

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

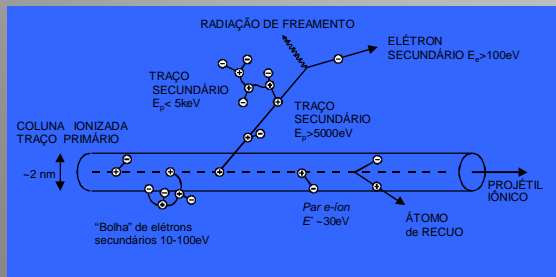
PGF5207 - Técnicas de Raios-X e de feixe iônico
aplicados à análise de materiais

Manfredo H. Tabacniks

FI4 – Introdução à Espectroscopia de Retroespalhamento Rutherford

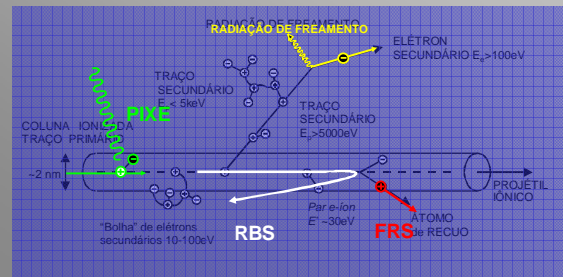
OUTUBRO		
5/10	FI-1	Revisão: Interação de fótons (raios X) com a matéria para análise elementar: Absorção e emissão de raios X característicos. Interação de íons energéticos com a matéria: Poder de freamento, excitação eletrônica, espalhamento elástico.
19/10	FI-2	Raios X para análise elementar: Fundamentos dos métodos XRF e PIXE. Análise qualitativa e quantitativa elementar.
26/10	FI-3	Instrumentação, bases de dados e softwares para análise e simulação de espectros de raios X.
NOVEMBRO		
12/11	Extra	Laboratório PIXE no LAMFI (1/2 dia cada grupo)
6/11	FI-4	Fundamentos da Espectrometria de Retroespalhamento Rutherford, RBS. Análise e interpretação de espectros RBS.
13/11	FI-5	Instrumentação, bases de dados e softwares para análise e simulação de espectros RBS. Exemplos e exercícios.
27/11	FI-6	Aplicações avançadas: Difusão em filmes finos, rugosidade, filmes multicamada e multielementares; análise PIXE de amostras espessas. Análises PIXE em feixe externo.
3/12	Extra	Laboratório RBS no LAMFI (1/2 dia cada grupo)
4/12	FI-7	Análise dos dados de RBS. Início da prova
DEZEMBRO		
11/12	FI-8	Fim da Prova: Métodos de análise com feixes iônicos e com raios X.

Principais processos de freamento de íons na matéria...



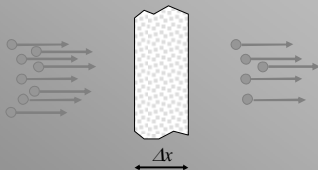
Adaptado de Choppin, Lijezin e Rydberg, Radiochemistry and Nuclear Chemistry, 2000

... e seu uso na análise de materiais



Adaptado de Choppin, Lijezin e Rydberg, Radiochemistry and Nuclear Chemistry, 2000

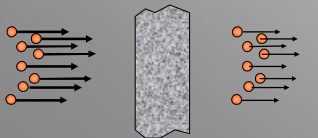
Feixe de fótons na matéria



$$\frac{N}{N_0} = e^{-\mu \Delta x}$$

$$E_v = cte$$

Feixe de íons na matéria



$$N_0 = cte$$

$$E' = E_0 - \left(\frac{dE}{dx} \right) \Delta x$$

RBS- Principais processos físicos

- Fator de Freamento
- Fator Cinemático
- Seção de Choque
- Stragling

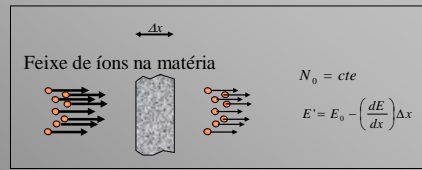
Poder de freamento (stopping power)

$$S = -\frac{dE}{dx} \quad \left[\frac{\text{eV}}{\text{\AA}} \right]$$

$$s = -\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx} \quad \left[\frac{\text{eV}}{\mu\text{g/cm}^2} \right] \quad \rho \text{ é a densidade de massa do meio}$$

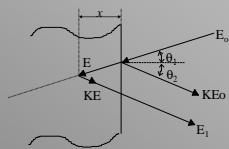
$$\varepsilon = -\frac{1}{N} \frac{dE}{dx} \quad \left[\frac{\text{eV}}{\text{at/cm}^2} \right] = [\text{eVcm}^2] \quad N \text{ é a densidade atômica total do meio}$$

Aproximação de superfície



$$\Delta E(t) = \int_{x_{in}}^{x} \frac{dE}{dx} dx \cong \left. \frac{dE}{dx} \right|_{in} \cdot \Delta x$$

fator de freamento (aproximação de superfície)



$$\Delta E_d = KE_o - E_1 = [S]x$$

relação linear entre ΔE e x

$$[S] = \left[\frac{K}{\cos \theta_1} \frac{dE}{dx} + \frac{1}{\cos \theta_2} \frac{dE}{dx} \right]$$

$$E = E_o - \frac{x}{\cos \theta_1} \frac{dE}{dx}$$

$$E_1 = KE - \frac{x}{\cos \theta_2} \frac{dE}{dx}$$

$$S = -\frac{dE}{dx} \quad \varepsilon = -\frac{1}{N} \frac{dE}{dx}$$

fator de poder de freamento

$$[S] = \left[\frac{K S(E_o)}{\cos \theta_1} + \frac{S(KE_o)}{\cos \theta_2} \right]$$

fator de seção de choque de freamento

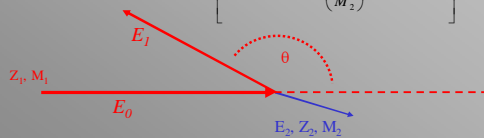
$$[\varepsilon] = \left[\frac{K \varepsilon(E_o)}{\cos \theta_1} + \frac{\varepsilon(KE_o)}{\cos \theta_2} \right]$$

Regra de Bragg (fator de freamento para compostos)

$$\varepsilon(A_m B_n) = m\varepsilon(A) + n\varepsilon(B)$$

Fator Cinemático: Espalhamento elástico

$$K_1 \equiv \frac{E_1}{E_o} = \left[\frac{1 - \left(\frac{M_1}{M_2}\right)^2 \cdot \text{sen}^2 \theta}{1 + \left(\frac{M_1}{M_2}\right)} + \left(\frac{M_1}{M_2}\right) \cdot \text{cos} \theta \right]^2$$



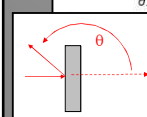
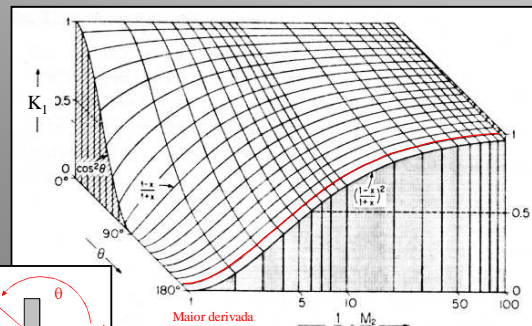
Espalhamento "head on"

$$K_M^{180} = \left[\frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1} \right]^2 = \left[\frac{1-x}{1+x} \right]^2$$

$$E_2^{180} = E_o - E_1^{180} = E_o \left[\frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \right]$$

Fator Cinemático

$$K_1 \equiv \frac{E_1}{E_o} = \left[\frac{(1 - (M_1/M_2)^2 \cdot \text{sen}^2 \theta)^{1/2} + (M_1/M_2) \cdot \text{cos} \theta}{1 + (M_1/M_2)} \right]^2$$



Chu, Mayer & Nicolet, 1978

Seção de choque de espalhamento

$d\Omega = \frac{ds}{4\pi R^2}$

$N_t \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \left(\frac{dQ}{d\Omega} \cdot \frac{1}{Q} \right) = \frac{\text{Número de partículas espalhadas em } d\Omega}{\text{Número total de partículas incidentes}}$

$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\left(\frac{\text{numero de partículas detectadas em } d\Omega}{\text{numero total de partículas incidentes}} \right)}{\frac{d\Omega \cdot N}{e}} = \frac{A}{\frac{Q}{e} d\Omega \cdot N}$

$\sigma = \frac{1}{\Omega} \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$

$A = \sigma \cdot \Omega \cdot Q \cdot N \cdot t$

área do pico
átomos/cm²

Seção de choque de espalhamento Rutherford

$\frac{E_2}{E_1} = \frac{\left[\left(\frac{M_1}{M_2} \right) \cos \theta + \left(\frac{M_2}{M_1} \right) \right]}{1 - \left(\frac{M_1}{M_2} \right) \cos \theta}$

E_1, Z_1, M_1 E_2, Z_2, M_2

Seção de choque no CM Seção de choque no laboratório

$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \theta) = \left(\frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{4 \cdot E \cdot \cdot} \right)^2 \frac{1}{\text{sen}^4(\theta/2)}$

$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \theta) = \left(\frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{4 \cdot E \cdot} \right)^2 \frac{4}{\text{sen}^4 \theta} \frac{(a + \cos \theta)^2}{a}$

$a = \left[1 - \left(\frac{M_1}{M_2} \text{sen} \theta \right)^2 \right]^{1/2}$

5:1000

Seção de Choque

$\frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \theta) = \left(\frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{4 \cdot E \cdot \cdot} \right)^2 \frac{1}{\text{sen}^4(\theta/2)}$

Chu, Mayer & Nicolet, 1978

Espectro de camadas monoatômicas

$N_i = cte \frac{\Omega}{4\pi} Q \frac{Z_1^2 Z_2^2}{E^2} \frac{\rho_i \ell}{\cos \varphi}$

$\frac{1}{2}$ of the periodic table

⁷Li, ¹²C, ¹⁶O, ²⁰Ne, ²⁸Si, ⁴⁰Ca, ⁵⁶Fe, ⁹⁵Mo, ²³⁸U

Straggling

Variação quadrática média da distribuição de energia

Fórmula de Bohr $\Omega_B^2 = 4\pi Z_1^2 e^4 Z_2 N x$

↓ espessura
 ↓ densidade atômica

FIG. 1. Energy spectra of a 180.12 keV proton beam before and after traversing a 12 nm SiO₂ foil.

Santos et. al. Phys. Rev. A68 (2003)

RBS-FRS

Poder de Freamento
 $\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{m v^2} N Z_2 \ln \frac{2mv^2}{I}$

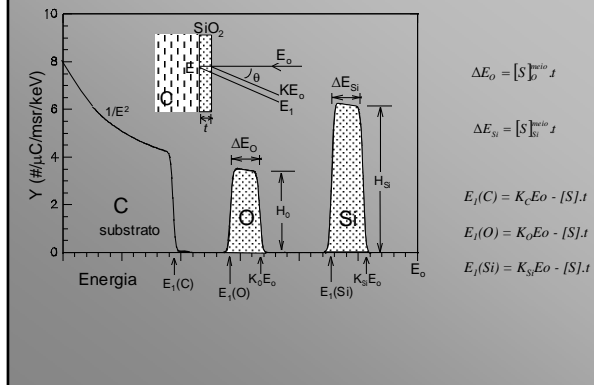
Fator de Freamento
 $S_i^{FRS} = \left[\frac{K_i S(E_i)}{\cos \varphi} \right] \left[\frac{S(K_i E_i)}{\cos \alpha} \right]$

$N_i = cte \frac{\Omega}{4\pi} Q \frac{Z_1^2 Z_2^2}{E^2} \frac{\rho_i \ell}{\cos \varphi}$

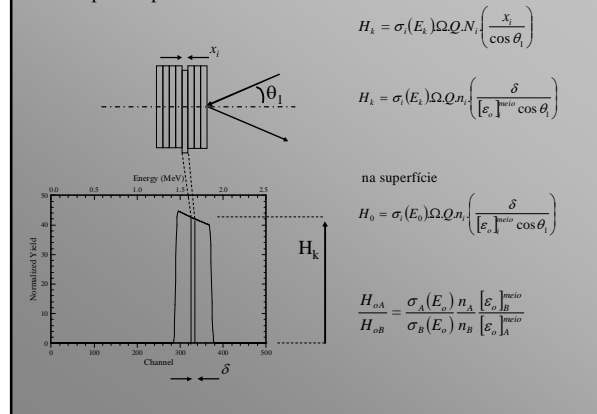
Seção de choque Rutherford
 $\frac{d\sigma}{d\Omega}(E, \theta) = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{4 \cdot E \cdot \cdot} \right)^2 \frac{4}{\text{sen}^4(\theta/2)} \left(\frac{(a + \cos \theta)^2}{a} \right)$

Módulo Densidade elemental na amostra: átomos/cm²

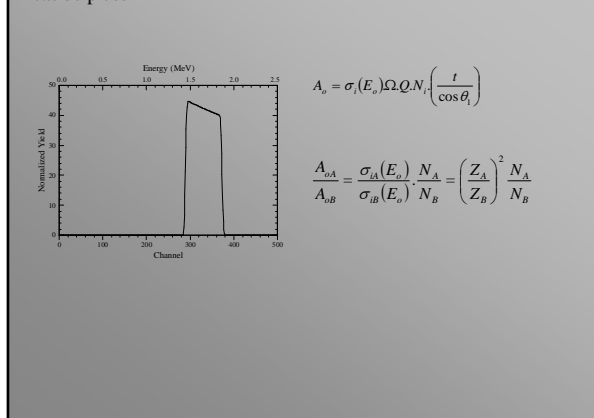
RBS – Estequiometria de um composto



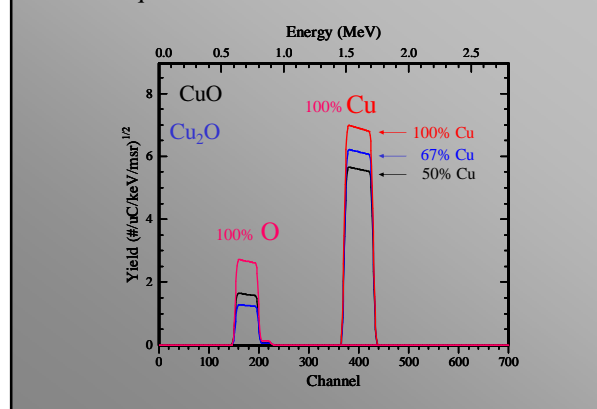
Altura de picos e patamares



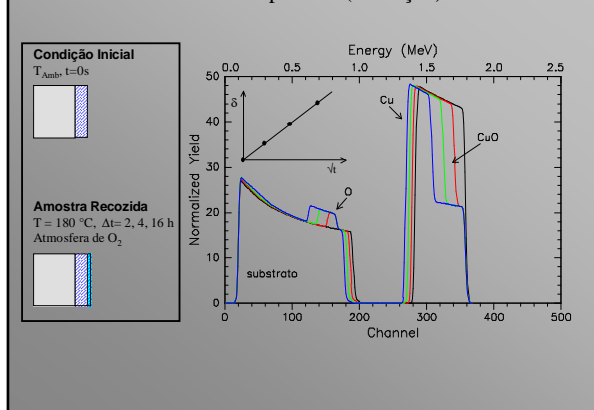
Áreas de picos



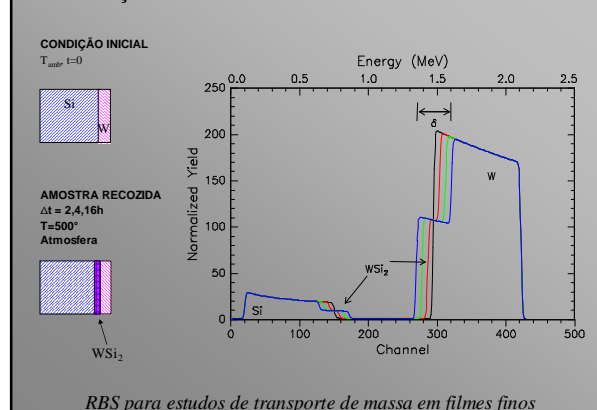
RBS – estequiometria

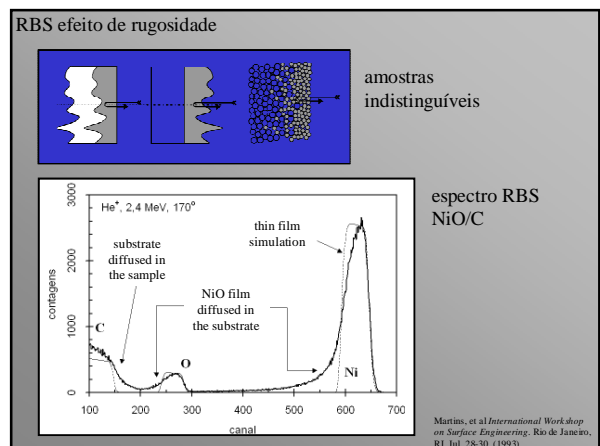
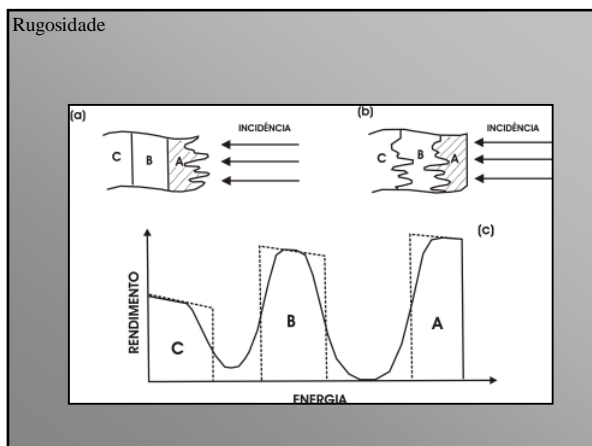
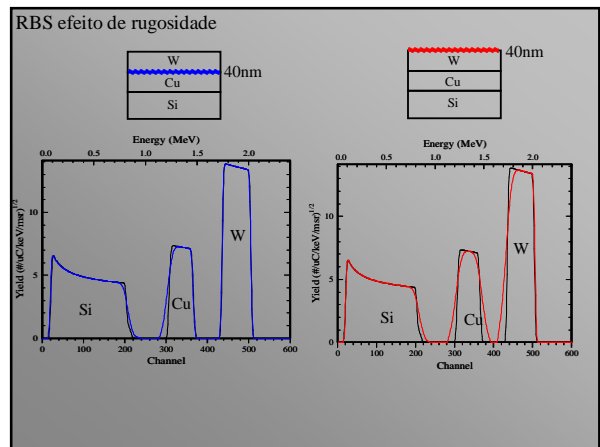
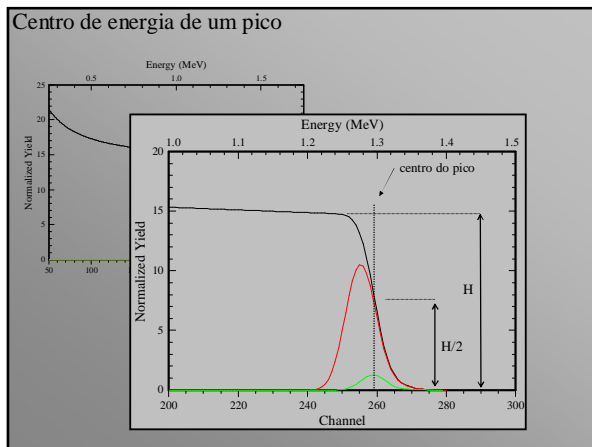
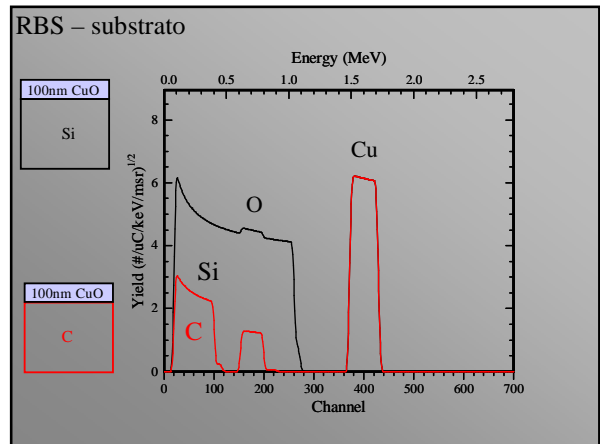
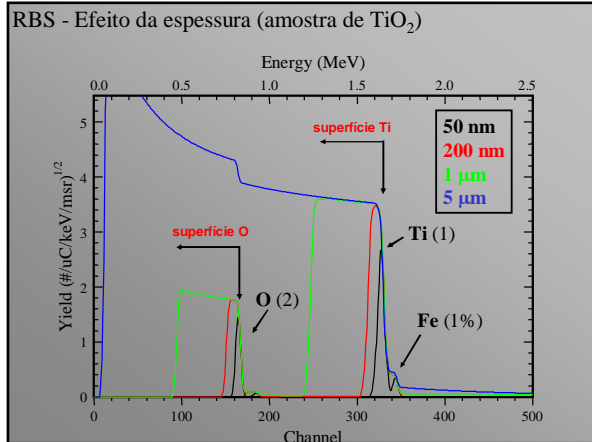


RBS – Contaminantes na superfície (oxidação)

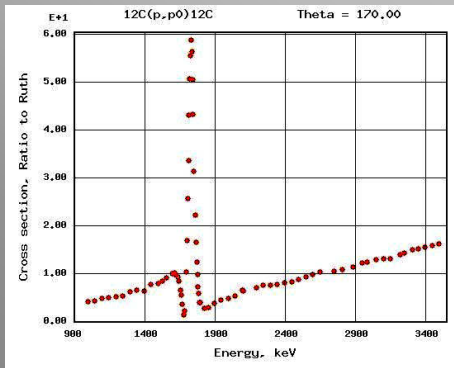


RBS – Reações na interface de filmes finos

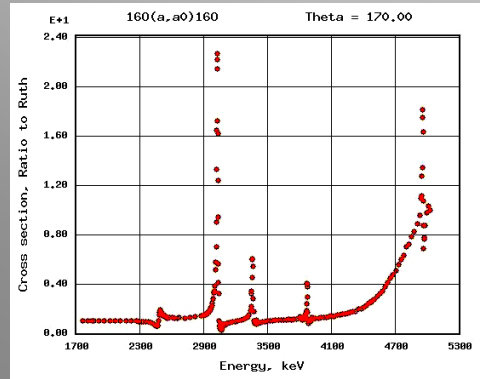




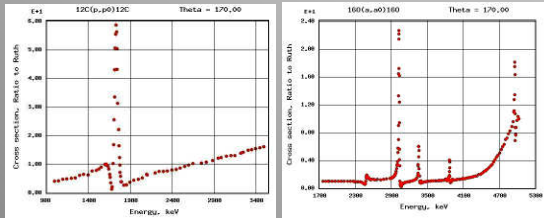
Ressonâncias



Ressonâncias



Ressonâncias



$^{12}\text{C}(p,p_0)^{12}\text{C}$ para perfil de Carbono $^{16}\text{O}(\alpha,\alpha_0)^{16}\text{O}$ para perfil de Oxigênio

