad de energía $\left(\frac{dE}{dx}\right)\frac{d}{|\cos\theta|}$ en el trayecto de salida hacia el detector.

Por eso,

$$E_{sd} = K_s \left[E_0 - (\frac{dE}{dx})d\right] - \left(\frac{dE}{dx}\right)\frac{d}{|\cos\theta|} \qquad (4)$$

Despejando K_s en (4) y sustituyendo $E_{sd} = 1565.7\ keV$, $\theta = 165^0$,$\frac{dE}{dx} = 0.4127\frac{keV}{nm}$, $d = 204.6\ nm$, $E_0 = 3000.0\ keV$se obtiene:

$$K_s = \frac{E_{sd}+\left(\frac{dE}{dx}\right)\frac{d}{|\cos\theta|}}{E_0-(\frac{dE}{dx})d} = \frac{1565.7\ keV+\left(0.4127\frac{keV}{nm}\right)\left(\frac{204.6\ nm}{|\cos 165^0|}\right)}{3000.0\ keV-\left(0.4127\frac{keV}{nm}\right)(204.6\ nm)} = \frac{1565.7\ keV+\left(0.4127\frac{keV}{nm}\right)\left(\frac{204.6\ nm}{0.9659258263}\right)}{3000.0\ keV-40.0\ keV} = \frac{1565.7\ keV+87.4\ keV}{2915.6\ keV} = \frac{1653.1\ keV}{2915.6\ keV} = 0.56698 \approx \mathbf{0.567}.$$

En la tabla 1 $K_M = 0.567$ corresponde al silicio. Esto significa que **el sustrato está constituido por silicio**.

Respuesta a la pregunta c (10 ptos.)

Tomando en cuenta que se trata de choques elásticos, se conservan la energía mecánica y la cantidad de movimiento lineal. Por eso, considerando la notación de la Fig. 1, se pueden escribir las ecuaciones (1), (2) y (3): dar **4 ptos (por plantear las ecuaciones de conservación)**

$$\frac{1}{2}mv_0^2 = \frac{1}{2}mv_1^2 + \frac{1}{2}Mv_2^2 \quad (1)$$

$$mv_0 = mv_1\cos\theta + Mv_2\cos\emptyset \quad (2)$$

$$0 = mv_1\sin\theta + Mv_2\sin\emptyset \quad (3)$$

De (2) y (3) se obtienen las ecuaciones (4) y (5):

$$mv_0 - mv_1\cos\theta = Mv_2\cos\emptyset \quad (4)$$

$$mv_1\sin\theta = Mv_2\sin\emptyset \quad (5)$$

Para eliminar la variable$\emptyset$ buscando que solo esté el ángulo θ, se puede elevar al cuadrado (4) y (5), con lo cual se obtienen las ecuaciones (6) y (7), que luego se suman dando la (8):

$$m^2(v_0 - v_1\cos\theta)^2 = M^2{v_2}^2\cos^2\emptyset \quad (6)$$

$$m^2{v_1}^2\sin^2\theta = M^2{v_2}^2\sin^2\emptyset \quad (7)$$

Sumando (6) y (7):

$m^2(v_0 - v_1\cos\theta)^2 + m^2{v_1}^2\sin^2\theta = M^2{v_2}^2(\cos^2\emptyset + \sin^2\emptyset)$ y

$$m^2(v_0 - v_1\cos\theta)^2 + m^2{v_1}^2\sin^2\theta = M^2{v_2}^2 \quad (8)$$

Para eliminar la variable v_2 se usan las ecuaciones (2) y (8). Primero se despeja v_2 en (1) con lo que resulta la (9), después de sustituye la (9) en la (8):

De (1):

$$v_2^2 = \frac{m\,(v_0^2 - v_1^2)}{M} \quad (9)$$

De (8) y (9):

$$m^2(v_0 - \ v_1\cos\theta)^2 + m^2{v_1}^2\sin^2\theta = M^2[\frac{m(v_0^2 - v_1^2)}{M}]$$

$$m\ (v_0 - \ v_1\cos\theta)^2 + m{v_1}^2\sin^2\theta = M(v_0^2 - v_1^2)$$

mv_0^2-$2mv_0v_1\cos\theta + m{v_1}^2\cos^2\theta + m{v_1}^2\sin^2\theta = Mv_0^2 - Mv_1^2$

mv_0^2-$2mv_0v_1\cos\theta + m{v_1}^2(\cos^2\theta + \sin^2\theta) = Mv_0^2 - Mv_1^2$

mv_0^2-$2mv_0v_1\cos\theta + m{v_1}^2 = Mv_0^2 - Mv_1^2$ (10).

Dividiendo (10) entre v_0^2:

m-$2m\frac{v_1}{v_0}\cos\theta + m\frac{{v_1}^2}{v_0^2} = M - M\frac{v_1^2}{v_0^2}$ y reagrupando se obtiene la (11):

$(m + M_2)\left(\frac{{v_1}^2}{v_0^2}\right) - 2m\cos\theta\left(\frac{v_1}{v_0}\right) + (m - M_2) = 0$ (11), que es de la forma

$ax^2 \ + \ bx \ + c \ = \ 0$, con solución general $x = \frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$.

De ahí que

$$\left(\frac{v_1}{v_0}\right) = \frac{2m\cos\theta \pm \sqrt{4m^2\cos^2\theta - 4(m+M)(m-M)}}{2(m+M)} =$$

$$\left(\frac{v_1}{v_0}\right) = \frac{m\cos\theta \pm \sqrt{m^2\cos^2\theta - m^2 + M^2}}{(m+M)} = \frac{m\cos\theta \pm \sqrt{M^2 - m^2\sin^2\theta}}{(m+M)} \quad (12)$$

En nuestro caso, $M > m$ y la (12) admite solución real diferente de cero solamente si se toma el signo positivo delante del radical:

$\left(\frac{v_1}{v_0}\right) = \frac{m\cos\theta + \sqrt{M^2 - m^2\sin^2\theta}}{(m+M)}$ (13)

Como $E_0 = \frac{1}{2}mv_0^2$ y $E_1 = \frac{1}{2}mv_1^2$, entonces $\frac{E_1}{E_0}$=$\left(\frac{v_1}{v_0}\right)^2$. Por tanto, elevando al cuadrado la (13):

$\frac{E_1}{E_0}$=$\left(\frac{v_1}{v_0}\right)^2 = \frac{\left[m\cos\theta + \sqrt{M^2 - m^2\sin^2\theta}\right]^2}{(m+M)^2}$

$$\frac{E_1}{E_0} = \left[\frac{m\cos\theta + \sqrt{M^2 - \ m^2\sin^2\theta}}{(m+M)}\right]^2$$

y multiplicando arriba y abajo del miembro de la derecha por $\frac{1}{M}$

Se obtiene la expresión $\frac{E_1}{E_0} = K\,(m, M\,, \theta) = [\frac{(1-\left(\frac{m}{M}\right)^2 \sin\theta^2)^{1/2} + \frac{m}{M}\cos\theta}{1+\frac{m}{M}}]^2$ (1) ***LQQD***