



Universidade: presente!

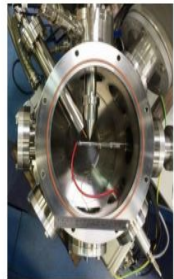


XXXI SIC

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

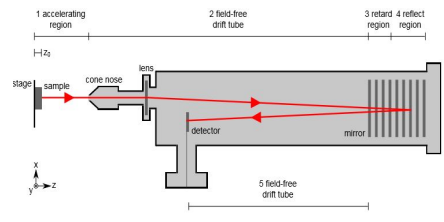
Cálculo 3D de trajetórias para SIMS via Python

Gabriel Onzi, Igor Alencar, Pedro Grande Outubro 2019



Introdução

→ SIMS técnica de análise de materiais por espectrometria de massa de íons secundários [1].
 → Íons secundários são desbastados do material por Sputtering.
 → Pulsos de extração levam os íons ao detector que mede seu tempo de voo (TOF) com resolução sub nanosegundo.
 → Feixe primário de alta energia diminui fragmentação dos íons secundários [2].
 → Essa técnica foi implementada no LII e está em processo de desenvolvimento [3].



Esquemático do detector

Linha instalada no Laboratório de Implantação Iônica

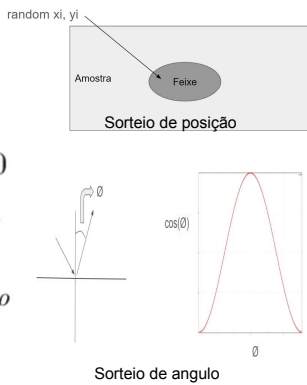
$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = 0$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla} \Phi$$

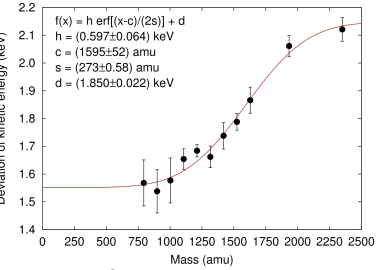
$$\nabla^2 \Phi = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho$$

Equações resolvidas



Código

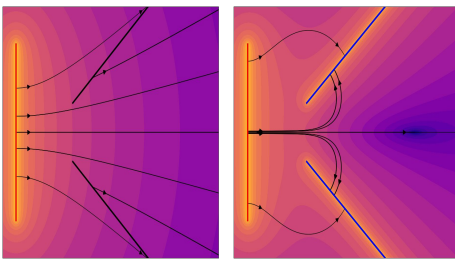
→ Íons são gerados com velocidades seguindo distribuição Maxwell-Boltzmann.
 → Área do feixe na amostra elíptica com geração de íons secundários de coordenadas x,y espúrias.
 → Valores experimentais de eficiência do detector implementados.
 → Partículas são geradas com maior probabilidade na direção normal (cos(θ)).
 → Bibliotecas em Python e C para cálculo de trajetórias (Fenics, Electrostatics, QuickField, IBSIMU).



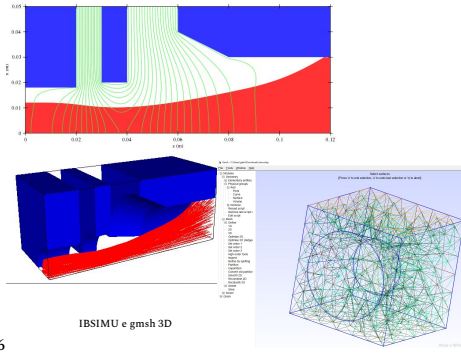
Eficiência do detector

Conclusões

→ Python se mostrou excelente ferramenta para simulação de trajetórias.
 → Diversas bibliotecas para elementos finitos aplicado a equações diferenciais disponíveis em Python.
 → Implementação bidimensional batendo com resultados experimentais
 → Cálculo de ângulo sólido e geometria do detector pendente.



Linhas de campo via Python/Electrostatics



IBSIMU e gmsh 3D

Referencias

[1] Vickerman, Analyst 136 (2011) 2199.
 [2] Nakata et al., Appl. Surf. Sci. 255 (2008) 1591. → Kalvas et al., Review of Scientific Instruments 81, 02B703 (2010)
 [3] Alencar et al., in prep. → M. S. Alnaes et al., Archive of Numerical Software, vol. 3 (2015)