

Procesos inelásticos en Colisiones de Iones con Sólidos y Superficies

Informe Final del Proyecto 06/C261

Período 01/05/2007 al 30/04/2009

Director: Dr. Víctor Hugo Ponce

1. Denominación del Proyecto:

Procesos inelásticos en Colisiones de Iones con Sólidos y Superficies

2. Director: Dr. Víctor Hugo Ponce

3. Breve descripción del Proyecto:

Se estudió la interacción de iones y electrones con superficies sólidas para obtener información sobre la estructura electrónica de las superficies y su respuesta cuando es sometida al bombardeo por partículas atómicas.

La investigación comprendió mediciones experimentales acompañadas de modelos teóricos para interpretar el frenamiento de iones al penetrar en el material, el intercambio de electrones entre el proyectil atómico y la superficie y la emisión de electrones desde la superficie.

Para el caso de trayectorias rasantes el proyectil no penetra más allá de la primera capa atómica y se ponen en evidencia las propiedades electrónicas de la superficie. Estudiamos la dependencia en ángulo y energía de la emisión, y el efecto que en la misma tienen la polarización dinámica de los electrones de la superficie ante la presencia del proyectil. La pequeña velocidad normal a la superficie del proyectil rasante hace que la interacción entre los estados electrónicos ligados al proyectil y la superficie sea de carácter adiabático, con una suave dependencia temporal.

En el caso de materiales aislantes se estudia la existencia de cargas efectivas localizadas en la superficie producidas por las sucesivas ionizaciones generadas por el proyectil. Para ello se miden los electrones secundarios emitidos en la dirección de salida y con velocidades próximas a la del proyectil, los que son más sensibles a la presencia de cargas en la superficie. Estos estados ligados al proyectil interactuando con la superficie con una débil dependencia temporal a lo largo de la trayectoria emergente generan la población asintótica medida.

El estudio de electrones secundarios emitidos en direcciones cercanas a la normal a la superficie comprenden los generados en la excitación de electrones fuertemente ligados de los átomos de la superficie. Su distribución en energías permite conocer el detalle de estas excitaciones y su dependencia de la cristalografía y la respuesta dinámica de los electrones del material.

4. Equipo de Trabajo

No se han producido bajas o altas en el equipo de trabajo durante el desarrollo de este Proyecto.

Evaluación del equipo de trabajo:

Dr. Oscar Grizzi - Satisfactorio
Dr. Esteban Sánchez - Satisfactorio
Dr. Javier Fuhr - Satisfactorio
Lic. Pablo Lustemberg - Satisfactorio
Lic. Laura Serkovic - Satisfactorio
Ing. Enzo Sauro - Satisfactorio

Grado de Alcance de los objetivos propuestos

Se ha avanzado en el conocimiento de la respuesta de superficies de materiales a la interacción con haces de iones con velocidades en torno de la unidad atómica, y trayectorias tanto rasantes como penetrantes. Se realizaron mediciones de la respuesta de diversos tipos de superficies sólidas bombardeadas con iones, y se propusieron modelos teóricos junto a cálculos numéricos para interpretar los resultados obtenidos.

En el caso de materiales aislantes se midió el poder de frenamiento para protones de bajas energías (velocidades menores que la unidad atómica) y se estudió la dependencia del mismo con la velocidad del proyectil. También se consideraron protones de con velocidades de varias unidades atómicas en incidencia rasante, comparando las mediciones realizadas del número de electrones secundarios emitidos con cálculos teóricos de colisiones binarias incorporando efectos de polarización en los estados electrónicos inicial ligados y final del continuo.

Se realizaron mediciones de la distribución de energía de los electrones emitidos en la dirección de salida del proyectil (electrones convoy), en función del ángulo entre la orientación cristalográfica de la superficie y la de incidencia del haz de protones. Al presente se está realizando una interpretación de los resultados obtenidos incorporando los efectos de cargas de superficie por ionizaciones a lo largo de la trayectoria del proyectil y de polarización dinámica de la superficie.

Los efectos de la dependencia de la pérdida de energía y transferencia de carga con la dirección azimutal de incidencia de proyectiles iónicos sobre superficies aislantes has sido estudiados para el caso de átomos y iones de F incidiendo en superficies de TiO₂. La interpretación de los resultados se fundamenta en las diversas densidades electrónicas encontradas por el proyectil según cual sea su dirección de incidencia, y en los mecanismos de captura electrónica por parte de los átomos de O de la última capa. Se observa una alta supervivencia de proyectiles F⁻ frente a F neutro, interpretado en términos de captura y pérdida electrónica a sitios O de la red.

La interacción con la superficie de estados finales electrónicos ligados o en el continuo de un proyectil rasante requiere describir la evolución cuasi adiabática de estos estados en un potencial suavemente variable con el tiempo. Como inicio de estos estudios, que aún no han sido encarados en la literatura, hemos profundizado y generalizado el tratamiento de las perturbaciones adiabáticas yendo más allá del primer orden conocido hasta el presente. Los resultados obtenidos serán aplicados al estudio de los estados finales electrónico de proyectiles en incidencia rasante.

Transferencia Realizada

Trabajos publicados

1. Stopping power of fluorides for low-velocity protons. L. N. Serkovic, E. A. Sánchez, O. Grizzi, J. C. Eckardt, G. H. Lantschner and N. R. Arista. *Physical Review A* 76, 040901 (2007).
2. Electron emission and energy loss in grazing collisions of protons with insulator surfaces. M. S. Gravielle, I. Aldazábal, A. Arnau, V. H. Ponce, J. E. Miraglia, F. Aumayr, S. Lederer and H. Winter. *Physical Review A* 76, 012904 (2007).
3. Beyond the Quantum Adiabatic Approximation: Adiabatic Perturbation Theory. Gustavo Rigolin, Gerardo Ortiz, Víctor Hugo Ponce. *Physical Review A* 78, 052508 (2008).
4. Primary ion fluence dependence in time of flight SIMS of self-assembled monolayer of alkyl thiol molecules on Au(110). Discussion of static limit. Ghonaim N. W., Nieradko M., Xi L., Nie H.-Y., Francis J. T., Grizzi O., Yeung K. K. C., Lau L. W. M.. *Applied Surface Science* 255, 1029-1032 (2008).
5. Primary ion fluence dependence on time of flight SIMS on a self assembled Monolayer of octadecylphosphonic acid molecules on mica. Discussion of the static limit. M. Nieradko, N. Ghonaim, L. Xi, H. Nie, J. Francis, O. Grizzi, K. Yeung, W. Lam. *Canadian Journal of Chemistry* 85, 1075 (2008).
6. Scattering of F atoms and anions on a TiO₂(110) surface. A. R. Canario, L. Guillemot, O. Grizzi, V. Bandurin, V. Esaulov. *Surface Science* 603, 1099-1105 (2009).

Formación de Recursos Humanos

Laura Serkovic: continúa el desarrollo de su Tesis Doctoral
Pablo Lustemberg, continúa el desarrollo de su Tesis Doctoral.

Resultados

1. Se completó un estudio teórico-experimental de la pérdida de energía de protones en Fluoruros. Las mediciones realizadas en fluoruro de aluminio combinan las técnicas de transmisión en láminas delgadas y tiempo de vuelo en capas delgadas depositadas en sustratos. Se encuentra una dependencia lineal del frenamiento a bajas velocidades del proyectil y se determina el umbral de esta dependencia. El modelo teórico propuesto, basado en las propiedades de la banda de electrones de valencia del aislador, muestra un buen acuerdo con los resultados experimentales. Publicación 1.

2. Se realizaron estudios teóricos y experimentales de la emisión de electrones desde la superficie de diversos cristales aisladores (LiF, KCl, KI) bombardeados por protones con velocidades superiores a la unidad atómica. Se empleó un formalismo teórico de primer orden de onda distorsionada para el modelado de los resultados, que se comparan con mediciones de la emisión total de electrones en colisiones rasantes, y del frenamiento del proyectil. Publicación 2.

3. La evolución de estado atómicos sometidos a interacción con la superficie, que puede ser intensa pero débilmente dependiente con el tiempo, motivó un análisis del régimen de perturbaciones adiabáticas requerido para describir los procesos de colisiones rasantes pero de interés general en el campo de la mecánica cuántica. Como resultado de este análisis del régimen de perturbaciones adiabáticas se ha desarrollado una formulación sistemática de los diversos órdenes perturbativos, que generaliza el primer orden de perturbaciones presentado hasta el presente en la literatura. Publicación 3.

4. La espectrometría de masas de iones secundarios (SIMS) emitidos por bombardeo iónico de superficies con moléculas adsorbidas permite determinar características como energía de unión, orientación y ordenamiento de dichas moléculas a la superficie. La dosis de bombardeo debe ser baja para que no haya influencia del daño producido por otros proyectiles en los resultados obtenidos. La baja concentración de moléculas orgánicas autoensambladas en diversas superficies ha sido estudiada, concluyendo que para el caso de tioles alquílicos en oro la alta sensibilidad a la dosis requiere debe ser tomada explícitamente en cuenta a la hora de interpretar los resultados de las mediciones SIMS.. Publicaciones 4 y 5.

5. Se realizó un estudio experimental de la captura y pérdida de electrones desde superficies de Oxido de Titanio (TiO₂) bombardeadas con iones de Flúor. Este sistema ion-superficie presenta características particulares y los mecanismos en juego no están claramente identificados como para superficies metálicas o de aisladores iónicos (haluros alcalinos). Se han medido las fracciones de carga emergentes en colisiones rasantes a bajas energías (del orden de los kilo electrón voltios) para proyectiles de flúor negativo y neutro, y se determinó su dependencia con la orientación cristalina de la superficies. Publicación 6.

6. Durante el desarrollo de este Proyecto se completaron mediciones de la emisión de electrones desde superficies aislantes de Fluoruro de Litio, bombardeadas por protones y otros iones livianos en el rango de energías entre 10 y 100 kilo electrón voltios(KeV). Bajo las adecuadas condiciones de limpieza y planaridad de la superficie, y cuidando de no cargar eléctricamente con el haz incidente la misma, se obtuvieron distribuciones de electrones emitidos en la dirección de salida del proyectil. Las misma muestran el pico de electrones emitidos a velocidades cercanas a la del proyectil. Estudiamos el efecto de las cargas superficiales generadas por ionizaciones previas por parte del proyectil. La deceleración de los electrones emitidos a causa del potencial atractivo de las cargas positivas dejadas en la superficie resulta ser dependiente de las condiciones de preparación de la superficie, y se observa un posible efecto contrario generado por la polarización electrónica producida por el proyectil. El estado actual del trabajo es que se han concluído las mediciones experimentales y se está avanzando en la interpretación teórica y cálculo numérico que incorpora el conjunto de fuerzas actuantes sobre los electrones emitidos.

San Carlos de Bariloche, 22 de Mayo de 2009

Dr. Víctor Hugo Ponce
Instituto Balseiro
Centro Atómico Bariloche