

Microanalysis and Scanning Electron Microscopy Summer School

St-Martin-d'Hères, 38401 France

September 11-16, 1978

Chapter 3: Electron interactions with matter

J. Henoc

Traducción: Claudio Ariel Danón

Índice general

3. Interacciones de los electrones con la materia	1
3.1. Introducción	1
3.2. Rudimentos de la teoría cuántica de la dispersión. - Definición de la sección eficaz de dispersión	2
3.2.1. Dispersión elástica	2
3.2.1.1. Planteamiento del problema	2
3.2.2. Obtención de soluciones	3
3.2.3. Relación entre la amplitud de dispersión y la sección eficaz de dispersión	5
3.2.4. La aproximación de Born	6
3.2.5. Aplicación del potencial de interacción de Wentzel	6
3.2.6. Formulación general de la amplitud de dispersión basada en la densidad de carga	7
3.3. Dispersión inelástica	8
3.4. Poder de frenado	11
3.5. Sección eficaz de ionización	14
3.6. Método de Monte Carlo	16
3.6.1. Principio	16
3.6.2. Simulación de la trayectoria	17
3.6.2.1. Blanco semiinfinito	17
3.6.2.2. Muestras delgadas	22
3.7. Referencias	24
3.7.1. Teoría cuántica	24
3.7.2. Métodos de Monte Carlo	24
3.8. Apéndice I Transformadas de Fourier del potencial $v(r)$	25
3.8.1. Cálculo de la sección eficaz total de dispersión	26
3.9. Apéndice II Perturbación dependiente del tiempo.	27
3.9.1. Ecuación de Schrödinger	27
3.10. Apéndice III Teorema de suma	30
3.11. Apéndice IV Cálculo de la función de distribución para la dispersión múltiple de electrones	32
3.11.1. Desarrollo de la sección eficaz de dispersión simple	32
3.11.2. Convolución de dos funciones desarrolladas en la forma de polinomios de Legendre	33
3.11.2.1. Caso general	33
3.11.3. Función de distribución de la dispersión	35
3.11.4. Función de distribución relacionada con una función de densidad de probabilidad en forma de polinomios de Legendre	35
3.11.5. Cálculo numérico	37
3.12. Ejercicios sobre la simulación de trayectorias de electrones mediante técnicas de Monte-Carlo	37
3.13. Problemas	45

Capítulo 3

Interacciones de los electrones con la materia

J. Henoc

Centre National d'Etudes des Télécommunications, 196, rue de Paris, 92220 Bagneux, France

3.1. Introducción

El objetivo de este capítulo es proporcionar una comprensión sólida del origen de las magnitudes empleadas en el microanálisis y la microscopía electrónica. La teoría cuántica de la dispersión permite dar un fundamento físico a las ecuaciones fundamentales de la sección eficaz de dispersión, la sección eficaz de ionización y la pérdida de energía en colisiones inelásticas. Esta exposición se ha reducido al mínimo necesario para comprender el tema, y es esencial obtener de la bibliografía detalles adicionales. Los formalismos presentados son bastante difíciles y el estudio del material bibliográfico disponible solo resulta útil después de haber definido cuidadosamente el problema que nos concierne; de lo contrario, podría decirse que existe el riesgo de verse desbordado. Serán útiles algunas observaciones preliminares. En primer lugar, se verá que las ecuaciones solo en raras ocasiones poseen soluciones generales y que las aproximaciones realizadas únicamente son válidas dentro de un intervalo limitado de valores de los parámetros que gobiernan las variables de interés. Si consideramos, por ejemplo, el parámetro —energía del electrón—, el intervalo es amplio: se extiende desde la energía del electrón incidente hasta la de un electrón en reposo. Es propio del desarrollo de las técnicas de microanálisis y microscopía electrónica involucrar esta paradoja: los conceptos físicos fundamentales constituyen el punto de partida, pero las fórmulas empíricas deben ocupar rápidamente su lugar. El desarrollo que sigue trata únicamente materiales amorfos y considerará la interacción del flujo de partículas incidentes con un centro dispersor (átomo) contenido en la unidad de volumen. No se analizarán aquí los plasmones, asociados con las oscilaciones colectivas de los electrones de valencia, ni los fonones asociados con las vibraciones térmicas de estructuras regulares, ni fenómenos de difracción más generales. Después de revisar los principios generales involucrados, resulta útil familiarizarse con su aplicación práctica: la técnica de Monte Carlo, que posee gran flexibilidad, es especialmente adecuada para tal ejercicio. Se describe el principio de esta técnica y se desarrolla el modelo de penetración de electrones en blancos semiinfinitos y en muestras delgadas.

3.2. Rudimentos de la teoría cuántica de la dispersión. - Definición de la sección eficaz de dispersión

El centro dispersor (átomo) situado en 0 está inmerso en un flujo J_i de electrones incidentes. Nos proponemos medir el número dn de electrones que alcanzan el detector situado a una distancia r en la dirección (θ, φ) (véase la Fig. 1). La sección eficaz $\sigma(\theta, \varphi)$ se define mediante:

$$dn = J_i \sigma(\theta, \varphi) d\Omega$$

donde $d\Omega$ es el ángulo sólido subtendido por el detector.

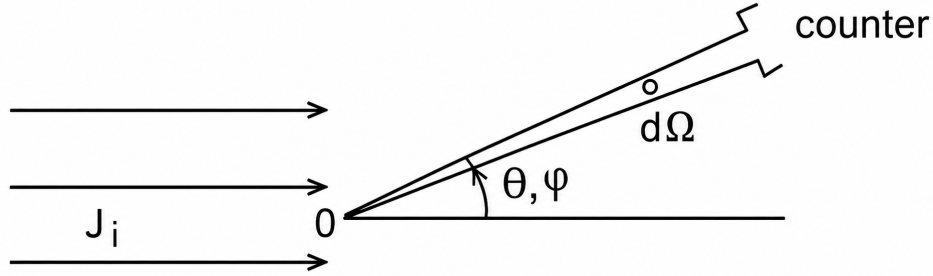


Fig. 1. - Medición de la dispersión.

3.2.1. Dispersión elástica

3.2.1.1. Planteamiento del problema

El movimiento del electrón en un campo debido a la presencia del átomo dispersor, que induce un potencial $V(r)$, está descrito por la ecuación de Schrödinger, cuyas soluciones corresponden a energías bien definidas, E (estados estacionarios). La función de onda $\Psi(r, t)$ puede escribirse entonces como:

$$\Psi(r, t) = \varphi(r) e^{-iE_t/\hbar}$$

donde $\varphi(r)$ es la solución de la ecuación:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right) \varphi(r) = E \varphi(r) \quad (3.1)$$

$\hbar = h/2\pi$, h es la constante de Planck y m es la masa del electrón¹; Δ representa el laplaciano de la función escalar $\varphi(r)$ y se define como

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}$$

Si establecemos

$$\begin{cases} E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} U(r) \end{cases}$$

la ecuación (1) puede escribirse entonces como:

$$(\Delta + k^2) \varphi(r) = U(r) \varphi(r) \quad (3.2)$$

¹Aquí se utiliza el sistema de referencia del centro de gravedad y, para el caso de una colisión entre el electrón y un átomo, la masa reducida se aproxima mediante la masa del electrón.

3.2.2. Obtención de soluciones

El electrón incidente puede representarse mediante una onda plana e^{ikz} , tomando el eje z paralelo a la dirección del haz incidente. La onda dispersada se comporta como una onda esférica divergente si el punto de observación está situado lejos del centro dispersor: $f_k(\theta, \varphi)e^{ikr}/r$. La función de onda total es el resultado de la superposición de la onda plana y la onda esférica:

$$\Psi_k(r) = e^{ikz} + f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

donde $f(\theta, \varphi)$ representa la amplitud de dispersión.

Esta deducción intuitiva puede establecerse sobre una base rigurosa. Supongamos que se conoce una función $G(r)$ tal que:

$$(\Delta + k^2) G(r) = \delta(r)$$

La solución de la ecuación (2) puede escribirse como:

$$\varphi(r) = \varphi_0(r) + \int G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) U(r') \varphi(r') d^3r' \quad (3.3)$$

en la cual $\varphi_0(r)$ satisface la ecuación para una partícula libre: $(\Delta + k^2) \varphi_0(r) = 0$. Para demostrarlo, aplicamos el operador $(\Delta + k^2)$ a ambos miembros de la ecuación (3):

$$\begin{aligned} (\Delta + k^2) \varphi(r) &= (\Delta + k^2) \varphi_0(r) + (\Delta + k^2) \int G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) U(r') \varphi(r') d^3r' \\ &= \int (\Delta + k^2) G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) U(r') \varphi(r') d^3r' \end{aligned}$$

(Llevando el operador bajo el signo de sumatoria)

$$= \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') U(r') \varphi(r') d^3r' = U(r) \varphi(r)$$

Todas las soluciones de (3) satisfacen, por lo tanto, (2); recíprocamente, puede demostrarse que todas las soluciones de (2) satisfacen (3): la expresión general de la dispersión se escribe entonces como:

$$\varphi(r) = \varphi_0(r) + \int G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) U(r') \varphi(r') d^3r'$$

Resta demostrar que la función

$$G_{\pm}(r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r}$$

satisface $(\Delta + k^2) G(r) = \delta(r)$. Mediante cálculo directo:

$$\Delta G_{\pm}(r) = -\frac{1}{4\pi} \Delta \frac{e^{\pm ikr}}{r} = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{r} \Delta e^{\pm ikr} + e^{\pm ikr} \Delta \frac{1}{r} + 2\nabla \left(\frac{1}{r} \right) \cdot \nabla \left(e^{\pm ikr} \right) \right)$$

donde ∇ denota el operador gradiente.

Se utilizan las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned}
\Delta e^{\pm ikr} &= -k^2 e^{\pm ikr} \pm \frac{2}{r} i k e^{\pm ikr} \\
\nabla e^{\pm ikr} &= \pm i k e^{\pm ikr} \frac{\mathbf{r}}{r} \\
\nabla \frac{1}{r} &= -\frac{1}{r^2} \frac{\mathbf{r}}{r} \\
\Delta \left(\frac{1}{r} \right) &= -4\pi \delta(r)
\end{aligned}$$

Al efectuar las sustituciones, obtenemos:

$$\Delta G_{\pm}(r) = \frac{1}{4\pi} k^2 \frac{e^{\pm ikr}}{r} + e^{\pm ikr} \delta(r) = -k^2 G_{\pm}(r) + \delta(r)$$

o bien

$$(\Delta + k^2) G_{\pm}(r) = \delta(r)$$

que era el resultado que debía demostrarse.

Conservaremos únicamente la función G_+ , que corresponde a una onda esférica divergente. La función de onda se escribe entonces en la forma:

$$\varphi_k(r) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(r') \varphi_k(r') d^3r' \quad (3.4)$$

Tomando un punto P en las proximidades del centro dispersor y un punto de observación distante M, y designando mediante $\mathbf{n}$ el vector unitario de OM (Fig. 2):

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \simeq r - \mathbf{r}' \cdot \mathbf{n} \text{ y } \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \simeq \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik\mathbf{r}' \cdot \mathbf{n}}$$

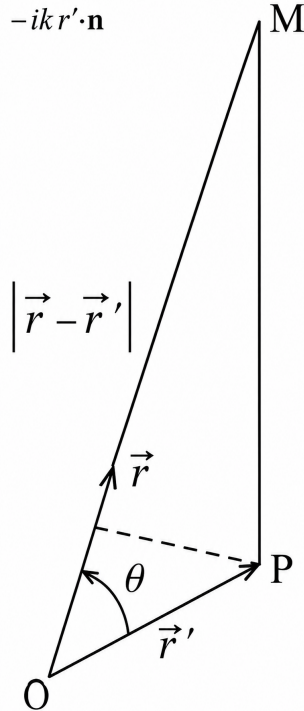


Fig. 2. - Representación de las variables relativas a un centro de dispersión.

La integral del segundo término de la ec. (4) se escribe como:

$$\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'} U(r') \varphi_k(r') d^3r'$$

Esta integral depende únicamente de la dirección de $\mathbf{n}$ y, por lo tanto, de los ángulos θ y φ ; podemos establecer entonces:

$$f_k(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-ik\mathbf{n}\cdot\mathbf{r}'} U(r') \varphi_k(r') d^3r'$$

Habitualmente se utiliza notación vectorial para representar el vector de onda incidente como $\mathbf{k}_i$. Tenemos $e^{ikz} = e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}}$; de manera análoga, representamos el vector de onda dispersado mediante $\mathbf{k}_d = k\mathbf{n}$, y $\mathbf{q} = \mathbf{k}_d - \mathbf{k}_i$ es el vector de onda transferido durante la colisión.

3.2.3. Relación entre la amplitud de dispersión y la sección eficaz de dispersión

La corriente $\mathbf{J}(r)$ asociada con la función de onda $\varphi(r)$ se expresa mediante:

$$\mathbf{J}(r) = \frac{1}{m} R \left(\varphi^*(r) \frac{\hbar}{i} \nabla \varphi(r) \right)$$

La corriente $\mathbf{J}_i$ asociada con la onda plana e^{ikz} es, por lo tanto, $J_i = \hbar k/m$. Si recurrimos a la definición de la sección eficaz de dispersión,

$$dn = J_i \sigma(\theta, \varphi) d\Omega = \frac{\hbar k}{m} \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \quad (3.5)$$

Las componentes del gradiente expresadas en coordenadas polares están dadas por:

$$\nabla U = \left(\frac{\partial U}{\partial r} \right)_r + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial \theta} \right)_\theta + \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial U}{\partial \varphi} \right)_\varphi$$

Reemplazando U por $(e^{ikr}/r) f(\theta, \varphi)$, obtenemos:

$$\begin{cases} (J_d)_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} |f(\theta, \varphi)|^2 \\ (J_d)_\theta = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{r^3} R \left(\frac{1}{i} f^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} (f(\theta, \varphi)) \right) \\ (J_d)_\varphi = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{r^3 \sin \theta} R \left(\frac{1}{i} f^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} (f(\theta, \varphi)) \right) \end{cases}$$

Puesto que r es grande, la componente de la corriente a lo largo del vector radial es la principal, y el número de partículas dispersadas a la distancia r en la dirección (θ, φ) es:

$$dn = (J_d)_r dS = (J_d)_r r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$$

Comparando esta expresión con (5), obtenemos:

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (3.6)$$

3.2.4. La aproximación de Born

Hemos visto que la función de onda puede expresarse de la forma:

$$\varphi_k(r) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \int G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) U(r') \varphi_k(r') d^3r' \quad (3.7)$$

Escribiéndola también para $r = r'$:

$$\varphi_k(r') = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} + \int G(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) U(r'') \varphi(r'') d^3r'' \quad (3.8)$$

Sustituyendo (8) en (7):

$$\begin{aligned} \varphi_k(r) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \int e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) U(r') d^3r' + \int G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) U(r') \\ \times \left(\int G(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|) U(r'') \varphi_k(r'') d^3r'' \right) d^3r' \end{aligned}$$

Si el potencial es pequeño, podemos ignorar todos los términos salvo los dos primeros:

$$\begin{aligned} \varphi_k(r) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} + \int e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) U(r') d^3r' \\ = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}'} e^{-i\mathbf{k}_d \cdot \mathbf{r}'} U(r') d^3r' \end{aligned}$$

Recordando que:

$$\begin{aligned} U(r') = \frac{2m}{\hbar^2} V(r') \text{ y que } \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_d = -\mathbf{q} \\ \varphi_k(r) = e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} V(r') d^3r' \end{aligned}$$

encontramos:

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} V(q)$$

donde

$$V(q) = \int e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} V(r') d^3r'$$

designa la transformada de Fourier del potencial. La sección eficaz de dispersión, que en adelante se denotará como función de un solo argumento, θ , es:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} |V(q)|^2 \quad (3.9)$$

3.2.5. Aplicación del potencial de interacción de Wentzel

Si utilizamos la expresión de Wentzel para el potencial, $V(r)$:

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$

El término exponencial representa el efecto de apantallamiento de los electrones orbitales sobre el núcleo. El parámetro de apantallamiento a es esencialmente el radio atómico; su relación con a_H , el radio del átomo de hidrógeno de Böhr, está dada por la expresión:

$$a = a_H Z^{-1/3}$$

Los cálculos de las transformadas de Fourier se presentan en el Apéndice I; se obtiene:

$$V(q) = \frac{4\pi Ze^2}{\frac{1}{a^2} + q^2}$$

o bien

$$|f(\theta)| = \frac{2mZe^2}{\hbar^2} \cdot \frac{1}{\frac{1}{a^2} + q^2}$$

o, en forma aún más desarrollada,

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{4m^2 Z^2 e^4}{\hbar^4 \left(\frac{1}{a^2} + q^2 \right)^2}$$

Utilizando las expresiones:

$$\begin{cases} q = 2k \sin \frac{\theta}{2} \\ E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{cases}$$

y estableciendo $\theta_0 = 1/ka$, resulta:

$$\sigma(\theta) = \frac{Z^2 e^4}{16 E^2 \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\theta_0^2}{4} \right)^2} \quad (3.10)$$

Esta es la sección eficaz de dispersión elástica que se utilizará en el microanálisis de rutina.

La sección eficaz de dispersión elástica depende, evidentemente, del modelo adoptado para el potencial atómico inducido por la presencia del núcleo y de los electrones. A menudo resulta conveniente utilizar la distribución de carga introducida en la próxima sección.

3.2.6. Formulación general de la amplitud de dispersión basada en la densidad de carga

Si $\rho(r)$ denota la densidad de carga en el átomo, está relacionada con el potencial mediante la ecuación de Poisson:

$$\Delta U = -4\pi\rho(r) \quad \text{con} \quad V = -eU$$

La ecuación de Poisson puede aplicarse a cada componente de Fourier del potencial y a la distribución de carga:

$$\Delta (U_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) = -4\pi\rho_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

El cálculo efectivo del laplaciano da:

$$\Delta (U_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}) = -q^2 U_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

Esto da:

$$-q^2 U_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = -4\pi\rho_q e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \text{ por lo tanto } U_q = \frac{4\pi}{q^2} \rho_q$$

Podemos sustituir entonces $(4\pi/q^2) \rho(r)$ por $U(r)$. Así:

$$\int V(r) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r = -\frac{4\pi e}{q^2} \int \rho(r) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r$$

La densidad de carga es de la forma $\rho(r) = Ze\delta(r) - en(r)$; el primer término representa el núcleo y el segundo, los electrones orbitales:

$$f(\theta) = -\frac{me^2}{2\pi\hbar^2} \frac{4\pi}{q^2} \int (Z\delta(r) - n(r))e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r$$

pero

$$\int Z\delta(r)e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r = Z \text{ y } \int n(r)e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r = F(q)$$

se denomina factor de forma atómico.

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{2me^2}{\hbar^2 q^2} (Z - F(q)) = \frac{2me^2}{4\hbar^2 k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} (Z - F(q)) \\ &= \frac{Ze^2}{4E \sin^2 \frac{\theta}{2}} \left(1 - \frac{F(q)}{Z}\right) \end{aligned}$$

o bien

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{Ze^2}{4E}\right)^2 \left(1 - \frac{F(q)}{Z}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (3.11)$$

Dependiendo de los valores de q , pueden utilizarse varias aproximaciones para evaluar $F(q)$. Para simplificar, cuando q es grande, la presencia del término oscilante $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ hace que el valor de $\int n(r)e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d^3r$ sea despreciable; para ángulos grandes, la sección eficaz cuántica de dispersión elástica se reduce a la sección eficaz clásica de dispersión de Rutherford (véase el Capítulo 2 sobre Emisiones electrónicas y contrastes, sección 2.1.1).

3.3. Dispersión inelástica

El tratamiento precedente supone que los módulos de los vectores de onda incidente y dispersado son iguales ($|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_d|$), es decir, que el electrón incidente no cede energía al átomo y solo existe una transferencia de cantidad de movimiento. Los fenómenos de dispersión inelástica permiten introducir los conceptos de sección eficaz de ionización y pérdida media de energía. El estado inicial, denotado mediante el subíndice i , está caracterizado por $|\varphi_i\rangle = |p_i, \varepsilon_i\rangle$ (notación ket); p_i representa la cantidad de movimiento del electrón y ε_i , la energía del átomo (ε_i corresponde habitualmente a ε_0 , la energía del átomo en reposo). El estado final del sistema, denotado mediante el subíndice f , está caracterizado por $|\varphi_f\rangle = |p_f, \varepsilon_f\rangle$; la probabilidad de una transición del estado i al estado f por unidad de tiempo, $P(p_i, p_f)$, está dada, según la regla de oro, por la fórmula:

$$P(p_i, p_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle p_f, \varepsilon_f | V | p_i, \varepsilon_i \rangle|^2 \rho(E_f = E_i) d\Omega$$

en la cual $V(r)$ y $\rho(E)$ designan, respectivamente, el potencial de perturbación del átomo y la densidad de los estados finales. La conservación de la energía requiere $E_i = E_f$, o bien $(p_f^2/2m) + \varepsilon_f = (p_i^2/2m) + \varepsilon_i$. La densidad de los estados finales está relacionada con la cantidad de movimiento mediante la ecuación:

$$\rho(E) = p^2 \frac{dp}{dE}$$

Teniendo en cuenta $E = p^2/2m$ (o bien $dE = (p/m)dp$), se obtiene $\rho(E) = mp$. Las funciones de onda de los estados final e inicial son, respectivamente:

$$\begin{aligned}\varphi_f &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}/\hbar} \Psi_f(r_a) \\ \varphi_i &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar} \Psi_i(r_a)\end{aligned}$$

Se obtienen tomando el producto de los términos correspondientes al electrón y al átomo.

El flujo incidente es $J_i = (1/2\pi\hbar)^3 (p_i/m)$.

Podemos escribir entonces:

$$\begin{aligned}\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 \frac{p_i}{m} \sigma_{fi}(\theta) d\Omega &= P(p_i, p_f) \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \iint \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3 e^{-i(\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i) \cdot \mathbf{r}/\hbar} V(r) \Psi_f^*(r_a) \Psi_i(r_a) d^3r_a d^3r \right|^2 m p_f d\Omega\end{aligned}$$

A partir de esto, obtenemos:

$$\sigma_{fi}(\theta) = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \frac{p_f}{p_i} \left| \iint e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(r) \Psi_f^*(r_a) \Psi_i(r_a) d^3r_a d^3r \right|^2$$

Estableciendo:

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r} - \sum_a \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|}$$

y recordando que la utilización de la fórmula de Poisson permite reemplazar el potencial por la carga de acuerdo con la expresión:

$$\begin{aligned}\int \frac{e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|} d^3r &= \frac{4\pi}{q^2} \int \delta(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_a|) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d^3r = \frac{4\pi}{q^2} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a}, \\ \sigma_{fi}(\theta) &= \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \frac{p_f}{p_i} \left| \frac{4\pi e^2 Z}{q^2} \int \Psi_f^* \Psi_i d^3r_a - \frac{4\pi e^2}{q^2} \int \sum_a e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} \Psi_f^* \Psi_i d^3r_a \right|^2\end{aligned}\quad (3.12)$$

La primera integral se anula porque las funciones de onda atómicas son ortogonales. Nos queda entonces:

$$\sigma_{fi}(\theta) = \left(\frac{e^2 m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{4}{k_i} \frac{1}{q^4} \left| \int \sum_a e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} \Psi_f^*(r_a) \Psi_i(r_a) d^3r_a \right|^2 \quad (3.13)$$

Observamos de paso que la ec. (12) permite resolver la ec. (11) estableciendo $|p_f| = |p_i|$ y $\Psi_f = \Psi_i = \Psi_0$; en este caso, el factor Z aparece en el primer término y $F(q)$, en el segundo. La sección eficaz de dispersión inelástica $\sigma_{in}(\theta)$ para el ángulo θ se obtiene sumando todas las transiciones posibles y teniendo en cuenta que $|k_f/k_i| \simeq 1$:

$$\sigma_{in}(\theta) = \left(\frac{e^2 m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{4}{q^4} \sum_{f \neq i} \left| \int \sum_a e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} \Psi_f^* \Psi_i d^3r_a \right|^2$$

Utilizando la notación bra-ket:

$$\sigma_{in}(\theta) = \left(\frac{e^2}{\hbar^2} m\right)^2 \frac{4}{q^4} \sum_{f \neq i} \left| \langle f | \sum_a e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} | i \rangle \right|^2$$

el cálculo de la expresión

$$\sum_{f \neq i} \left| \langle f | \sum_a e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} | i \rangle \right|^2$$

se realiza introduciendo la relación de clausura y evaluando las expresiones siguientes:

$$\begin{aligned} & \sum_{f \neq i} \left| \langle f | \sum_a e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} | i \rangle \right|^2 \\ &= \sum_f \left| \langle i | \sum_a e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} | f \rangle \langle f | \sum_b e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_b} | i \rangle - \left| \langle i | \sum_a e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} | i \rangle \right|^2 \right| \\ &= \langle i | \sum_{a,b} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} | i \rangle - F^2(q) \\ &= \sum_a \langle i | i \rangle - F^2(q) + \langle i | \sum_{a \neq b} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} | i \rangle \\ &= Z - F^2(q) + \langle i | \sum_{a \neq b} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} | i \rangle \end{aligned}$$

Obtenemos entonces:

$$\sigma_{\text{in}}(\theta) = \left(\frac{e^2 m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{4}{q^4} \left(Z - F^2(q) + \langle i | \sum_{a \neq b} e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} | i \rangle \right)$$

Cuando q se hace grande, el primer término es el dominante. Hemos encontrado así la sección eficaz de Rutherford con un factor Z en lugar de Z^2 . Este resultado nos permitirá posteriormente tratar por separado la desviación angular y la pérdida de energía del haz primario. En cuanto a la desviación angular, no distinguiremos entre dispersión elástica e inelástica; simplemente sumaremos la contribución de cada proceso introduciendo el factor $(Z + 1)/Z$ (Spencer). La transferencia de cantidad de movimiento $\hbar q$ desempeña un papel importante en la formulación y, dependiendo de su amplitud, podemos distinguir varios dominios característicos de la sección eficaz de dispersión inelástica. Podemos escribir:

$$q^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos \theta$$

Para una pérdida de energía dada, y derivando la expresión anterior, obtenemos:

$$q \, dq = k_i k_f \sin \theta \, d\theta = \frac{k_i k_f}{2\pi} \, d\Omega$$

Observando que la velocidad v del electrón incidente y el vector de onda k_i están relacionados mediante la expresión $k_i = mv/\hbar$, la ecuación (13) se convierte entonces en:

$$\sigma_{fi}(\theta) = 8\pi \left(\frac{e^2}{\hbar v} \right)^2 \frac{dq}{q^3} \left| \int \sum_a e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} \Psi_f^* \Psi_i \, d^3 r_a \right|^2 \quad (3.14)$$

Si suponemos que las pérdidas de energía son pequeñas y denotamos mediante v_0 una magnitud del orden de las velocidades atómicas, también tenemos las relaciones:

$$E_f - E_i = \frac{\hbar^2}{2m} (k_f^2 - k_i^2) = \frac{\hbar^2}{2m} (k_f + k_i) (k_f - k_i) \simeq \hbar v (k_f - k_i) = mv_0^2$$

Para ángulos de dispersión pequeños:

$$\begin{aligned} q^2 &= k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos \theta = \\ &= k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \left(1 - \frac{\theta^2}{2}\right) \simeq (k_f - k_i)^2 + (k_i \theta)^2 \end{aligned}$$

además:

$$q^2 = \left(\frac{E_f - E_i}{\hbar v} \right)^2 + (k\theta)^2$$

si establecemos:

$$k_i \simeq k_f = k$$

Sobre la base de las consideraciones precedentes, podemos afirmar lo siguiente:

- a) La transferencia mínima de cantidad de movimiento $\hbar q_{\min}$ ocurre para $\theta = 0$ y está dada por:

$$q_{\min} = \frac{E_f - E_i}{\hbar v} \quad (3.15)$$

- b) Existe una oscilación rápida en el factor $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}$ cuando $qr_a \gg 1$. Si introducimos el radio atómico a , la energía del átomo en reposo ($E_i = E_0$) puede expresarse sencillamente en función de a de la forma:

$$E_0 \simeq \frac{\hbar^2}{2ma^2} \text{ por lo tanto } a^2 = \frac{\hbar^2}{2mE_0}$$

El valor q_0 de q , definido mediante $q_0 a = 1$, o bien:

$$q_0 = \frac{\sqrt{2mE_0}}{\hbar} \quad (3.16)$$

posee, por lo tanto, un significado físico importante.

- c) Existe un dominio en el cual $(E_f - E_i)/\hbar v \ll k\theta$; en este dominio, la energía transferida durante la colisión es proporcional a $k\theta = (mv/\hbar)\theta$: ya no depende de la naturaleza de la transición.

Nos resta ahora definir dos magnitudes fundamentales: la sección eficaz de ionización y el poder de frenado. Comenzamos por esta última, puesto que allí puede introducirse de manera natural la fuerza de oscilador.

3.4. Poder de frenado

Definición. - El poder de frenado es la pérdida media de energía que experimenta un electrón incidente como resultado de colisiones inelásticas con el átomo dispersor. El promedio se toma con respecto a todos los estados excitados del dispersor y sobre todos los ángulos de dispersión del electrón.

La pérdida media de energía $\overline{\delta E}$ está dada por

$$\begin{aligned} \overline{\delta E} &= \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \sum_f (E_f - E_i) \sigma_{fi} dq = \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} 8\pi \left(\frac{e^2}{\hbar v} \right)^2 \sum_f (E_f - E_i) \times \\ &\quad \times \left| \int_a \sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} \Psi_f^* \Psi_i d^3 r_a \right|^2 \frac{dq}{q^3} \end{aligned}$$

Esta expresión resulta de una sustitución simple de la expresión dada en la ec. (14) para σ_{fi} . Surge una dificultad del hecho de que el límite inferior de integración depende de la cantidad de energía transferida en el momento de la colisión. En general, no es posible intercambiar el orden de la sumatoria y la integración. Para resolverlo, efectuamos la integración en q sobre dos subintervalos $(q_{\min}, q_1)$ y $(q_1, q_{\max})$. Con excepción de $\hbar q_{\max}$, que denota la transferencia máxima de cantidad de movimiento, todas las demás magnitudes fueron definidas en la sección anterior.

1) $q_{\min} < q < q_1$

Al elegir para q_1 el límite inferior para el cual podemos escribir $q \simeq (mv/\hbar)\theta$, tenemos

$$\delta_1 \bar{E} = 8\pi \left(\frac{e^2}{\hbar v} \right)^2 \sum_f (E_f - E_i) \int \left| \int \sum_a e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} \Psi_f^* \Psi_i d^3 r_a \right|^2 \frac{dq}{q^3}$$

La exponencial puede expresarse como una serie infinita y tenemos la libertad de hacer que el eje x sea paralelo a la dirección de q

$$\delta_1 \bar{E} = 8\pi \left(\frac{e^2}{\hbar v} \right)^2 \sum_f (E_f - E_i) \int \left| \int \sum_a (1 - iqx_a) \Psi_f^* \Psi_i d^3 r_a \right|^2 \frac{dq}{q^3}$$

Puesto que las funciones de onda del átomo son ortonormales, nos queda:

$$\begin{aligned} \delta_1 \bar{E} &= 8\pi \left(\frac{e^2}{\hbar v} \right)^2 \sum_f (E_f - E_i) \int \left| \int \sum_a iqx_a \Psi_f^* \Psi_i d^3 r_a \right|^2 \frac{dq}{q^3} \\ &= 8\pi \left(\frac{e}{\hbar v} \right)^2 \sum_f (E_f - E_i) |d_x|_{fi}^2 \int_{q_{\min}}^{q_1} \frac{dq}{q} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Si establecemos:

$$(d_x)_{fi} = e \sum_a x_a,$$

donde d_x es la componente dipolar del átomo, entonces, integrando respecto de q , obtenemos:

$$\delta_1 \bar{E} = 8\pi \left(\frac{e}{\hbar v} \right)^2 \sum_f |(d_x)_{fi}|^2 (E_f - E_i) \ln \frac{q_1 \hbar v}{E_f - E_i} \quad (3.18)$$

Dado el escalar f y sus elementos de matriz f_{fi} , de acuerdo con el teorema de suma (véase el Apéndice III), podemos escribir:

$$\sum_f (E_f - E_i) |f_{fi}|^2 = \frac{i\hbar}{2} (\dot{f} f^+ - f^+ \dot{f})_{ii}$$

donde $\dot{f}$ denota la derivada temporal y f^+ , el adjunto. Aplicando este resultado a:

$$f = \frac{d_x}{e} = \sum_a x_a$$

y sabiendo que:

$$\dot{f} = \sum_a \frac{1}{2m} (\mathbf{p} \cdot \nabla f + \nabla f \cdot \mathbf{p}),$$

resulta:

$$\mathbf{p} = \sum_a -i\hbar \nabla_a$$

o bien

$$\dot{f} = \frac{1}{m} \sum_a p_{x_a}$$

$$\nabla f = \sum_a \frac{\mathbf{x}_a}{x_a}$$

Por lo tanto, obtenemos:

$$\dot{f}f^+ - f^+\dot{f} = \sum_a \frac{1}{m} p_{x_a} \sum_b x_b - \sum_b x_b \sum_a \frac{1}{m} p_{x_a}$$

Puesto que este resultado es conmutativo para $a \neq b$, nos queda:

$$\frac{1}{m} \sum_a (p_{x_a} x_a - x_a p_{x_a}) = \frac{1}{m} \sum_{a=1}^Z -i\hbar = -\frac{i\hbar}{m} Z$$

puesto que existen Z electrones en un elemento de número atómico Z . Obtenemos así:

$$\frac{1}{e^2} \sum_f (E_f - E_i) \left| (d_x)_{fi} \right|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} Z$$

Establecemos entonces:

$$\sum_f N_{if} = \frac{2m}{(e\hbar)^2} \sum_f (E_f - E_i) \left| (d_x)_{fi} \right|^2 = Z$$

y definimos $\ln(J)$ mediante:

$$Z \ln(J) = \sum_f N_{if} \ln(J) = \sum_f N_{if} \ln(E_f - E_i)$$

Sustituyendo esta magnitud en la ec. (18), obtenemos el resultado final:

$$\delta_1 \bar{E} = \frac{4\pi e^4 Z}{mv^2} \ln \left(\frac{q_1 \hbar v}{J} \right) \quad (3.19)$$

2) $q > q_1$

En esta región, tomar únicamente el primer término de la expresión en serie de $e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}$ ya no es adecuado, pero en este caso podemos intercambiar el orden de la sumatoria y la integración. La sumatoria:

$$\sum_f (E_f - E_i) |f_{if}|^2$$

se obtiene sustituyendo f por el observable:

$$\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}$$

Utilizando los resultados de los cálculos presentados en el Apéndice III, obtenemos:

$$\sum_f \frac{2m}{\hbar^2 q^2} (E_f - E_i) \left| \left(\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} \right)_{fi} \right|^2 = Z$$

y

$$\delta_2 \bar{E} = \frac{4\pi Z e^4}{mv^2} \int_{q_1}^{q_{\text{máx}}} \frac{dq}{q} = \frac{4\pi e^4 Z}{mv^2} \ln \left(\frac{q_{\text{máx}}}{q_1} \right) \quad (3.20)$$

$$3) \delta \bar{E} = \delta_1 \bar{E} + \delta_2 \bar{E} = \frac{4\pi Z e^4}{mv^2} \ln \left(\frac{\hbar v q_{\max}}{J} \right)$$

Para valores grandes de q , correspondientes a $q_{\max}$, podemos escribir:

$$q_{\max} = \frac{mv}{\hbar} \theta_{\max}$$

y

$$\delta \bar{E} = \frac{4\pi Z e^4}{mv^2} \ln \left(\frac{mv^2}{J} \theta_{\max} \right)$$

Teniendo en cuenta el intercambio de electrones y expresando explícitamente $\theta_{\max}$, recuperamos la fórmula de Bethe que volveremos a utilizar:

$$\delta \bar{E} = \frac{2\pi e^4 Z}{E} \ln \left(\frac{(e/2)^{1/2} E}{J} \right) \quad (3.21)$$

con $(e/2)^{1/2} = 1,166$, donde e es la base de los logaritmos naturales (neperianos). La Figura 3 muestra la energía del electrón en función de la fracción de la longitud total de trayectoria recorrida.

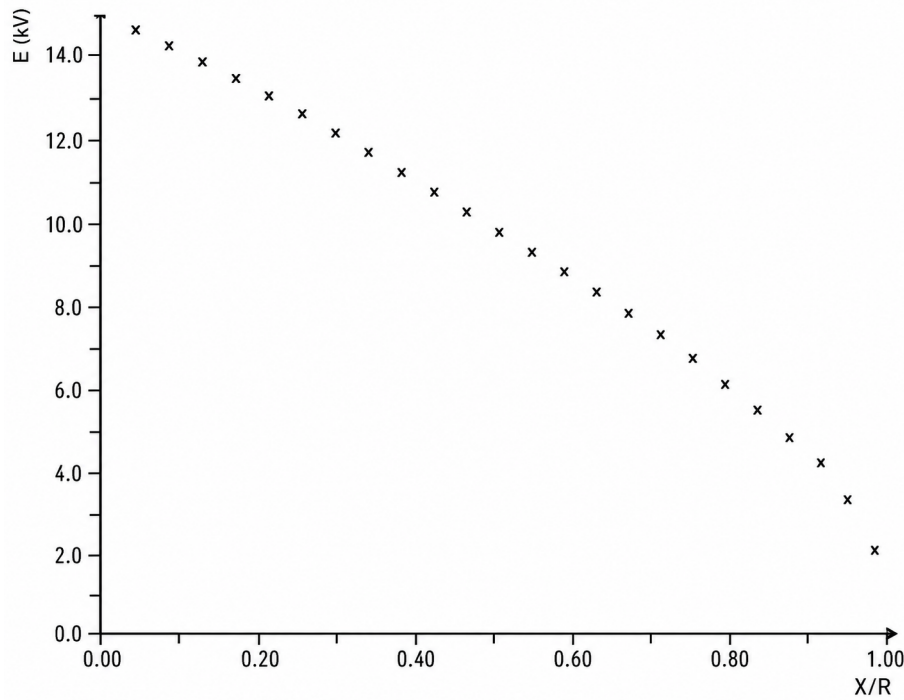


Fig. 3. - Energía del electrón en función de la distancia recorrida.

3.5. Sección eficaz de ionización

Definición. - La sección eficaz de ionización es la probabilidad de llevar un átomo dispersor a un estado excitado dado mediante un proceso de dispersión inelástica. La sección eficaz de ionización para el nivel f está dada por:

$$Q_f = \int_q 8\pi \left(\frac{e^2}{\hbar v} \right)^2 \left| \int \sum_a e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} \Psi_f^* \Psi_i d^3 r_a \right|^2 \frac{dq}{q^3}$$

Como vimos anteriormente, la parte principal del integrando en la integral más interna no puede despreciarse para valores de q tales que $qa > 1$. Por lo tanto, podemos utilizar el desarrollo en serie de la exponencial y hacer uso del momento dipolar del átomo :

$$Q_f = \int_q \frac{8\pi}{e^2} \left(\frac{e^2}{\hbar v} \right)^2 \left| (d_x)_{fi} \right|^2 \frac{dq}{q}$$

Introduciendo la fuerza del oscilador definida en la sección anterior, es decir :

$$N_{if}(q) = \frac{2m}{(e\hbar)^2} (E_f - E_i) \left| (d_x)_{fi} \right|^2$$

resulta :

$$Q_f = \int_{q_{\min}}^{q_0} \frac{2\pi e^4}{E} \frac{N_{if}(q)}{E_f - E_i} \frac{dq}{q}$$

y se realiza la aproximación tomando $N_{if}(q) \simeq N_{if}(0)$

Después de integrar, obtenemos :

$$Q_f = \frac{2\pi e^4}{E} \frac{N_{if}(0)}{E_f - E_i} \ln \frac{\sqrt{2mE_i}v}{E_f - E_i} = \frac{\pi e^4}{E} \frac{N_{if}(0)}{E_f - E_i} \ln \left(\frac{2mE_i v^2}{(E_i - E_f)^2} \right)$$

Puesto que sabemos que $E_i \simeq E_i - E_f$ y $2mv^2 = 4E$, podemos escribir :

$$Q_f = \frac{\pi e^4}{E} \frac{N_{if}(0)}{E_f - E_i} \ln \left| \frac{4E}{E_f - E_i} \right|$$

La Figura 4 muestra la variación de $(\frac{1}{E} \ln(E/E_l))$, donde E_l es la energía del nivel excitado, que aparece en la expresión de la sección eficaz de ionización utilizada habitualmente para efectuar dichos cálculos.

$$Q_l(E) = \frac{\pi e^4}{EE_l} z_{nl} b \ln \left(\frac{E}{E_l} \right) \quad (3.22)$$

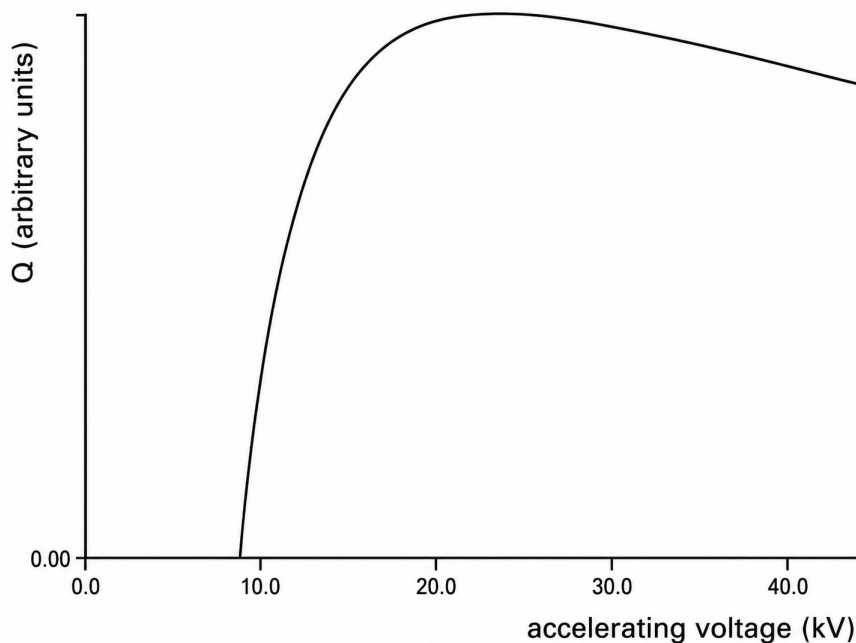


Fig. 4. - Sección eficaz de ionización.

Para finalizar esta discusión, debemos mencionar el trabajo experimental de Cosslett y Thomas en el intervalo de energías de 5-30 keV, que es el intervalo de nuestras técnicas. En sus artículos encontramos resultados numéricos pertinentes para la dispersión y la pérdida de energía.

3.6. Método de Monte Carlo

3.6.1. Principio

La técnica de Monte Carlo consiste en muestrear una o más variables aleatorias extrayendo valores al azar de un conjunto de valores equiprobables de esta variable, de manera análoga a lo que ocurre en el juego de la ruleta, en el cual la rueda puede detenerse en un número elegido al azar entre un conjunto de números que tienen igual probabilidad de aparecer.

A partir de cualquier distribución podemos construir una distribución uniforme de la siguiente manera :

- Sea $p(x)dx$ la probabilidad de que la variable aleatoria x , definida en el intervalo (x_1, x_2) , esté comprendida entre x y $x + dx$.
- Sea

$$P(\xi) = \int_{x_1}^{\xi} p(x)dx$$

la función de distribución asociada, que representa la probabilidad de que $x_1 \leq x \leq \xi$. Esta función toma valores en el intervalo $[0, 1]$; un conjunto de N valores de igual probabilidad $\{x_i\}$, obtenido dividiendo el intervalo $[0, 1]$ en N intervalos iguales, se define mediante :

$$P(x_i) = \frac{i-1}{N} + \frac{1}{2N} \quad \text{con} \quad 1 \leq i \leq N$$

En la práctica, el problema se reduce a formar este conjunto. Una vez que ha sido formado, el muestreo se efectúa extrayendo al azar un número r , generado por un generador de números pseudoaleatorios, tal que $0 < r \leq 1$. El rango del valor seleccionado, dentro del conjunto de valores equiprobables, es la parte entera de rN . Como ejemplo, la Figura 5 muestra la distribución de los ángulos de dispersión en función de ángulos equiprobables.

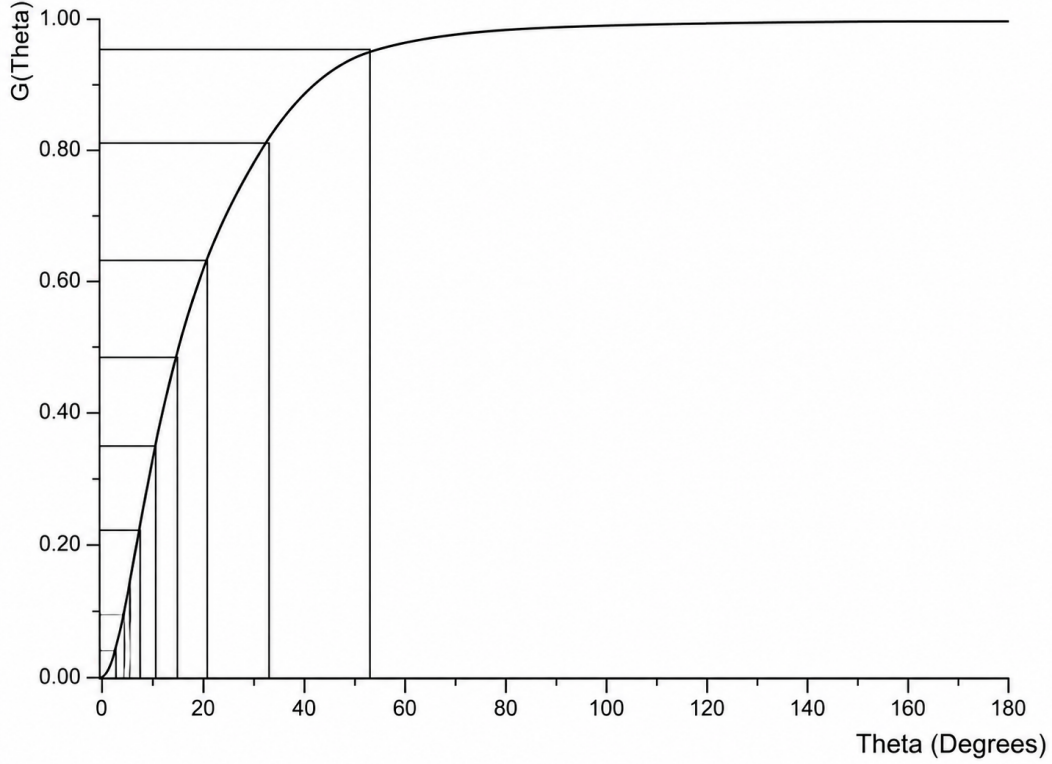


Fig. 5. - Función de distribución del ángulo de dispersión.

El caso con una sola variable aleatoria tiene escaso interés práctico; la técnica adquiere todo su interés para describir un fenómeno cuando se consideran varias variables aleatorias.

3.6.2. Simulación de la trayectoria

3.6.2.1. Blanco semiinfinito

Como resultado de las colisiones con los átomos del blanco, los electrones primarios se frenan progresivamente y se desvían de su trayectoria inicial. Suponemos que las pérdidas de energía son continuas y que, como consecuencia, podemos establecer una relación biunívoca entre la distancia s recorrida por el electrón y su energía E (ecuación de Bethe).

Imaginemos un electrón que se desplaza en la dirección $\mathbf{u}$ desde el punto A (Fig. 6) y que sufre una colisión en A'; sea $\mathbf{u}'$ su nueva dirección de propagación. La distribución estadística de $\cos \theta = \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}'$, donde θ es el ángulo de desviación, está dada por la sección eficaz diferencial de dispersión : $\sigma(\theta)d\Omega = \sigma_e f(\theta)d\Omega$ donde σ_e representa el número de colisiones por unidad de longitud de recorrido y $f(\theta)d\Omega$ es la probabilidad de que la desviación esté comprendida entre θ y $\theta + d\theta$; $f(\theta)$ es una probabilidad definida en el intervalo $(0, \pi)$, puesto que

$$\int_0^\pi f(\theta)d\Omega = 1$$

Por lo general, solo se tienen en cuenta los eventos de dispersión elástica, que son los responsables de las grandes desviaciones angulares²; sobre esta base, las pérdidas de energía y los eventos de dispersión se consideran eventos independientes. De este modo, la trayectoria se describe como una sucesión de segmentos de recta, de acuerdo con el método que resumiremos a continuación.

²El factor $(Z + 1)/Z$ se introduce para evaluar la contribución de los electrones dispersados inelásticamente. Solo interviene en el valor de σ_e (véase la sección 1.2).

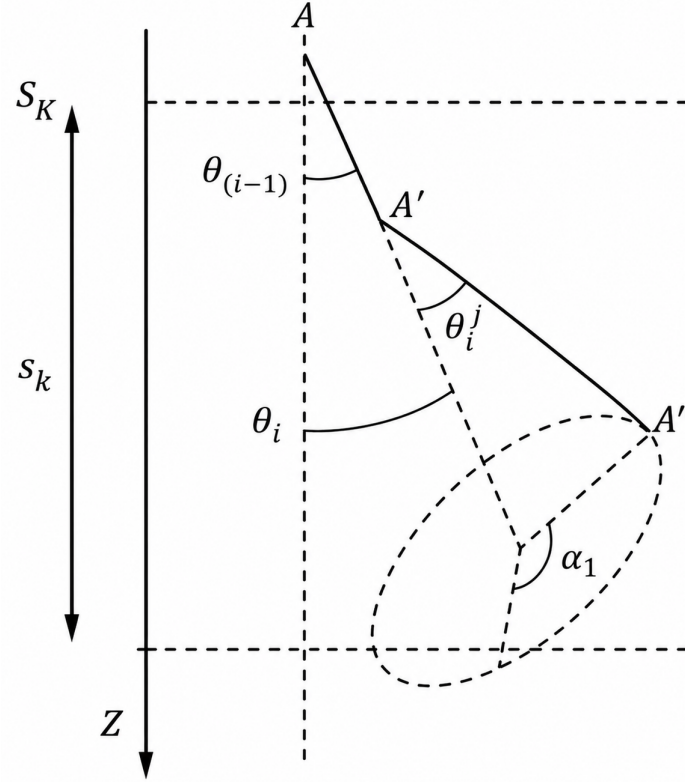


Fig. 6. - Diagrama de un paso de la trayectoria del electrón.

La cantidad σ_e depende de la energía de los electrones y de la naturaleza de los átomos del blanco. $s_0 = 1/\sigma_e(E_0)$ representa el camino libre medio de un electrón incidente, lo que significa que un electrón experimenta, en promedio, una colisión al recorrer una distancia s_0 . La fracción de la distancia que recorre en su dirección inicial, $r_1^0 s_0$, se determina mediante la extracción aleatoria del número r_1^0 por medio del generador de números pseudoaleatorios. En el instante en que ocurre la colisión, el ángulo de desviación θ_j se extrae aleatoriamente del conjunto $\{\theta_j(E_0)\}$, ($1 \leq j \leq N$) de ángulos de dispersión equiprobables, siendo j la parte entera de $r_2^0 N$. La extracción de un tercer número aleatorio r_3^0 de distribución uniforme permite elegir el azimut uniformemente distribuido. Posteriormente, el electrón recorre el trayecto $(1 - r_1^0) s_0$ en su nueva dirección definida. Al final de este paso de su recorrido, su energía es $E_1 = E(s_0)$ y sus nuevas coordenadas se calculan por medio de fórmulas de trigonometría esférica.

El mismo procedimiento se repite para el paso siguiente. Los parámetros para el i -ésimo paso son: la longitud de recorrido s_i , que no es más que el camino libre medio del electrón de energía $E_{i-1} = E(S)$, con

$$S = \sum_{k=0}^{i-1} s_k,$$

el ángulo θ_{i-1} entre el segmento AA' y la dirección inicial, y el conjunto de ángulos equiprobables basados en la sección eficaz de dispersión simple $\{\theta_j(E_{i-1})\}$, con $1 \leq j \leq N$; la determinación de A'' , el punto final del paso, depende de la terna de números aleatorios (r_1^i, r_2^i, r_3^i) . Una trayectoria finaliza cuando la distancia total recorrida es igual a la longitud de recorrido R (alcance), correspondiente a un electrón llevado al reposo, o cuando el electrón es retrodispersado (Fig. 7).

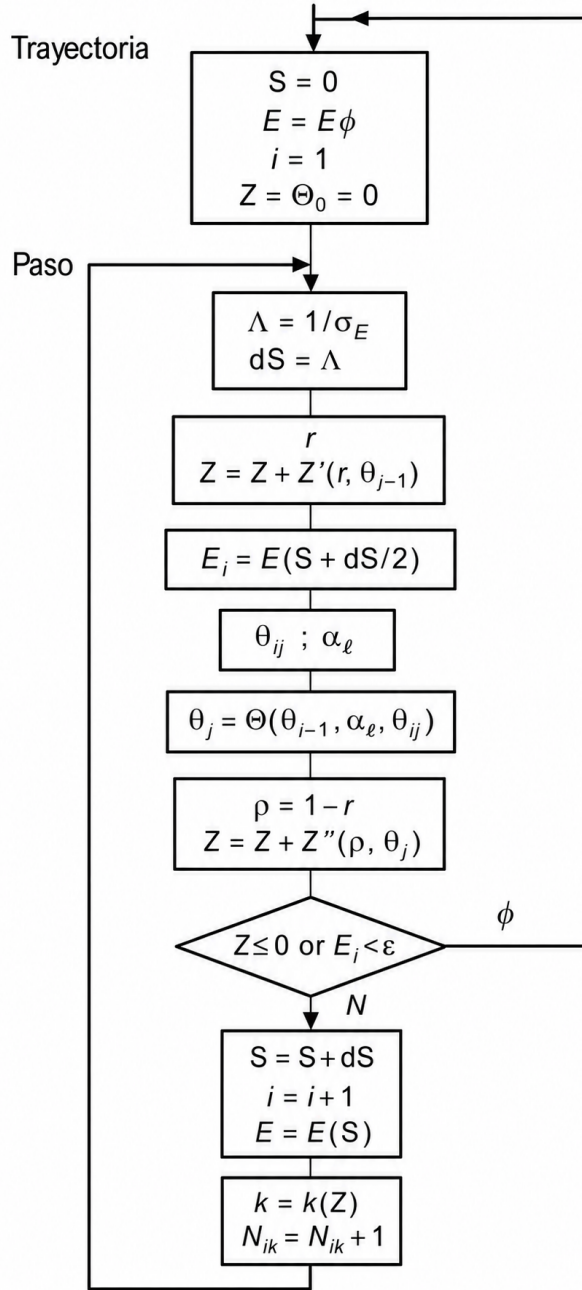


Fig. 7. - Simulación de trayectorias de electrones en el caso de eventos de dispersión simple.

El resultado obtenido del muestreo es la matriz $\{n_i^k\}$, uno de cuyos elementos proporciona el número relativo de electrones de energía E_i , presentes en una capa de espesor s_k , situada a una profundidad:

$$S_k = \sum_{j=0}^{k-1} s_j ,$$

la matriz se actualiza al final de cada paso colocando el electrón en una de las láminas previamente definidas.

La matriz presentada en la Tabla I se utilizó para simular la distribución de radiación X característica en función de la profundidad, mostrada en la Figura 8. Se utilizaron los valores que toma la sección eficaz de ionización para cada energía E_i . Un buen muestreo requiere el uso de un gran número de trayectorias independientes.

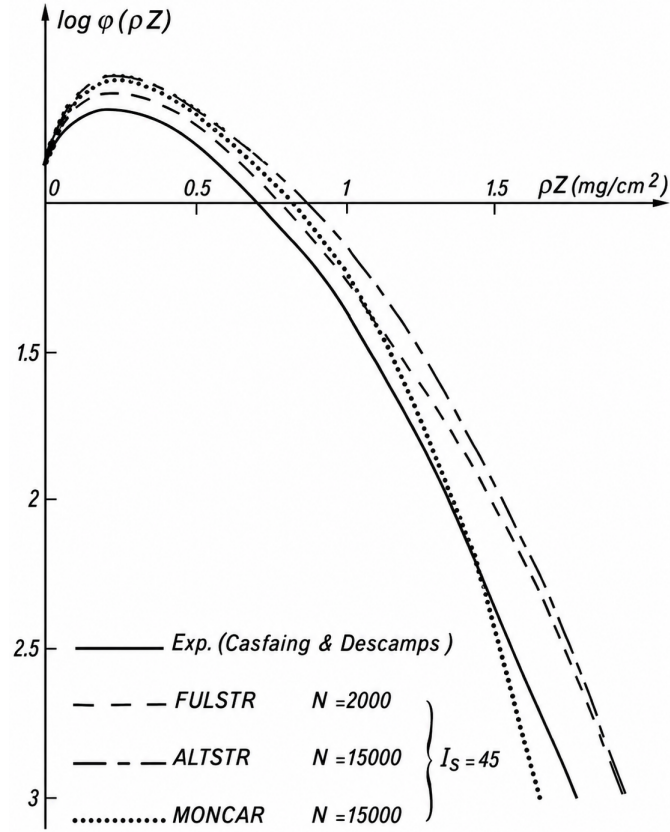


Fig. 8. Distribución de rayos X característicos en función de la profundidad.

Podría imaginarse una cantidad asombrosa de variantes, entre ellas el tratamiento estadístico de las pérdidas de energía, la introducción de una sección eficaz inelástica, etc... Implementar este tratamiento requiere utilizar tal cantidad de memoria y tiempo de procesador central en la computadora que nos limitamos a un modelo simple; por lo tanto, es necesario ajustar los parámetros para obtener concordancia con los resultados experimentales. La optimización de las condiciones de funcionamiento es un tema de considerable interés, que constituye un trabajo en sí mismo. La cuestión puede formularse en los siguientes términos: ¿cómo se obtiene la máxima precisión con un costo mínimo?

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25
≤5	28	36	51	51	63	74	65	92	78	89	91	79	63	77	74	72	64	52	65	59	45	52	41	27	32
1	105	68	56	72	93	67	99	94	100	84	82	79	84	82	77	75	78	77	68	60	58	75	48	35	46
2	4001	1855	1349	327	213	229	175	211	204	228	239	247	221	212	231	208	201	163	169	163	182	171	171	130	150
3	0	4011	1289	819	675	494	436	395	355	351	322	302	346	333	289	283	301	256	226	250	232	213	219	91	105
4	0	0	2014	1010	725	484	356	352	318	311	262	259	314	301	280	273	245	229	204	217	204	254	961	61	79
5	0	0	0	1103	1037	723	409	767	567	523	515	468	436	361	370	349	329	317	297	295	310	318	288	118	68
6	0	0	0	0	845	1153	919	971	616	609	596	526	451	315	329	316	307	317	271	330	315	281	118	57	61
7	0	0	0	0	0	2518	1095	985	731	622	604	526	421	318	337	415	409	400	379	358	336	321	108	42	57
8	0	0	0	0	0	0	0	485	731	633	546	511	411	287	317	370	351	329	330	350	334	311	105	35	49
9	0	0	0	0	0	0	0	0	390	583	536	452	401	251	297	311	331	320	309	318	299	281	101	34	46
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	211	517	422	401	351	331	320	309	317	278	297	278	272	100	27	32
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	228	311	325	311	320	320	324	317	274	286	279	262	100	26	31
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	141	221	225	235	241	232	226	244	229	219	212	101	28	28
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	76	167	176	181	187	177	171	158	180	181	101	28	27
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	46	42	22	31	67	81	97	110	107	104	17	16
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	4	22	46	49	51	66	64	88	93	11	14
16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	6	10	17	53	37	43	46	8	11
17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	7	8	17	17	26	26	6	6
18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	8	8	12	13	2	3
19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	2	4	4	1	1
20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0
21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
22	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
23	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Tabla I

Una forma de disminuir el costo consiste en utilizar una técnica de dispersión múltiple empleada inicialmente por Bishop. La longitud elegida para el elemento de trayectoria es tal que pueden ocurrir varias colisiones a lo largo de él. De este modo, las colisiones se agrupan en un único punto y la desviación angular resultante se calcula mediante la convolución de Goudsmit y Saunderson.

3.6.2.2. Muestras delgadas

La Figura 9 representa el diagrama de flujo para la simulación de la distribución de electrones en una capa delgada de espesor Z_f depositada sobre un sustrato, como se muestra esquemáticamente en la Figura 10³.

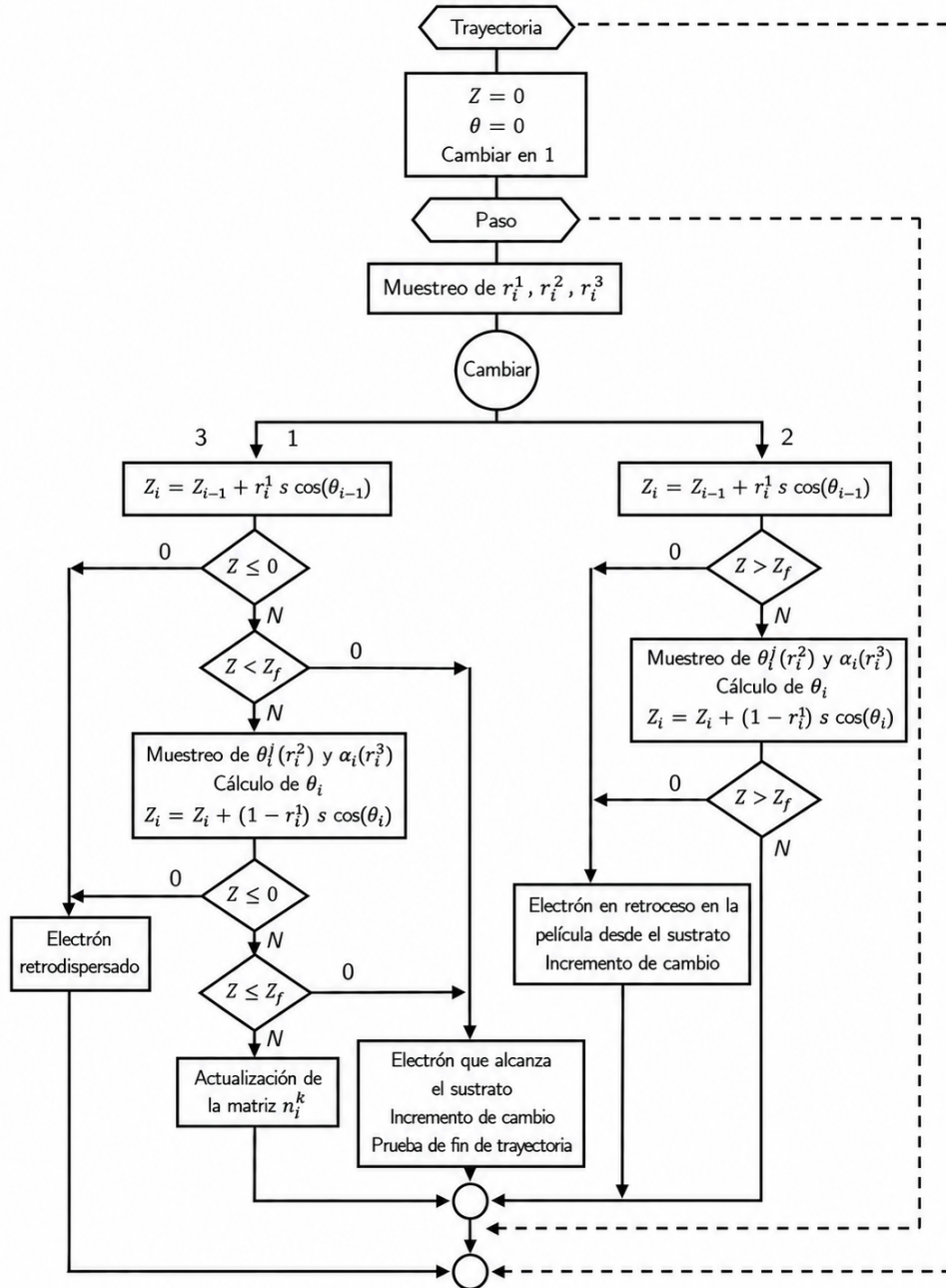


Fig. 9. - Simulación de la distribución de electrones (muestras delgadas).

³Este procedimiento también puede usarse para tratar capas delgadas sin sustrato.

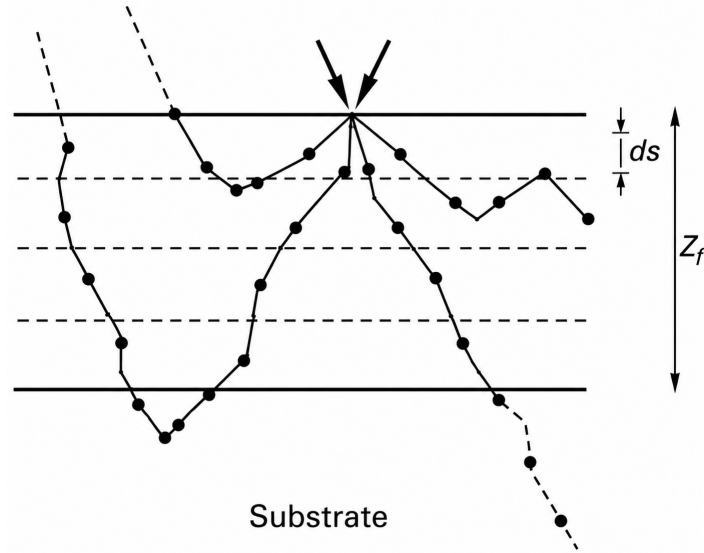


Fig. 10 - Representación esquemática de una capa delgada depositada sobre un sustrato.

En primer lugar, se calcula R^f , el rango o camino recorrido por los electrones en un material cuya composición es la misma que la de la película. A diferencia del procedimiento descrito en la sección anterior para la distancia recorrida en un paso de la trayectoria, utilizaremos una fracción fija del rango recorrido para poder utilizar el método de Goudsmit y Saunderson (Apéndice IV); de esta manera, reducimos el número de pasos que deben considerarse, lo cual produce una reducción considerable del costo del cálculo.

Si tomamos la longitud de un paso como una N -ésima parte de la distancia máxima recorrida, podemos definir entonces un conjunto de $2N$ estados de energía, $(E_{i,1}; E_{i,2})$, con $1 \leq i \leq N$, correspondientes a las energías de electrones que han recorrido las distancias

$$S_{i,1}^f = \left(i - \frac{1}{2}\right) \frac{R^f}{N} \text{ y } S_{i,2}^f = i \frac{R^f}{N}$$

Para cada energía $E_{i,1}$, formamos y almacenamos en memoria el conjunto $(\theta_{i,j}^f)$ de ángulos de dispersión equiprobables. La Figura 10 muestra que el electrón puede penetrar en el sustrato cuando su energía se vuelve menor que E_1 , para la cual

$$Z_f / (R^f / N) = 1$$

Si seleccionamos un recorrido elemental variable S_m , en el sustrato, tal que :

$$S_m = R^s(E_{m-1,2}) - R^s(E_{m,2})$$

denotando por R^s el rango recorrido en un material de la misma composición que el sustrato, su longitud depende del índice del paso m , pero conservamos para el sustrato los mismos estados de energía que para la capa delgada. Formamos y almacenamos en memoria el conjunto de ángulos de dispersión equiprobables en el sustrato, $(\theta_{i,j}^s)$. Después de estos cálculos preliminares, se emprende la descripción de las trayectorias individuales. En primer lugar, inicializamos las variables Z y θ , y colocamos el conmutador en 1. Para un paso dado, extraemos entonces los números aleatorios r_1^i , r_2^i y r_3^i . Las posiciones 1, 2 y 3 del conmutador representan, respectivamente, las partes de la trayectoria del electrón en la película, en el sustrato y nuevamente en la película después de la retrodispersión desde el sustrato.

La asignación de las posiciones del conmutador por incremento nos permite finalizar la trayectoria de un electrón que hubiera realizado más de dos transiciones película-sustrato.

El lado izquierdo del diagrama de flujo (Fig. 9) corresponde a la parte de la trayectoria situada en la película; se reconoce fácilmente, puesto que incluye la actualización de la matriz de distribución espacial y energías de los electrones. Cuando los electrones atraviesan esta capa y entran en el sustrato, la posición del conmutador se incrementa en uno, de modo que el paso siguiente queda situado en el sustrato (lado derecho del diagrama de flujo).

La matriz n_i^k no interviene en esta rama y debe señalarse que el conjunto de ángulos de dispersión equiprobables difiere del conjunto de ángulos utilizado en la película. Los índices s y f se han eliminado de la figura para simplificar la notación.

3.7. Referencias

3.7.1. Teoría cuántica

- Cohen-Tanoudi, C., Diu, B., Lalöe, F., *Mécanique Quantique* (Hermann, Paris) Vol. 1 (1973), Vol. 2 (1975).
- Landau, L. and Lifchitz, E., *Mécanique Quantique* (Mir, Moscou) 1967.
- Gerl, M., *Interactions particules-matières (généralités)*, Université de Nancy.
- Colliex, C., *Interactions inélastiques, rayonnement-matière*, Cours DEA, Université de Paris-Sud.
- Cosslett, V. E. and Thomas, R. N., *Brit. J. Appl. Phys.* 15 (1964) 235 ; 15 (1964) 883 ; 15 (1964) 1283 ; 16 (1965) 779.

3.7.2. Métodos de Monte Carlo

- Berger, M. J., *Methods in computational Physics*, Vol. 1 (Academic Press, New York) 1963.
- Bishop, H., Thesis, Cambridge University (1965).
- Shimizu, R., Kataoka, Y., Ikuta, T., Koshikama, T. and Hashimoto, H., *J. Phys. D, Appl. Phys.* 9 (1976) 101.
- Henoc, J. and Maurice, F., *Use of Monte-Carlo Calculations in Electron Probe Microanalysis and Scanning Electron Microscopy*, Rapport CEA R 4615 (1975). NBS special Publication n° 460 (1976).

3.8. Apéndice I Transformadas de Fourier del potencial $v(r)$

El potencial está dado por :

$$v(r) = \frac{Ze^2}{r} e^{-r/a}$$

La transformada $v(\mathbf{q})$ de $v(\mathbf{r})$ se define mediante :

$$v(\mathbf{q}) = \int_{r,\theta,\Phi} \frac{Ze^2}{r} e^{-r/a} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d_3r$$

con :

$$\begin{cases} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r} = q r \cos \theta \\ d_3r = r^2 \sin \theta d\theta d\Phi dr \end{cases}$$

por lo tanto :

$$v(\mathbf{q}) = \int_0^\infty \frac{Ze^2}{r} r^2 e^{-r/a} dr \int_0^\pi e^{-iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\Phi$$

1) Integración respecto de Φ

$$v(q) = 2\pi Ze^2 \int_0^\infty r e^{-r/a} dr \int_0^\pi e^{-iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta$$

2) Integración con respecto a θ

Estableciendo $\cos \theta = u$, tenemos:

$$\begin{aligned} \int_0^\pi e^{-iqr \cos \theta} \sin \theta d\theta &= \int_{-1}^{+1} e^{-iqr u} du = \left| \frac{i}{qr} e^{-iqr u} \right|_{-1}^{+1} \\ &= \frac{i}{qr} (e^{-iqr} - e^{+iqr}) = \frac{2 \sin qr}{qr} \end{aligned}$$

La integral se convierte en:

$$v(q) = \frac{4\pi Ze^2}{q} \int_0^\infty e^{-r/a} \sin qr dr$$

3) Integración respecto de r

Integramos por partes dos veces:

- Primera integración:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-r/a} \sin qr dr &= \left| -\sin qr \frac{e^{-r/a}}{1/a} \right|_0^\infty + qa \int_0^\infty e^{-r/a} \cos qr dr \\ &= qa \int_0^\infty e^{-r/a} \cos qr dr \end{aligned}$$

- Segunda integración:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-r/a} \cos qr dr &= \left| -\frac{e^{-r/a}}{1/a} \cos qr \right|_0^\infty - qa \int_0^\infty e^{-r/a} \sin qr dr \\ &= a - qa \int_0^\infty e^{-r/a} \sin qr dr \end{aligned}$$

Volviendo a la integral original:

$$\begin{aligned}\int_0^\infty e^{-r/a} \sin qr \, dr &= qa \left(a - qa \int_0^\infty e^{-r/a} \sin qr \, dr \right) \\ \int_0^\infty e^{-r/a} \sin qr \, dr &= qa^2 - q^2 a^2 \int_0^\infty e^{-r/a} \sin qr \, dr \\ \int_0^\infty e^{-r/a} \sin qr \, dr &= \frac{qa^2}{1 + q^2 a^2}\end{aligned}$$

Finalmente, la transformada de Fourier del potencial es:

$$\begin{aligned}v(q) &= \frac{4\pi Ze^2}{q} \left(\frac{qa^2}{1 + q^2 a^2} \right) \\ v(q) &= \frac{4\pi Ze^2}{\frac{1}{a^2} + q^2}\end{aligned}$$

Sustituyendo en la ecuación:

$$\sigma(\theta) = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} |V(q)|^2$$

con:

$$\begin{cases} q = 2k \sin \frac{\theta}{2} \text{ y } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ \theta_0 = \frac{1}{ka} \end{cases}$$

obtenemos:

$$\sigma(\theta) = \frac{Z^2 e^4}{16E^2 \left(\sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\theta_0^2}{4} \right)^2}$$

3.8.1. Cálculo de la sección eficaz total de dispersión

$\sigma(\theta)$ es la sección eficaz diferencial de dispersión simple. Para obtener la sección eficaz total de dispersión σ_e , debemos integrar sobre todo el ángulo sólido Ω :

$$\begin{aligned}\sigma_e &= \int_\Omega \sigma(\theta) d\Omega = \int_0^\pi \sigma(\theta) 2\pi \sin \theta \, d\theta \\ \sigma_e &= \int_0^\pi \frac{2\pi Z^2 e^4}{16E^2} \frac{\sin \theta}{\left(\sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\theta_0^2}{4} \right)^2} d\theta\end{aligned}$$

Estableciendo $\alpha = \theta_0^2/4$, nos queda por integrar:

$$\int_0^\pi \frac{\sin \theta d\theta}{\left(\sin^2 \frac{\theta}{2} + \alpha \right)^2} = \int_0^\pi \frac{2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}}{\left(\sin^2 \frac{\theta}{2} + \alpha \right)^2} d\theta$$

Estableciendo $u = \theta/2$, la integral se convierte en:

$$\int_0^{\pi/2} \frac{4 \sin u \cos u}{(\sin^2 u + \alpha)^2} du$$

Estableciendo $v = \sin u$, resulta

$$\int_0^1 \frac{4v \, dv}{(v^2 + \alpha)^2} = 2 \left| -\frac{1}{(v^2 + \alpha)} \right|_0^1 = \frac{2}{\alpha(1 + \alpha)}$$

y

$$\sigma_e = \left(\frac{Ze^2}{2E} \right)^2 \frac{\pi}{\alpha(1 + \alpha)}$$

Tomando el cociente $\sigma(\theta)/\sigma_e$, obtenemos $f(\theta)$, el factor de dispersión:

$$f(\theta) = \frac{\alpha(1 + \alpha)}{\pi} \frac{1}{(1 + 2\alpha - \cos \theta)^2}$$

Las colisiones responsables de la pérdida de energía de los electrones involucran una desviación angular adicional, que se tiene en cuenta multiplicando la sección eficaz total σ_e por el factor $(Z + 1)/Z$ (Spencer (1955) y Fano (1954)).

3.9. Apéndice II Perturbación dependiente del tiempo.

Planteamiento del problema. - Consideramos un sistema físico hamiltoniano $\mathcal{H}_0$, cuyos vectores propios son $|\varphi_n\rangle$ y cuyos valores propios son E_n . Tenemos entonces:

$$\mathcal{H}_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle.$$

Suponemos que el espectro de $\mathcal{H}_0$ es discreto y que $\mathcal{H}_0$ es independiente del tiempo. Los estados propios son, por lo tanto, estados estacionarios. En el instante $t_0 = 0$, el sistema es perturbado; el hamiltoniano se convierte en:

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + V(t) = \mathcal{H}_0 + \lambda \hat{V}(t)$$

donde $\lambda \ll 1$ y $\hat{V}(t)$ es un observable del mismo orden de magnitud que $\mathcal{H}_0$ y nulo para $t < 0$. Al estar el sistema inicialmente en el estado $|\varphi_i\rangle$, un estado propio de $\mathcal{H}_0$ con valor propio E_i , la perturbación hace que $|\varphi_i\rangle$ ya no sea un estado propio de $\mathcal{H}(t)$; buscamos determinar en el instante t la probabilidad $P_{if}(t)$ de encontrar el sistema en otro estado propio $|\varphi_f\rangle$ de $\mathcal{H}_0$. Por lo tanto, se requiere estudiar las transiciones producidas por la perturbación entre los estados estacionarios del sistema no perturbado.

3.9.1. Ecuación de Schrödinger

Tenemos :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = \left(\mathcal{H}_0 + \lambda \hat{V}(t) \right) |\Psi(t)\rangle \quad (\text{AII.1})$$

con

$$|\Psi(t=0)\rangle = |\varphi_i\rangle$$

Por definición, la probabilidad $P_{if}(t)$ se escribe :

$$P_{if}(t) = |\langle \varphi_f | \Psi(t) \rangle|^2 = |C_f(t)|^2$$

Al elegir la representación $|\varphi_n\rangle$, la base es $\{|\varphi_n\rangle\}$; las componentes $C_n(t)$ de $|\Psi(t)\rangle$ sobre $\{|\varphi_n\rangle\}$, definidas por $C_n(t) = \langle \varphi_n | \Psi(t) \rangle$, permiten escribir :

$$\Psi(t) = \sum_n C_n(t) |\varphi_n\rangle$$

Proyectando ambos miembros de la ecuación (1) sobre la base $|\varphi_n\rangle$ y utilizando $\sum_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| = 1$, obtenemos :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \sum_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| \Psi(t)\rangle = \sum_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| \left(\mathcal{H}_0 + \lambda \hat{V}(t) \right) |\Psi(t)\rangle$$

Teniendo en cuenta la relación $\langle\varphi_n| \mathcal{H}_0 |\varphi_k\rangle = E_n \delta_{nk}$, obtenemos el sistema de n ecuaciones :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} C_n(t) &= C_n(t) E_n + \lambda \sum_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_n| \hat{V}(t) |\Psi(t)\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} C_n(t) &= C_n(t) E_n + \lambda \sum_k \hat{V}_{nk} C_k(t) \end{aligned} \quad (\text{AII.2})$$

Para $t = 0$, las soluciones son :

$$C_n(t) = b_n e^{-iE_n t/\hbar} \text{ cuando } \lambda \hat{V}(t) = 0,$$

siendo los valores de b_n constantes que dependen de las condiciones iniciales. Por lo tanto, ensayaremos soluciones de la forma :

$$\begin{aligned} C_n(t) &= b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \quad \text{cuando} \quad \lambda \hat{V}(t) \neq 0 \\ \frac{dC_n(t)}{dt} &= \frac{db_n(t)}{dt} e^{-iE_n t/\hbar} - i \frac{E_n}{\hbar} b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \end{aligned} \quad (\text{AII.3})$$

Utilizando el resultado (3) en la ec. (2) y multiplicando ambos miembros de la ecuación por $e^{iE_n t/\hbar}$, obtenemos :

$$i\hbar \frac{db_n(t)}{dt} = \lambda \sum_k \hat{V}_{nk} b_k(t) e^{+i(E_n - E_k)t/\hbar}$$

Haciendo $\omega_{nk} = (E_n - E_k) / \hbar$:

$$i\hbar \frac{db_n(t)}{dt} = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk} t} \hat{V}_{nk}(t) b_k(t) \quad (\text{AII.4})$$

Escribiendo que $b_n(t) = b_n^0(t) + \lambda b_n^1(t) \dots$, obtenemos :

$$\frac{db_n(t)}{dt} = \frac{db_n^0(t)}{dt} + \lambda \frac{db_n^1(t)}{dt} + \dots$$

y utilizando este resultado en (4) :

$$i\hbar \left(\frac{db_n^0(t)}{dt} + \lambda \frac{db_n^1(t)}{dt} + \dots \right) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk} t} V_{nk}(t) (b_k^0(t) + \lambda b_k^1(t) + \dots)$$

Identificando los coeficientes de las potencias correspondientes de λ , obtenemos lo siguiente en función de los órdenes sucesivos :

Orden

$$\begin{aligned} 0 \quad & \frac{db_n^0(t)}{dt} = 0 \\ 1 \quad & i\hbar \frac{db_n^1(t)}{dt} = \sum_k e^{i\omega_{nk} t} \hat{V}_{nk}(t) b_k^0(t) \\ & \vdots \\ r \quad & i\hbar \frac{db_n^r(t)}{dt} = \sum_k e^{i\omega_{nk} t} V_{nk}(t) b_k^{r-1}(t) \end{aligned}$$

Una vez determinado uno de los b_n , los demás se obtienen mediante una fórmula de recurrencia, puesto que supusimos que, para $t = 0$, el sistema estaba en el estado $|i\rangle$:

$$b_n(t=0) = \delta_{ni} \begin{cases} b_n^0(t=0) = \delta_{ni} \rightarrow b_n^0(t) = \delta_{ni} \\ b_n^1(t=0) = 0 \end{cases}$$

La ecuación de primer orden en λ da :

$$i\hbar \frac{db_n^1(t)}{dt} = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \hat{V}_{nk}(t) \delta_{ki} = e^{i\omega_{ni}t} \hat{V}_{ni}(t)$$

por lo tanto :

$$b_n^1(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} \hat{V}_{ni}(t') dt'$$

Volviendo a la probabilidad $P_{if} = |C_f|^2$, con

$$\begin{aligned} C_f &= b_f(t) e^{-iE_f t/\hbar} = (b_f^0(t) + \lambda b_f^1(t)) e^{-iE_f t/\hbar} \\ C_f &= \lambda b_f^1(t) e^{-iE_f t/\hbar} \end{aligned}$$

puesto que el sistema se encontraba inicialmente en el estado $|i\rangle$

$$|C_f|^2 = \lambda^2 |b_f^1(t)|^2$$

y volviendo al observable $V(t) = \lambda \hat{V}(t)$:

$$P_{if} = |C_f|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} V_{fi}(t') dt' \right|^2$$

Esta fórmula muestra que la probabilidad de una transición es proporcional al cuadrado de la transformada de Fourier de la perturbación considerada como la pulsación de Bohr asociada con la transición estudiada.

En el caso particular en que $V(t) = V \cos \omega t$, con V independiente del tiempo, tenemos:

$$\begin{aligned} P_{if}(t, \omega) &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} V_{fi} \cos \omega t' dt' \right|^2 \\ P_{if}(t, \omega) &= \frac{V_{fi}^2}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} \frac{e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'}}{2} dt' \right|^2 \\ &= \frac{V_{fi}^2}{4\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i(\omega_{fi}+\omega)t'} + e^{i(\omega_{fi}-\omega)t'} dt' \right|^2 \\ P_{if}(t, \omega) &= \frac{V_{fi}^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \end{aligned} \tag{AII.5}$$

Si $\omega = 0$, la perturbación es independiente del tiempo, y

$$P_{if}(t) = \frac{V_{fi}^2}{\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i\omega_{fi}t}}{\omega_{fi}} \right|^2 = \frac{V_{fi}^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin \frac{\omega_{fi}t}{2}}{\omega_{fi}/2} \right)^2$$

Si la energía E_f se encuentra en una parte continua del espectro de $\mathcal{H}_0$, no existe manera de medir la probabilidad, para un instante t , de encontrar al sistema en un estado final bien definido $|\varphi_f\rangle$. $|\langle \varphi_f | \Psi(t) \rangle|^2$ representa entonces una densidad de probabilidad para cierto grupo de estados finales. La probabilidad se obtiene mediante una integración sobre un dominio centrado en este grupo. Debemos escribir entonces:

$$\delta P_{if} = \frac{V_{fi}^2}{\hbar^2} \left(\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2} \right)^2$$

y observando que:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2} \right)^2 = 2\pi t \delta(\omega_{fi}) = 2\pi \hbar t \delta(E_f - E_i),$$

siempre podemos transformar la integración sobre los estados finales en una integración sobre la energía utilizando la densidad de los estados finales $\rho(E)$:

$$P_{if} = \frac{1}{\hbar^2} \int \rho(E) V_{fi}^2 2\pi \hbar t \delta(E_f - E_i) dE$$

$$P_{if}/t = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E_f = E_i) |\langle E_f = E_i | V | \varphi_i \rangle|^2$$

Debe entenderse que las energías en cuestión son las del sistema considerado en su conjunto. Como ejemplo, consideremos el caso de la dispersión. Si la dispersión es elástica, tenemos $E_i = \hbar^2 k_i^2 / (2m)$ y

$$E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m}$$

Aquí, $\mathbf{k}_i$ y $\mathbf{k}_f$ denotan los vectores de onda de los electrones incidente y dispersado, respectivamente, con

$$|\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f|$$

Si la dispersión es inelástica, tomamos

$$E_i = \varepsilon_0 - \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \quad \text{y} \quad E_f = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m}$$

Esto corresponde al paso del átomo desde el estado fundamental $|0\rangle$ al estado excitado $|n\rangle$.

3.10. Apéndice III Teorema de suma

Sea un observable $f(x, y, z)$ o $f(r)$ que se denotará simplemente como f y sean f_{0n} los elementos de matriz para la transición desde el estado $|0\rangle$ al estado $|n\rangle$:

$$f_{0n} = \int \Psi_0^* f \Psi_n d^3r$$

La dependencia temporal de los elementos f_{0n} se determina a partir de la dependencia de las Ψ_n . Podemos escribir $\Psi_n = \varphi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, entonces:

$$f_{0n}(t) = \int \varphi_0^* f \varphi_n e^{-i(E_n - E_0)t/\hbar} d^3r = f_{0n} e^{-i(E_n - E_0)t/\hbar}$$

$$\frac{d}{dt} (f_{0n}(t)) = \dot{f} = -\frac{i}{\hbar} (E_n - E_0) f_{0n}(t) = \frac{i}{\hbar} (E_0 - E_n) f_{0n}(t) \quad (\text{AIII.1})$$

Debemos evaluar la expresión:

$$\sum_n (E_n - E_0) |f_{0n}|^2 = \sum_n (E_n - E_0) (f_{0n}) (f_{0n})^*$$

Por definición, la matriz adjunta $(f_{0n})^* = (f_{n0})^+$. Por lo tanto, tenemos:

$$\sum_n (E_n - E_0) (f_{0n}) (f_{0n})^* = \sum_n (E_n - E_0) (f_{0n}) (f_{n0})^+$$

De (AIII.1) obtenemos $(E_n - E_0) f = \frac{\hbar}{i} \dot{f}$, y de esto :

$$\sum_n (E_n - E_0) (f_{0n}) (f_{n0})^+ = -\frac{\hbar}{i} \sum_n (\dot{f}_{0n}) (f_{n0})^+ = i\hbar (\dot{f} f^+)_{00}$$

Las funciones de onda del átomo pueden elegirse reales y los elementos de matriz quedan entonces relacionados por $f_{0n} = f_{n0}$ y

$$\dot{f}_{n0} = -\frac{i}{\hbar} (E_0 - E_n) f_{n0} = -\frac{i}{\hbar} (E_0 - E_n) f_{0n} = \frac{i}{\hbar} (E_n - E_0) f_{0n} = -\dot{f}_{0n}$$

La suma $i\hbar \sum_n (f_{0n}) (f_{n0})^+$ también puede escribirse :

$$-i\hbar \sum_n (\dot{f}_{n0}) (f_{n0})^+ = -i\hbar \sum_n (f_{0n}^+) (\dot{f}_{n0})$$

y también :

$$i\hbar (\dot{f} f^+)_{00} = -i\hbar (f^+ \dot{f})_{00}$$

Tomando el promedio de las dos expresiones :

$$\sum_n (E_n - E_0) |f_{0n}|^2 = \frac{i\hbar}{2} (\dot{f} f^+ - f^+ \dot{f})$$

Si este resultado se aplica a $f = \sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}$, sabiendo que :

$$\dot{f} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} \cdot \nabla f + \nabla f \cdot \mathbf{p})$$

y observando que :

$$\begin{cases} \nabla f = \sum_a -i\mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} \\ \mathbf{p} = -i\hbar \sum_a \nabla_a \end{cases}$$

el resultado es :

$$\dot{f} = -\frac{\hbar}{2m} \sum_a (\mathbf{q} \cdot \nabla_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} \mathbf{q} \cdot \nabla_a)$$

$\frac{i\hbar}{2} (\dot{f} f^+ - f^+ \dot{f})$ puede obtenerse directamente evaluando el conmutador

$$-\frac{i\hbar^2}{4m} \sum_{a,b} ((e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} \mathbf{q} \cdot \nabla_a + \mathbf{q} \cdot \nabla_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a}), e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_b})$$

Si $a \neq b$, los dos operadores conmutan evidentemente. Por lo tanto, queda :

$$\begin{aligned} & -\frac{i\hbar^2}{4m} \sum_a ((e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} \mathbf{q} \cdot \nabla_a - e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} \mathbf{q} \cdot \nabla_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a})) = \\ & = -\frac{i\hbar^2}{4m} \sum_a \{(iq^2 + \mathbf{q} \cdot \nabla_a) - (-iq^2 + \mathbf{q} \cdot \nabla_a)\} \\ & = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_a q^2 = \frac{\hbar^2}{2m} q^2 Z \end{aligned}$$

y, finalmente :

$$\sum_n \frac{2m}{\hbar^2 q^2} (E_n - E_0) |(\sum_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a})_{0n}|^2 = Z$$

3.11. Apéndice IV Cálculo de la función de distribución para la dispersión múltiple de electrones

El cálculo se realiza utilizando el método de Goudsmit y Saunderson (1940), mediante la convolución de la sección eficaz de dispersión simple desarrollada en términos de polinomios de Legendre.

3.11.1. Desarrollo de la sección eficaz de dispersión simple

Buscamos desarrollar $f(\theta)$ como una serie de Legendre :

$$f(\theta) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)a_n P_n(\cos \theta)$$

con

$$a_n = \int_0^{\pi} 2\pi f(\theta) P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta$$

donde :

$$f(\theta) = \frac{\alpha(1+\alpha)}{\pi} \frac{1}{(1+2\alpha - \cos \theta)^2}$$

con

$$\begin{aligned} \alpha &= 3,4 \times 10^{-3} \left(Z^{2/3} \right) / E \\ a_n &= \int_0^{\pi} 2\pi \frac{\alpha(1+\alpha)}{\pi} \frac{1}{(1+2\alpha - \cos \theta)^2} P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta \\ a_n &= 2\alpha(1+\alpha) \int_{-1}^0 \frac{1}{(1+2\alpha - \cos \theta)^2} P_n(\cos \theta) d(\cos \theta) = 2\alpha(1+\alpha) \times \\ &\quad \times \int_{-1}^{+1} \frac{1}{(1+2\alpha - u)^2} P_n(u) du \end{aligned}$$

Haciendo $x = 1 + 2\alpha$,

$$a_n/2\alpha(1+\alpha) = \int_{-1}^{+1} \frac{1}{(x-u)^2} P_n(u) du$$

pero:

$$\frac{1}{(x-u)^2} = -\frac{d}{dx} \frac{1}{(x-u)};$$

de donde :

$$a_n/2\alpha(1+\alpha) = -\frac{d}{dx} \int_{-1}^{+1} \frac{P_n(u)}{x-u} du = -2 \left(\frac{d}{dx} \int_{-1}^{+1} \frac{P_n(u)}{2(x-u)} du \right)$$

por lo tanto :

$$a_n/2\alpha(1+\alpha) = -2 \frac{d}{dx} (Q_n(x))$$

donde $Q_n(x)$ es la función de Legendre de segunda especie

$$a_n = -4\alpha(1+\alpha) Q'_n(1+2\alpha)$$

Las funciones $Q_n(x)$ están relacionadas mediante las expresiones (Humbert y Colombo (1949)) :

$$\begin{cases} nQ_n = xQ'_n - Q'_{n-1} \\ (n+1)Q_n = Q'_{n+1} - xQ'_n \end{cases}$$

Multiplicando la primera de estas ecuaciones por $(n+1)$ y la segunda por $-n$ y sumando las expresiones resultantes :

$$nQ'_{n+1} = (2n+1)xQ'_n - (n+1)Q'_{n-1}$$

Las sucesivas Q'_n se obtienen a partir de las dos primeras mediante la fórmula de recurrencia;

- a partir de:

$$Q_0(x) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{x+1}{x-1} \right),$$

obtenemos :

$$Q'_0(x) = -\frac{1}{(x+1)(x-1)} = -\frac{1}{4\alpha(1+\alpha)};$$

- a partir de:

$$Q_1(x) = \frac{x}{2} \ln \left(\frac{x+1}{x-1} \right) - 1,$$

obtenemos :

$$\begin{aligned} Q'_1(x) &= \frac{1}{2} \cdot \ln \left(\frac{x+1}{x-1} \right) - \frac{x}{(x+1)(x-1)} \\ &= \frac{-1}{4\alpha(1+\alpha)} \left[1 + 2\alpha + 2\alpha(1+\alpha) \ln \left(\frac{\alpha}{1+\alpha} \right) \right] \\ a_0 &= -4\alpha(1+\alpha)Q'_0 = 1 \\ a_1 &= -4\alpha(1+\alpha)Q'_1 = 1 + 2\alpha + 2\alpha(1+\alpha) \ln \left(\frac{\alpha}{1+\alpha} \right) \end{aligned}$$

Los a_n pueden definirse partiendo de la misma fórmula de recurrencia que para las Q'_n , sea :

$$na_{n+1} = (2n+1)(1+2\alpha)a_n - (n+1)a_{n-1}$$

tomando 1 como valor inicial de n .

3.11.2. Convolución de dos funciones desarrolladas en la forma de polinomios de Legendre

3.11.2.1. Caso general

Consideremos un haz de electrones con una determinada distribución angular,

$$f_1(\theta_1) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)a_n P_n(\cos \theta_1)$$

Utilizando la notación de la Figura 11, la distribución angular después de una colisión será :

$$F(\theta_2) d\Omega_2 = \int f_1(\theta_1) d\Omega_1 f_2(\omega) d\Omega_2$$

Si denominamos $f_2(\omega)$ a la sección eficaz de dispersión después de una colisión,

$$f_2(\omega) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)b_n P_n(\cos \omega)$$

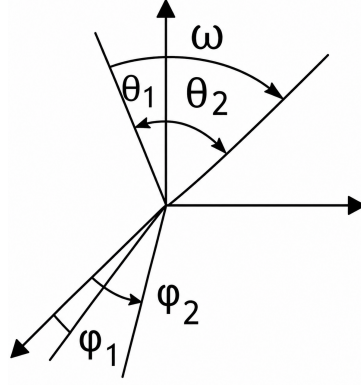


Fig. 11 Diagrama de coordenadas angulares en el producto de dos eventos de dispersión.

entonces, sustituyendo esta expresión en la anterior, obtenemos :

$$F(\theta_2) = \int f_1(\theta_1) d\Omega_1 \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) b_n P_n(\cos \omega)$$

De acuerdo con el teorema de adición de los polinomios de Legendre,

$$P_n(\cos \omega) = P_n(\cos \theta_1) P_n(\cos \theta_2) + 2 \sum_{k=1}^n \frac{(n-k)!}{(n+k)!} \times \\ \times p_n^k(\cos \theta_1) p_n^k(\cos \theta_2) \cos k(\varphi_2 - \varphi_1)$$

La suma sobre todos los valores positivos de $(\varphi_2 - \varphi_1)$ hace que el segundo término de esta ecuación se anule.

Por lo tanto :

$$F(\theta_2) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) b_n P_n(\cos \theta_2) \int_0^{\pi} f_1(\theta_1) P_n(\cos \theta_1) 2\pi \sin \theta d\theta$$

pero

$$\int_0^{\pi} f_1(\theta_1) P_n(\cos \theta_1) 2\pi \sin \theta d\theta = a_n;$$

De ello se deduce que :

$$F(\theta_2) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) a_n b_n P_n(\cos \theta_2)$$

Generalizando, para un haz incidente dado cuya distribución puede representarse mediante :

$$f_0(\theta) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) a_n P_n(\cos \theta),$$

y siendo la sección eficaz de dispersión después de la i -ésima colisión :

$$f_i(\theta) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) i_n P_n(\cos \theta),$$

la distribución angular después de m colisiones será de la forma :

$$f_m(\theta) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) a_n b_n c_n \dots m_n P_n(\cos \theta)$$

En el caso particular en que el haz incidente tiene una distribución representada mediante la función δ de Dirac, $\delta(\theta)$:

$$a_n = \int \delta(1-u) P_n(u) du = P_n(1) = 1$$

y $b_n = c_n = \dots m_n$ (la sección eficaz de dispersión simple es la expresión de Rutherford en la que se ha incluido el efecto de apantallamiento) obtenemos la forma más simple :

$$f_m(\theta) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) b_n^m P_n(\cos \theta)$$

3.11.3. Función de distribución de la dispersión

Consideremos un electrón que ha recorrido $\Delta\rho s$; el número medio de colisiones que ha experimentado es $p = \frac{N}{A} \sigma_E \Delta\rho s$. Suponiendo que la probabilidad de que un electrón haya colisionado m veces obedece la ley de Poisson, podemos escribir :

$$\Pi(m) = \frac{p^m}{m!} \exp(-p)$$

La función de densidad de probabilidad de dispersión, $F(p, \theta)$ toma entonces la forma :

$$\begin{aligned} F(p, \theta) &= \sum_{m=0}^{\infty} f_m(\theta) \Pi(m) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{p^m \exp(-p)}{m!} b_n^m \right) P_n(\cos \theta) \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \exp(p b_n) \exp(-p) P_n(\cos \theta) \\ &= \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \exp(-p(1-b_n)) P_n(\cos \theta) \\ &= \exp(-p) \left(\frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) \exp(p b_n) P_n(\cos \theta) \right) \end{aligned}$$

Según Bishop, conviene considerar por separado la fracción no dispersada del haz de electrones al realizar el cálculo numérico de la serie para obtener una convergencia más rápida; sea :

$$\begin{aligned} \delta(\theta) &= \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) P_n(\cos \theta) \\ F(p, \theta) &= \exp(-p) \left(\delta(\theta) + \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) (\exp(p b_n) - 1) P_n(\cos \theta) \right) \end{aligned}$$

La función de distribución $G(\theta)$ se obtiene integrando la expresión anterior :

$$G(\theta) = 2\pi \int_0^{\theta} F(p, \theta) \sin \theta d\theta$$

3.11.4. Función de distribución relacionada con una función de densidad de probabilidad en forma de polinomios de Legendre

Mostraremos que la función de distribución que describe una función de densidad de probabilidad escrita en la forma de polinomios de Legendre puede expresarse muy sencillamente en términos de los coeficientes de los polinomios de Legendre.

Si :

$$F(\theta) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)b_n P_n(\cos \theta)$$

es el desarrollo de la función de densidad de probabilidad, la función de distribución $G'(\theta)$ se escribe :

$$G'(\theta) = \frac{1}{4\pi} \int_0^\theta \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)b_n P_n(\cos \theta) 2\pi \sin \theta d\theta$$

Invirtiendo el orden de suma e integración :

$$\begin{aligned} G'(\theta) &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} b_n \int_0^\theta (2n+1) P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta \\ &= \frac{1}{2} \left(b_0 \int_0^\theta P_0(\cos \theta) \sin \theta d\theta + \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^\theta b_n (2n+1) P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(b_0 \int_0^\theta \sin \theta d\theta + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \int_0^\theta (2n+1) P_n(\cos \theta) \sin \theta d\theta \right). \end{aligned}$$

Haciendo $u = \cos \theta$:

$$G'(\theta) = \frac{1}{2} \left(b_0 (1 - P_1(u)) - \sum_{n=1}^{\infty} b_n \int_0^{\cos \theta} (2n+1) P_n(u) du \right)$$

Las fórmulas de recurrencia dan :

$$\begin{aligned} -P'_{n-1}(u) + uP'_n(u) &= nP_n(u) \\ +P'_{n+1}(u) - uP'_n(u) &= (n+1)P_n(u); \end{aligned}$$

sumándolas se obtiene :

$$(2n+1)P_n(u) = P'_{n+1}(u) - P'_{n-1}(u)$$

Integrando, obtenemos :

$$(2n+1) \int P_n(u) = P_{n+1}(u) - P_{n-1}(u)$$

Sustituyendo en la integral :

$$G'(\theta) = \frac{1}{2} \left(b_0 (1 - P_1(u)) - \sum_{n=1}^{\infty} b_n (P_{n+1}(u) - P_{n-1}(u)) \right)$$

Sumando término a término,

$$\begin{aligned} G'(\theta) &= \frac{1}{2} \left(b_0 (1 - P_1(u)) + b_1 P_0(u) + b_2 P_1(u) + \sum_{n=1}^{\infty} (b_{n+2} - b_n) P_{n+1}(u) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(b_0 + b_1 P_0(u) + (b_2 - b_0) P_1(u) - \sum_{n=1}^{\infty} (b_n - b_{n+2}) P_{n+1}(u) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(b_0 + b_1 P_0(u) - \sum_{n=1}^{\infty} (b_{n-1} - b_{n+1}) P_n(u) \right) \end{aligned}$$

3.11.5. Cálculo numérico

Reemplazando los coeficientes b_n por sus expresiones y teniendo en cuenta la parte no dispersada del haz, obtenemos :

$$\begin{aligned}
G(\theta) &= \exp(-p) \left(1 + \frac{1}{2} (\exp(pa_0) - 1) + \frac{1}{2} (\exp(pa_1) - 1) - \right. \\
&\quad \left. - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2} \times (\exp(pa_{n-1})) - (\exp(pa_{n+1})) P_n(\cos \theta) \right) \\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \exp(pa_1 - p) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2} (\exp(pa_{n-1} - p) - \exp(pa_{n+1} - p)) \times \\
&\quad \times P_n(\cos \theta)
\end{aligned}$$

Esta función resulta especialmente adecuada para el cálculo; se evalúa de esta forma en una subrutina de computadora. La Figura 5 presenta un ejemplo del cálculo para una energía dada. Si subdividimos el intervalo 0-1 de $G(\theta)$ en intervalos iguales (del orden de 100), podemos determinar un número de ángulos de dispersión equiprobables igual al número de intervalos elegidos.

Se entiende que los conjuntos de ángulos de dispersión equiprobables cambian con cada paso, es decir, para cada energía electrónica la probabilidad de dispersión a grandes ángulos es mayor para las energías más bajas.

La Tabla II presenta los ángulos de dispersión equiprobables para electrones situados a 1/25 de su rango total en un blanco de aluminio bombardeado por electrones de 15 keV.

Tabla II. - Ángulos de dispersión equiprobables, $N = 128$. Aluminio Primer paso $E = 14,83$ keV

θ°	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0		0.80	1.50	2.00	2.42	2.78	3.11	3.42	3.71	4.00
1	4.18	4.43	4.67	4.90	5.13	5.35	5.56	5.77	5.97	6.17
2	6.37	6.57	6.77	6.97	7.17	7.36	7.56	7.73	7.92	8.13
3	8.30	8.49	8.68	8.86	9.05	9.24	9.42	9.61	9.80	9.98
4	10.17	10.36	10.55	10.75	10.94	11.13	11.32	11.52	11.71	11.90
5	12.10	12.30	12.50	12.70	12.91	13.11	13.32	13.53	13.74	13.95
6	14.16	14.38	14.60	14.82	15.05	15.27	15.50	15.74	15.97	16.21
7	16.45	16.70	16.95	17.21	17.46	17.73	17.99	18.26	18.54	18.82
8	19.11	19.40	19.70	20.01	20.32	20.64	20.96	21.30	21.64	22.00
9	22.36	22.73	23.11	23.50	23.91	24.32	24.75	25.20	25.66	26.14
10	26.64	27.16	27.70	28.26	28.85	29.47	30.12	30.80	31.52	32.29
11	33.10	33.97	34.90	35.90	36.98	38.16	39.45	40.88	42.47	44.27
12	46.32	48.70	51.53	54.96	59.30	65.04	73.25	86.61	115.80	—

3.12. Ejercicios sobre la simulación de trayectorias de electrones mediante técnicas de Monte-Carlo

Este cálculo de Monte Carlo comprende la simulación de 5000 trayectorias de electrones en blancos de Cu, Au y una aleación de Cu – Au (50-50 wt. %). La tensión de aceleración aplicada a los electrones es $E_0 = 20$ kV.

Considerando el blanco como semiinfinito cuando su espesor másico es al menos igual al rango efectivo (la parte de la trayectoria en la que la energía permanece por encima del nivel mínimo de excitación), hemos tomado como unidad de longitud (RANGE) la longitud máxima del recorrido que se produce en los diferentes blancos, correspondiente a una disminución de la energía hasta el nivel excitado más bajo. En este ejemplo, el umbral de excitación más bajo es el del cobre ($E_K = 8,98$ keV) y la distancia máxima recorrida con una disminución de energía desde E_0 a E_K se produce en el oro ($\text{RANGE} = 1,658$ mg/cm²).

Se considera que cada trayectoria está formada por una sucesión de pasos de trayectoria, cada uno de longitud igual a $1/20$ de la unidad de longitud (o $\text{RANGE}/20$) y cuyo número es igual (en el caso del Au) o menor (en el caso del Cu o Au-Cu) que 20. Los fenómenos que nos interesan ocurren, por lo tanto, en una región del blanco que podemos considerar como un apilamiento de 20 capas, cada una con un espesor másico de $\text{RANGE}/20$.

Toda esta información, registrada en la impresión, se reproduce en la Figura 1.

EJERCICIO DE MONTE CARLO PARA UN BLANCO QUE CONTIENE 2 ELEMENTOS

- 1 NZ = 29 A = 63,54 CC = 0,5 $E_K = 8,9810$ keV
- 2 NZ = 79 A = 197,20 CC = 0,5 $E_{L_{III}} = 11,918$ keV

EL ALCANCE EFECTIVO SE CALCULA PARA $E_0 = 20$ keV Y PARA $E_K = 8,981$ keV

BLANCO ELEMENTAL

$$\text{NZ} = 29 \quad R_{\text{Cu}} = 0,11147356 \cdot 10^{-2} \text{ g/cm}^2$$

$$\text{NZ} = 79 \quad R_{\text{Au}} = 0,16577312 \cdot 10^{-2} \text{ g/cm}^2$$

BLANCO COMPLEJO

$$R_{\text{Au-Cu}} = 0,13329617 \cdot 10^{-2} \text{ g/cm}^2$$

NÚMERO DE PASOS: 20

NÚMERO DE TRAYECTORIAS: 5000

$$\text{RANGE (VALOR MÁXIMO DE } R_{\text{Cu}}, R_{\text{Au}}, R_{\text{Au-Cu}}) = 0,16577312 \cdot 10^{-2} \text{ g/cm}^2$$

Fig. 1

La energía de cada electrón en el punto medio y al final de cada paso a lo largo de su trayectoria para blancos de Cu, Au y Au – Cu se presenta en las Tablas I, III y V, respectivamente.

Las Tablas II, IV y VI presentan la distribución energética de los electrones en función de la profundidad en los blancos de Cu, Au y Au – Cu, respectivamente. La distribución se presenta en forma de una tabla $N(i, j)$ donde i , el índice de columna, representa la energía para el paso, y j , el índice de fila, representa la profundidad. Por ejemplo, en la Tabla II, 909 electrones se encuentran en la segunda capa después de atravesar 4 pasos de energía.

Estas tablas incluyen una fila denominada *BS* que proporciona el número de electrones retrodispersados en cada paso.

energies step	mid-point	end
1	0.19678190E 02	0.19352291E 02
2	0.19022133E 02	0.18687531E 02
3	0.18348287E 02	0.18004186E 02
4	0.17655000E 02	0.17300477E 02
5	0.16940343E 02	0.16574311E 02
6	0.16202949E 02	0.15823306E 02
7	0.15437392E 02	0.15044176E 02
8	0.14643081E 02	0.14233573E 02
9	0.13815056E 02	0.13386858E 02
10	0.12948217E 02	0.12498246E 02
11	0.12036000E 02	0.11560265E 02
12	0.11069703E 02	0.10562707E 02
13	0.10037352E 02	0.94912940E 01
14	0.89216348E 01	0.83247102E 01
15	0.76957732E 01	0.70284791E 01
16	0.63140015E 01	0.55393974E 01
17	0.46842408E 01	0.37125709E 01
18	0.25484355E 01	0.96733048E 00
19	0.	0.
20	0.	0.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
BS	51	72	111	117	145	139	134	143	119	103	109	94	87	65	50	62	49	58	0	0
1	4949	545	454	444	436	419	393	364	342	331	304	277	247	242	231	207	196	170	0	0
2	0	4332	1343	997	717	602	564	520	497	502	462	417	409	393	370	344	337	305	0	0
3	0	0	2969	1596	1146	937	772	676	627	568	512	507	478	447	427	425	407	410	0	0
4	0	0	0	1700	1347	1013	863	741	645	590	582	550	500	488	486	475	468	448	0	0
5	0	0	0	0	856	1021	859	737	661	691	546	521	519	501	403	437	443	453	0	0
6	0	0	0	0	0	373	640	614	584	532	484	461	462	440	426	436	428	413	0	0
7	0	0	0	0	0	0	140	357	419	433	423	413	381	383	374	371	309	396	0	0
8	0	0	0	0	0	0	0	49	176	252	304	272	274	270	288	276	276	264	0	0
9	0	0	0	0	0	0	0	0	16	65	116	186	196	187	184	199	199	202	0	0
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	24	51	94	128	117	107	104	101	0	0
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8	16	27	43	61	62	73	0	0
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	5	13	16	23	32	0	0
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	5	9	12	0	0
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
TR	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Energies step	Mid-point		end	
1	0.19779103E	02	0.19556450E	02
2	0.19332020E	02	0.19105740E	02
3	0.18877569E	02	0.18647455E	02
4	0.18415343E	02	0.18181175E	02
5	0.17944891E	02	0.17706428E	02
6	0.17465719E	02	0.17222867E	02
7	0.16977278E	02	0.16729395E	02
8	0.16478961E	02	0.16225889E	02
9	0.15970087E	02	0.15711457E	02
10	0.15449893E	02	0.15185207E	02
11	0.14917519E	02	0.14646463E	02
12	0.14371984E	02	0.14093937E	02
13	0.13812168E	02	0.13526510E	02
14	0.13236782E	02	0.12942789E	02
15	0.12644331E	02	0.12341148E	02
16	0.12033021E	02	0.11719666E	02
17	0.11400783E	02	0.11076044E	02
18	0.10745083E	02	0.10407495E	02
19	0.10062831E	02	0.97105857E	01
20	0.93501898E	01	0.89809996E	01

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	19	20
BS	167	215	275	265	235	222	193	163	138	132	111	92	73	64	72	41	59	44	35
1	4833	1217	910	614	393	577	529	473	533	358	270	270	225	225	170	185	147	162	145
2	0	3401	1788	1207	877	867	734	572	506	458	414	386	364	371	324	323	309	260	252
3	0	0	1645	1408	1101	904	772	605	546	498	558	368	414	462	431	301	307	377	388
4	0	0	0	649	877	803	720	650	581	540	541	482	483	444	446	419	309	302	357
5	0	0	0	0	195	413	494	481	451	451	449	450	423	404	392	391	378	369	367
6	0	0	0	0	0	57	161	258	285	325	202	297	203	304	223	302	306	317	315
7	0	0	0	0	0	0	18	69	122	147	192	188	180	192	129	216	222	211	308
8	0	0	0	0	0	0	0	2	25	51	101	114	130	133	133	126	120	140	156
9	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8	16	59	64	84	77	84	88	80	72
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	7	12	38	39	45	48	49	47
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	6	8	14	15	13	12	33
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	2	4	16
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	2	9	3
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
TR	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Energies

Step	Mid-point	end
1	0.19737058E 02	0.19436417E 02
2	0.19177642E 02	0.18897679E 02
3	0.18614621E 02	0.18328355E 02
4	0.18038761E 02	0.17746709E 02
5	0.17449044E 02	0.17146377E 02
6	0.16844397E 02	0.16535049E 02
7	0.16223454E 02	0.15906418E 02
8	0.15584729E 02	0.15258159E 02
9	0.14924040E 02	0.14597482E 02
10	0.14246569E 02	0.13897756E 02
11	0.13542369E 02	0.13180613E 02
12	0.12811451E 02	0.12434596E 02
13	0.12049761E 02	0.11655558E 02
14	0.11252064E 02	0.10838223E 02
15	0.10413129E 02	0.99757154E 01
16	0.95242435E 01	0.90502447E 01
17	0.86575686E 01	0.80742444E 01
18	0.75509543E 01	0.70027443E 01
19	0.64252897E 01	0.58120230E 01
20	0.51573405E 01	0.44472087E 01

BS	1	2	3	4	5	6	7	0	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19
1	124	123	203	226	209	204	186	178	133	113	110	92	72	79	70	53	47	38	18
2	4876	906	795	677	607	506	485	414	377	359	313	310	277	225	224	222	196	175	173
3	0	3847	1656	1155	918	749	679	620	602	512	512	454	409	404	371	359	329	286	290
4	0	0	2135	1535	1109	912	801	687	653	589	522	500	496	472	415	425	409	398	367
5	0	0	0	947	1122	932	761	709	613	571	563	508	485	454	460	427	494	431	409
6	0	0	0	0	0	132	390	587	546	542	481	472	438	441	409	420	410	370	390
7	0	0	0	0	0	0	45	135	203	239	254	265	245	338	320	332	339	326	301
8	0	0	0	0	0	0	0	9	50	97	118	151	184	151	158	133	180	191	168
9	0	0	0	0	0	0	0	0	5	18	39	60	68	75	86	92	102	117	118
10	0	0	0	0	0	0	0	0	0	8	6	17	29	37	15	20	59	72	75
11	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	2	16	23	23	23	36	23	34
12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	4	2	3	3	11	13	10
13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	2	3	4	1	7
14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	1	2	1
15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
TR	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

3.13. Problemas

1. Suponiendo que no hubiera dispersión, ¿cuál sería la distribución de los electrones en las Tablas II, IV o VI?

Solución: En este caso, el recorrido coincide con la profundidad.

La matriz $N(i, j)$ es diagonal :

<i>BS</i>	1	2	3	...	20
1	0	0	0	...	0
2	5 000				
3		5 000			
⋮		⋮			
⋮		⋮	5 000		
20					5 000

Fig. 2.

2. Calcule η , el coeficiente de retrodispersión.

Solución: η es la relación entre el número de electrones retrodispersados (BS) y el número de electrones incidentes. En cada tabla, η es la suma de los BS dividida por el número de electrones incidentes, 5000.

Para

$$\text{Cu} : \eta = 1716/5000 = 0,34$$

$$\text{Au} : \eta = 2648/5000 = 0,53$$

$$\text{Au} - \text{Cu} : \eta = 2372/5000 = 0,47$$

Debe señalarse que el coeficiente de retrodispersión es una función que aumenta con $\bar{Z}$.

3. Determine la distribución energética de los electrones retrodispersados.

Solución: La fila denominada BS de las Tablas II, IV y VI proporciona el número de electrones retrodispersados con una energía indicada por el índice correspondiente i en las Tablas I, III y V. Estos resultados se representan en la Figura 3.

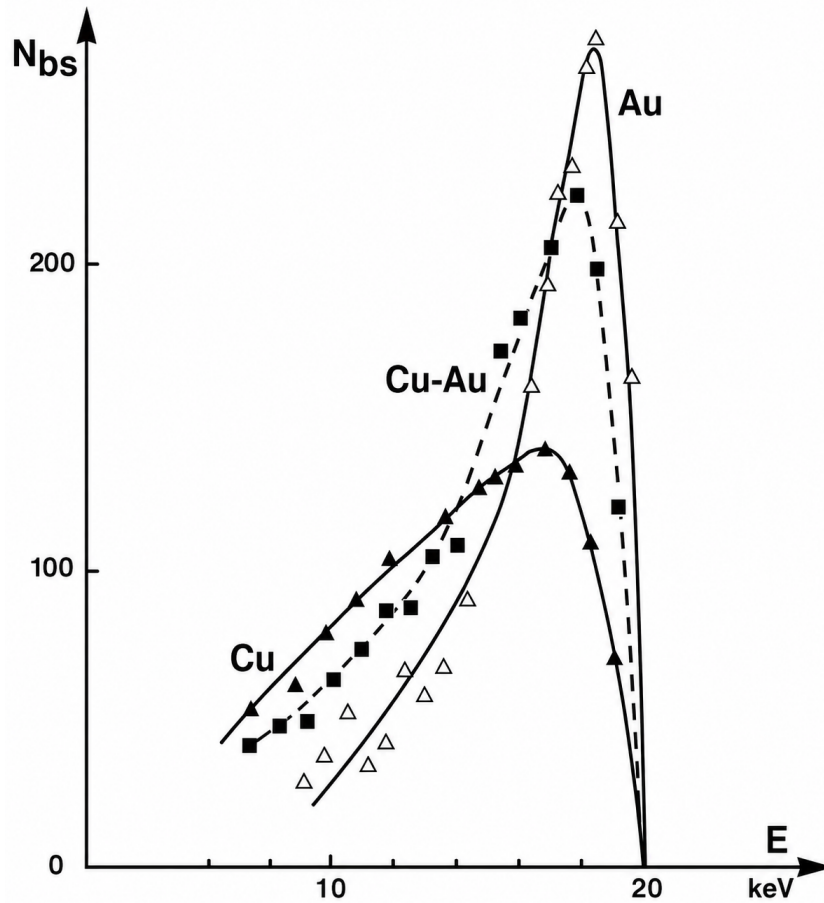


Fig. 3. Obsérvese que la energía del máximo de la distribución también es una función que aumenta con Z .

4. ¿Cuál es la distribución espacial de los electrones identificados por $(i-1, j)$ al pasar del paso $(i-1)$ al paso i ?

Solución: En el proceso de dispersión, los electrones pueden: 1) ser retrodispersados hacia la capa superior, 2) permanecer en la misma capa, 3) pasar a la capa inferior, o 4) no contabilizarse si su energía cae por debajo del nivel umbral de energía.

$$N(i-1, j) \rightarrow N_1(i, j-1) + N_2(i, j) + N_3(i, j+1) + N(i, j)_{\text{aniquilados}}$$

5. Muestre la distribución en profundidad en cobre para electrones de 17 keV. Compare este resultado con aquel para electrones de 9 keV.

Solución: 17 keV corresponde al quinto paso; 9 keV al decimocuarto (véase la Fig. 4).

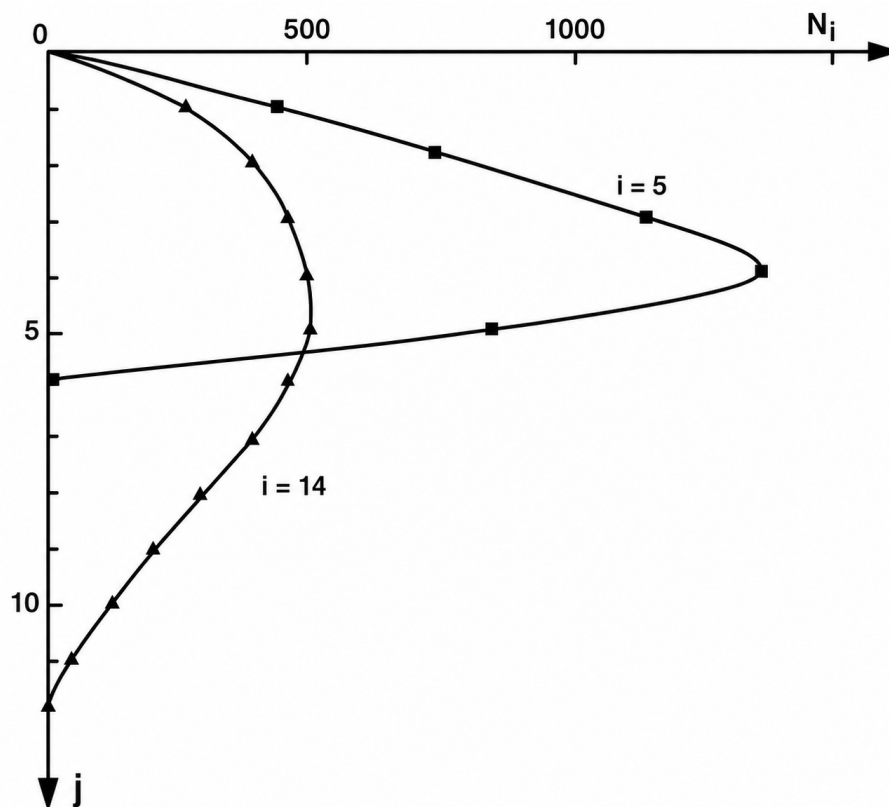


Fig. 4. Se produce un ensanchamiento progresivo en función de la pérdida de energía a medida que ocurren los eventos de dispersión.

6. Determine la profundidad de difusión completa para el cobre y el oro.

Solución: Por definición, la difusión completa se alcanza cuando los electrones se mueven en todas las direcciones con igual probabilidad. Esto ocurre en la capa en la que el número de electrones retrodispersados es igual al número de electrones dispersados en la dirección inicial hacia adelante. Esta es la capa por la que pasa el mayor número de electrones.

Para Cu, los recuentos totales de las respectivas capas son (para 5000 electrones iniciales):

Capa 1	10551 electrones
2	13035
3	12904
4	10896

Para Au :

Capa 1	12927 electrones
2	14158
3	12193
4	9239

La profundidad de difusión completa se alcanza para Cu y Au en la segunda capa, es decir, $\frac{\text{RANGE} \times 2}{20} = 0,166 \text{ mg/cm}^2$, o aproximadamente a 180 nm para Cu y 80 nm para Au. La difusión completa ocurre más rápidamente en el oro que en el cobre.

7. Determine el número de ionizaciones (en unidades arbitrarias) producidas en la undécima capa de cobre, dado que Q es proporcional a la sección eficaz de ionización en barns ($1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$) (véase la Ec. (22)).

Solución:

$$\begin{aligned} E &= 8,98 \text{ keV} & Q &= 0 \\ E &= 10,03 & Q &= 0,92 \\ E &= 11,06 & Q &= 1,73 \end{aligned}$$

El número de ionizaciones en una capa es la suma de los productos de la sección eficaz de ionización para una energía dada y el número de electrones que tienen esa energía, es decir :

$$\begin{aligned} n_j &= \sum_{i=12}^{18} N(i, j) Q(i) \text{ para } j = 11 \\ n_{11} &= (8 \times 1,73) + (16 \times 0,92) + 0 = 28,56 \end{aligned}$$

8. Proporcione la expresión literal de la distribución en profundidad de la emisión de rayos X (véase el Capítulo 4). Aplíquela al caso del cobre.

Solución: Dado que el número de fotones emitidos es proporcional al número de ionizaciones, la distribución en profundidad de la emisión de rayos X puede expresarse como la relación entre el número de ionizaciones producidas en una capa dada y el número de ionizaciones en una capa ideal, del mismo espesor másico, en un vacío en el que los electrones no serían dispersados ni frenados.

$$\varphi(j \times \Delta \rho z) = \frac{\sum_{i=1}^{20} N(i, j) Q(i)}{5000 Q(20)} \text{ con } \Delta \rho z = \frac{\text{RANGE}}{20}$$

Para el cobre, para la profundidad correspondiente a la quinta capa

$$\begin{aligned} \frac{1,658 \times 5}{20} \text{ mg/cm}^2 &= 0,41 \text{ mg/cm}^2 \\ \varphi &= \frac{856 Q(16,9) + 1021 Q(16,2) + \dots + 519 Q(10,03)}{5000 Q(20)} \end{aligned}$$

9. Proporcione la expresión literal del factor de retrodispersión (véase el Capítulo 6).

Solución: Forme la relación entre la emisión real y la emisión si no hubiera retrodispersión; por lo tanto:

$$R = \frac{\sum_{j=1}^{20} \sum_{i=1}^{20} N(i, j) Q(i)}{5000 \sum_{i=1}^{20} Q(i)}$$