



## ToF-SIMS

Die Flugzeitsekundärionenmassenspektrometrie (Time-of-Flight Secondary Ion Mass Spectrometry, ToF-SIMS) ist ein Analyseverfahren zur chemischen Charakterisierung von Festkörperoberflächen. Die Methode erfasst sowohl die atomare als auch die molekulare Zusammensetzung der obersten 1-3 Monolagen und ist auf leitenden wie isolierenden Oberflächen einsetzbar. Mit Nachweisgrenzen im ppm-Bereich können auch geringe Substanzmengen empfindlich erfasst werden.

Die SIMS-Analyse basiert auf einem einfachen Prinzip. Die zu analysierende Oberfläche wird mit einem hochenergetischen Primärionenstrahl (z.B.  $\text{Au}^+$  oder  $\text{Bi}^+$ ) beschossen. Die Energie dieser Projektile wird durch Stöße zwischen Primärionen und den Probenatomen sowie über Stöße der Probenatome untereinander im oberflächennahen Bereichen deponiert. Diese Stoßkaskade transportiert einen geringer Teil der eingebrachten Energie zur Oberfläche zurück und führt dort zur Emission von Elektronen, Neutralteilchen und Sekundärionen (vgl. Abb. 1). Die Sekundärionen werden nachfolgend mit einem Massenanalysator hinsichtlich ihres Verhältnisses von Masse zu Ladung analysiert.

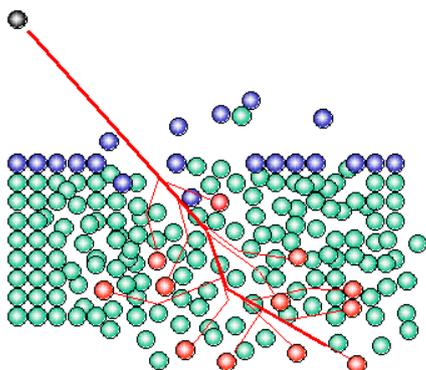


Abbildung 1: Darstellung des Anregungsprozesses in der SIMS (Stoßkaskade; grau: Primärion; blau: Atome der obersten Monolage; grün: Atome in tieferen Schichten; rot: Probenatome nach direktem Stoß mit dem Primärion).

Für die ToF-SIMS wird als Massenanalysator ein Flugzeitmassenspektrometer (kurz: ToF) eingesetzt. In diesem Spektrometer werden alle durch einen kurzen Primärionenpuls erzeugten Sekundärionen zunächst auf eine einheitliche Energie beschleunigt. Aus der Zeit, die die Ionen zur Bewältigung einer nachfolgenden Driftstrecke benötigten, kann die Sekundärionenmasse abgeleitet werden. Somit kann durch eine genaue Bestimmung der Flugzeit die chemische Zusammensetzung aller freigesetzten Ionen und damit der Probenoberfläche ermittelt werden. Dieser parallele Nachweis erfolgt in modernen Analysatoren zudem mit einer exzellenten Fähigkeit zur Trennung eng beieinander liegender Massen (z.B.  $\text{Fe}^+$  (55,9349u) und  $\text{Si}_2^+$  (55,9539u)).

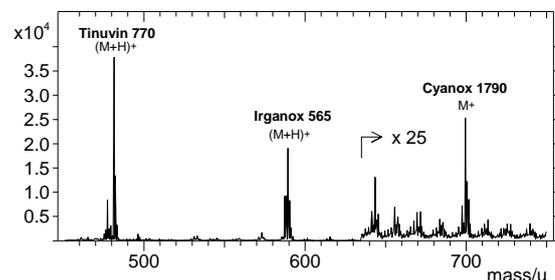


Abbildung 2: Spektrum positiver geladener Sekundärionen von Polymeradditiven in Low Density Polyethylen (LDPE).

Die in der SIMS nachgewiesenen Sekundärionenintensitäten sind von der Art der chemischen Zusammensetzung in der obersten Monolage abhängig (SIMS-Matrixeffekt). Die SIMS liefert daher keine inhärent quantitativen Daten. Vergleichende Analysen chemisch ähnlicher Proben sind allerdings gut möglich. Ferner können durch Analysen geeigneter Referenzen auch absolute Konzentrationen bestimmt werden.

Der Beschuss der Probe mit Primärionen führt zu Veränderungen vorhandener organischer Strukturen. Zur Bestimmung der ursprünglichen chemischen Zusammensetzung einer Probenoberfläche dürfen daher nur sehr wenige Primärionen



eingesetzt werden (= statische SIMS, Spektrometrie). Die aus einer solchen Analyse resultierenden Spektren sind Auftragungen einer Messintensität als Funktion der Sekundärionenmasse und geben die mittlere chemische Zusammensetzung des abgetasteten Oberflächenbereichs wieder (vgl. Abb. 2).

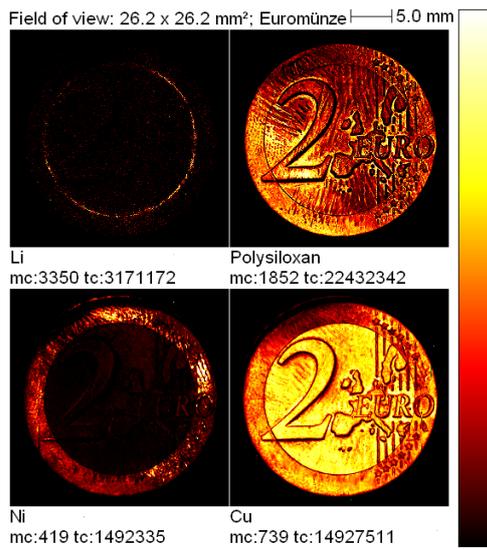


Abbildung 3: Ausgewählte Sekundärionenbilder einer 2 Euromünze (mc: Zahl nachgewiesener Sekundärionen im hellsten Pixel; tc: Gesamtzahl nachgewiesener Sekundärionen). Das nachgewiesene Polysiloxan ist u.a. Bestandteil von Handcremes.

Durch pixelweises Abtasten mit einem fokussierten Primärionenstrahl kann die chemische Verteilung auch bildgebend erfasst werden (=Imaging, vgl. Abb. 3). Hierzu wird der im jeweiligen Pixel gemessenen Intensität eines Sekundärions ein Farbwert zugeordnet, so dass massenaufgelöste Bilder entstehen. Die Größe der Analyseflächen kann zwischen etwa 20x20 µm<sup>2</sup> und 9x9 cm<sup>2</sup> betragen. Der im Routinebetrieb erreichbare minimale Durchmesser des Primärionenstrahls liegt bei etwa 300 nm.

Will man hingegen den chemischen Aufbau einer Probe als Funktion der Tiefe ermitteln, nutzt man den Probenabtrag durch den Ionenbeschuss aus und arbeitet mit hohen Primärionendosen. In den resultierenden Tiefenprofilen können aufgrund der beschussinduzierten Probeschädigung in der Regel nur noch Verläufe von Elementen und kleinen anorganischen Molekülen als Funktion

der Erosionszeit oder Tiefe erfasst werden (vgl. Abb. 4). Organische Verbindungen können nur in wenigen Ausnahmefällen erfolgreich profiliert werden.

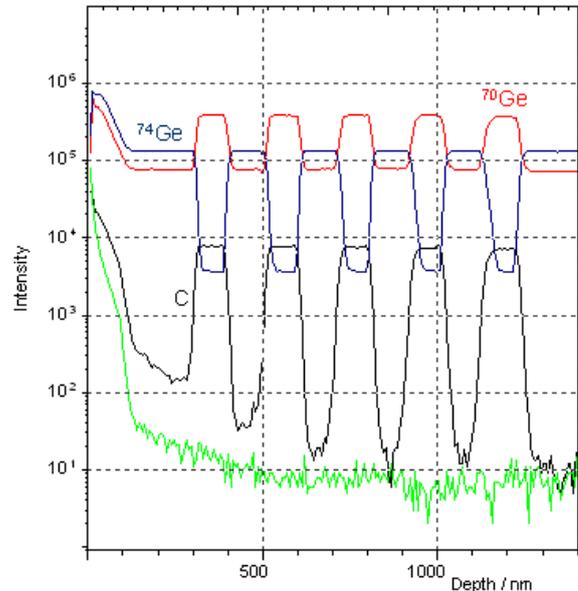


Abbildung 4: Tiefenprofil eines Ge-Multischichtsystems; (Quelle: Prof. Dr. H. Bracht; Inst. für Materialphysik, WWU Münster)

Durch die Kombination des Imagings und der Tiefenprofilierung ergibt sich ferner eine „3D-Analyse“ genannte Betriebsart (vgl. Abb. 5). Sie erlaubt es, ein komplettes Probenvolumen bildgebend zu erfassen und dient u.a. der Identifizierung von Punktdefekten in komplexen Schichtsystemen.

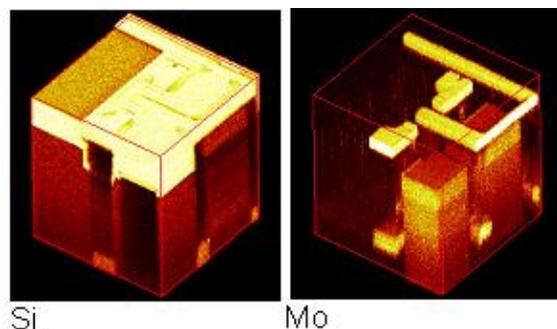


Abbildung 5: 3D-Abbildung von Si und Mo-Verteilungen in einem Pixel eines TFT-Bildschirms.