



**Universidade:
presente!**

UFRGS
PROPEAQ



XXXI SIC

21. 25. OUTUBRO • CAMPUS DO VALE

Evento	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2019
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Cálculo 3D de trajetórias para SIMS via Python
Autor	GABRIEL DOS SANTOS ONZI
Orientador	PEDRO LUIS GRANDE

Cálculo 3D de trajetórias para SIMS via Python

G. S. Onzi, I. Alencar, L. Battú, G. G. Marmitt, P. L. Grande

*Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), CP 15051 Porto Alegre–RS,
Brazil*

`gabrielonzi@gmail.com`

Espectrometria de massa de íons secundários (SIMS) é uma poderosa técnica para se analisar a composição de superfícies sólidas dos materiais [1]. Nessa técnica, íons secundários são debastados do material alvo por um feixe de íons primário com massa e energia bem definidos num processo conhecido como *sputtering*. O uso de feixes primários com alta energia (MeV) em comparação com baixas energia (keV) diminui a fragmentação de moléculas e aumenta a quantidade de material ejetado [2]. Para a detecção dos íons secundários, pulsos de alta voltagem extraem tais íons para um tubo aterrado (livre de campo elétrico) onde uma lente eletrostática os direciona para o detector após passarem por um espelho eletrostático. O tempo percorrido desde o pulso de extração até a detecção é medido com resolução abaixo de nano-segundo. Uma nova linha para MeV-SIMS foi recentemente implementada no Laboratório de Implantação Iônica [3]. Com o intuito de compreender os fenômenos observados com o uso de feixes primários contínuos, criamos uma ferramenta para realização de simulações computacionais da técnica de SIMS. O código 1D em C capaz de simular o tempo de voo foi feito anteriormente. Agora utilizamos o algoritmo para implementar um novo código em Python 3 e resolver o problema em três dimensões obtendo trajetórias mais realistas. Utilizamos para testes e como referência uma ferramenta conhecida com similar funcionamento IBSIMU (Ion Beam Simulator) [4]. Para o cálculo das trajetórias, foi utilizado FEniCS para solução numérica das trajetórias [5].

Referências.

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