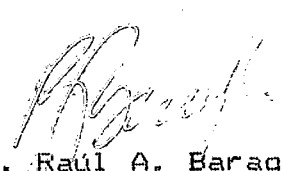


C. N. E. A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1986

01.86.03

EMISION AUGER DE SUPERFICIES SOLIDAS
POR IMPACTO IONICO

Tesis presentada ante el Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, República Argentina, para optar al título de Doctor en Física.



Dr. Raúl A. Baragiola

Director

Dr. Víctor H. Ponce

Codirector



Lic. Oscar Grizzi

Doctorando

San Carlos de Bariloche

1986

INDICE

RESUMEN	1
ABSTRACT	3
CAPITULO 1 - INTRODUCCION	5
1-1 PROCESOS DE EXCITACION DE CAPAS INTERNAS	12
a) Estructura electrónica	14
b) Promoción del $om\ 4f\sigma$	21
c) Acoplamiento rotacional $2p\sigma-2p\pi$	22
d) Intercambio de vacancias	24
1-2 DECAIMIENTOS AUGER	27
1-3 INTERACCION ATOMO-SUPERFICIE	32
REFERENCIAS	37
CAPITULO 2 - EQUIPOS Y METODO EXPERIMENTAL	41
2-1 EQUIPO DE ANALISIS DE SUPERFICIES	42
2-1-1 Descripción general	42
a) Cámara de uav y muestras	43
b) Cañón de iones AG5	44
c) Analizador de energía	45
d) Calibración de la escala de energía	47
e) Resolución del analizador	49
f) Cañón de electrones LEG61	50
2-1-2 Método experimental	52
2-2 KEVATRITO	55
a) Cámara principal y muestras	59
b) Cañón de iones	59

c) Analizador de energía y detector de electrones	60
REFERENCIAS	62
CAPITULO 3 - SIMULACION POR MONTE CARLO	65
REFERENCIAS	70
CAPITULO 4 - EXCITACIONES DE CAPAS INTERNAS	71
4-1 CAPA K	71
4-1-1 Resultados experimentales	73
4-1-2 Discusión	75
a) Excitación de la capa K del Be a energías menores que 10 keV	75
b) Excitación de la capa K del Be a energías mayores que 10 keV	81
c) Simulación por Monte Carlo	83
4-1-3 Conclusiones	92
4-2 CAPA L	93
4-2-1 Resultados experimentales	95
4-2-2 Discusión	99
a) Simulación por Monte Carlo	103
4-2-3 Conclusiones	111
REFERENCIAS	113
CAPITULO 5 - IDENTIFICACION DE ESTRUCTURAS AUGER	116
5-1 IDENTIFICACION DEL PICO AUGER DEL SODIO	117
5-2 IDENTIFICACION DEL PICO ATOMICO DEL BERILIO	121
5-3 IDENTIFICACION DE UN PICO ATOMICO EN EL ESPECTRO AUGER DEL SILICIO	125
REFERENCIAS	128

CAPITULO 6 - FORMA DE LAS ESTRUCTURAS AUGER	132
6-1 DEPENDENCIA DE LA FORMA DE LOS PICOS ATOMICOS CON LA ENERGIA DEL PROYECTIL	135
6-1-1 Resultados experimentales	137
6-1-2 Discusión	137
a) Efecto Doppler	137
b) Interacción del átomo excitado con la superfi- cie	142
c) Comparación con los experimentos	149
6-1-3 Conclusiones	155
6-2 DEPENDENCIA DE LA FORMA DE LOS PICOS ATOMICOS CON LOS ANGULOS DE INCIDENCIA Y DE OBSERVACION	156
6-2-1 Resultados experimentales	158
6-2-2 Discusión	163
6-2-3 Conclusiones	169
REFERENCIAS	170
CONCLUSIONES GENERALES	172
APENDICE	176

RESUMEN

Hemos estudiado la emisión de electrones Auger de blancos sólidos de Be, Na, Mg, Al, y Si, inducida por bombardeo de iones de gases nobles en el rango de energías de 0.5 a 20 keV. Los espectros de energía de electrones presentan una estructura ancha, debida a decaimientos Auger dentro del sólido, y estructuras angostas provenientes de transiciones Auger en átomos excitados que escaparon del sólido. A partir de la confrontación de los espectros Auger de blancos sólidos con los obtenidos previamente para blancos gaseosos y del análisis de las posibles transiciones electrónicas entre el átomo eyectado y la superficie, identificamos las estructuras angostas en los espectros Auger de Na y Be.

Para discutir los resultados experimentales hemos adaptado un programa de Monte Carlo con el cual se simula la cascada de colisiones en el sólido, los eventos de excitación de capas internas y los decaimientos Auger. Mediante la comparación de las intensidades Auger experimentales con las calculadas por la simulación determinamos las contribuciones relativas de las colisiones simétricas (entre átomos del blanco) y las asimétricas (entre el proyectil y los átomos del blanco) en la excitación de capas K y L de blancos de Be y Al, respectivamente. Hemos utilizado la simulación para analizar resultados previos de emisión de rayos X de la capa K del Berilio, medidos con proyectiles de energías más altas que las usadas en nuestros experimentos. De este análisis se obtuvo información sobre las variaciones del factor de fluorescencia y los números de ocupación de capas

externas del Be con la energía del proyectil.

El estudio de la forma de las estructuras Auger angostas y su dependencia con la energía y ángulo de incidencia del proyectil, nos ha dado información sobre los procesos de colisión, la vida media de las vacancias internas y el decaimiento Auger. Mediante el cálculo de las distribuciones en ángulo y energía de los átomos excitados eyectados del sólido y la interacción entre éstos y la superficie metálica, obtuvimos las distribuciones de corrimientos de energía en las energías Auger. A partir de la comparación de estas distribuciones con los picos Auger angostos experimentales determinamos las principales causas del ensanchamiento de estos picos.

ABSTRACT

We have studied the Auger electron emission from solid Be, Na, Mg, Al, and Si targets bombarded with 0.5-20 keV noble gas ions. The electron energy spectra show a broad structure, resulting from Auger transitions in the bulk of the solid, and sharp structures coming from Auger transitions in excited sputtered atoms. From the comparison of solid and gas phase Auger electron spectra, and the analysis of the possible electronic transitions between the excited sputtered atom and the solid surface, we have identified the sharp structures of the Auger electron spectra of Na and Be.

We have adapted a Monte Carlo program to simulate the collision cascade in the solid, inner-shell excitations and Auger decays. From the comparison of experimental and simulated Auger intensities we have evaluated the relative role of symmetric and asymmetric collisions in Be K- and Al L-shell excitation. In the case of Beryllium we have extended the discussion of the exciting processes to higher projectile energies. To this end, we have applied the simulation to early measurements of Be K X-ray yields. From this analysis we have obtained information about the variations of the fluorescence yield and outer-shell occupation numbers of Be with projectile energy.

The study of the shape of the sharp Auger structures and their dependence with the energy and incidence projectile angle give us information about the collisional processes, inner-hole

lifetimes, and Auger decays. From the evaluation of the energy and angular distribution of the excited sputtered atoms and the interaction between them and the solid-surface, we have obtained the energy shift distributions in the Auger energies. From the comparison of these distributions with the experimental atomic peaks we have determined the main causes of the broadening of these peaks.

CAPITULO 1 - INTRODUCCION

El bombardeo de un sólido con iones pesados a energías del orden de los keV produce la emisión de varios tipos de partículas: átomos neutros, iones, electrones, fotones y moléculas. El análisis de las distribuciones en energía y ángulo de las partículas emitidas da origen a varias técnicas, con las cuales se estudian propiedades de la superficie del sólido y de zonas cercanas a ella. Por ejemplo, la distribución espacial de los átomos que constituyen la superficie se puede estudiar a partir de las distribuciones en ángulo y energía de los proyectiles retrodispersados por el sólido. Por otro lado, las distribuciones de los electrones emitidos dan información sobre la estructura electrónica del sólido y de los procesos de colisión. El enorme desarrollo que han tenido las técnicas de análisis de superficies en los últimos años se debe en gran parte al avance de la tecnología de ultra alto vacío, que permite realizar experimentos con superficies reproducibles y libres de contaminantes.

En este trabajo estudiaremos algunos aspectos de la emisión electrónica de metales livianos inducida por bombardeo de iones pesados. En la fig.1-1 se muestra una distribución de electrones típica, obtenida por bombardeo de un blanco sólido de Al con iones de Ne a 2 keV. Son varios los procesos que contribuyen a la emisión de estos electrones. En primer lugar, cuando el ión se acerca a la superficie puede producirse la emisión de electrones a costa de la energía potencial del ión incidente. Este mecanismo de emisión de electrones es el más importante a energías de los

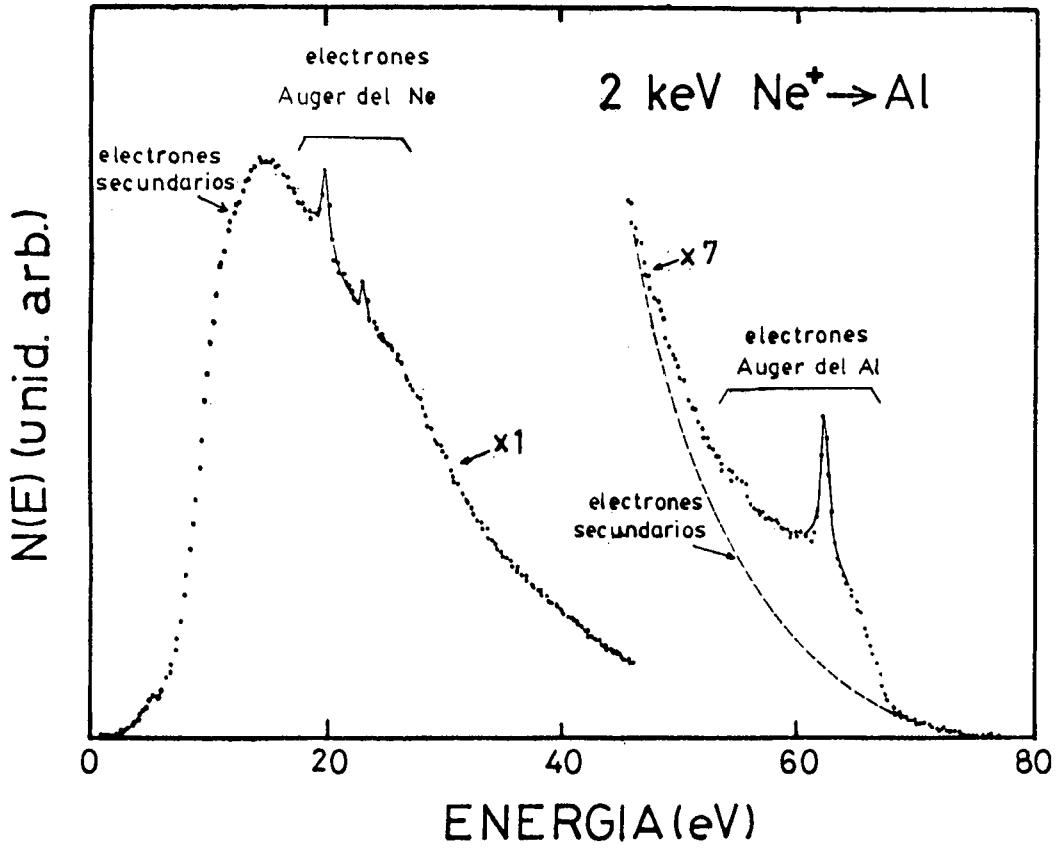


Fig.1-1: Distribución de energía de electrones emitidos durante el bombardeo de una muestra de Al con iones de Ne a 2 keV. El espectro fue adquirido con el equipo de análisis de superficies, con una resolución en energía de 0.5%.

proyectiles bajas, del orden de las decenas o algunas centenas de eV, para iones de gases nobles. Veremos en la sección 1-3 que los electrones eyectados mediante este proceso poseen energías de unos pocos eV. En la fig.1-1 podrían contribuir con una pequeña fracción al pico principal, observado a ~14 eV.

A medida que aumenta la energía de los proyectiles se habilitan otros canales de emisión electrónica, que ocurren a costa de la energía cinética del proyectil. Una vez que el proyectil penetra en el sólido choca con los átomos del blanco y como consecuencia de estas colisiones se degrada su energía y puede quedar implantado o ser eyectado del sólido. Si la distancia de acercamiento entre los núcleos en la colisión proyectil-átomo blanco (colisión p-b) es suficientemente chica, puede producirse la excitación de alguna capa electrónica interna del átomo blanco o del proyectil. Luego de un cierto tiempo, típicamente entre $\sim 10^{-13}$ y 10^{-15} seg, estas excitaciones decaen y la energía liberada puede ser emitida en forma de radiación (rayos-X) o transferida a otro electrón, el cual puede resultar eyectado del sólido (efecto Auger). Tanto los rayos-X como los electrones Auger emitidos en estos procesos tienen energías características de los niveles de energía de los átomos excitados y pueden ser utilizados entonces para la identificación de dichos átomos. En el espectro de la fig.1-1 aparecen los picos de electrones Auger provenientes de la desexcitación del blanco, Al, y del proyectil, Ne.

En las colisiones p-b el átomo blanco puede adquirir energía suficiente como para desplazarse de su posición en la red e iniciar una serie de colisiones contra otros átomos del blanco,

generándose así una "cascada de colisiones". En estas colisiones entre átomos del blanco (colisiones b-b) también pueden producirse excitaciones de capas electrónicas internas que den lugar a la emisión de electrones Auger.

Los proyectiles y átomos del blanco excitados poseen energías cinéticas grandes comparadas con la energía de cohesión del sólido y la vida media de las excitaciones también es grande, comparada con el tiempo característico de la colisión. Ambos efectos hacen que los decaimientos ocurran relativamente lejos del lugar donde se produjo la excitación, inclusive algunos átomos pueden escapar del sólido conservando su estado de excitación y decaer luego en el vacío. Según veremos en la sección 1-2, si en las transiciones Auger dentro del sólido intervienen dos electrones de la banda de valencia, entonces los picos Auger resultantes tienen un ancho aproximadamente igual a dos veces el ancho de la banda (medido en la base del pico). Mientras que en los decaimientos que ocurren fuera del sólido intervienen electrones de niveles angostos (atómicos) y los picos resultan mucho más angostos que los correspondientes a decaimientos en el interior del sólido. El pico Auger del Al observado en la fig.1-1 contiene ambas contribuciones: picos angostos debidos a decaimientos en el vacío, superpuestos a un pico más ancho proveniente de decaimientos en el interior del sólido.

Los electrones Auger generados dentro del sólido interactúan con los átomos de la red, perdiendo poca energía en excitación de fonones, y con los otros electrones del sólido, perdiendo cantidades apreciables de energía en la creación de pares electrón-

hueco o produciendo oscilaciones colectivas de los electrones de valencia (plasmones). Estas interacciones inelásticas determinan el frenamiento y la profundidad de escape de los electrones Auger en metales. Para electrones con energías menores o del orden que 1 keV la profundidad de escape en diferentes metales varía entre ~ 5 y 20 \AA .¹⁻¹⁻²

Como consecuencia de las pequeñas profundidades de escape, sólo los electrones Auger generados cerca de la superficie del sólido podrán escapar conservando su energía característica. Los generados a profundidades mayores difícilmente lleguen a la superficie, y si llegan, estarán degradados en energía, pasando a constituir la cola que se observa hacia bajas energías en el pico Auger (fig.1-1).

Algunos de los electrones secundarios, excitados durante el transporte de los electrones Auger o directamente por los átomos en movimiento, consiguen escapar del sólido y constituyen el fondo de electrones secundarios. Puede verse en la fig.1-1 que este fondo de electrones es asimétrico, posee su máximo a energías bajas (unos pocos eV) y sobre su cola de alta energía aparecen los picos Auger. Todas las contribuciones mencionadas pueden observarse en el espectro de la fig.1-1.

La interpretación de los espectros de electrones Auger y de los mecanismos para producir las vacancias internas en colisiones ión-sólido ha dado lugar a una gran cantidad de publicaciones. En la mayoría de éstas, los resultados obtenidos han sido discutidos en base a comparaciones con espectros inducidos por bombardeo con electrones o con modelos aplicables especialmente a espectros

Auger de blancos gaseosos. Ambas comparaciones son incompletas porque en el bombardeo con electrones, además de ser diferente el mecanismo de excitación, los átomos decaen en el mismo sitio en el cual se produce la excitación, mientras que en el caso de bombardeo con iones pesados algunos átomos decaen fuera del sólido, modificándose apreciablemente la forma de los espectros. De la misma manera, antes de utilizar los modelos de secciones eficaces de excitación, que se aplican directamente en colisiones con blancos gaseosos, se debe considerar el frenamiento de los proyectiles dentro del sólido y la posibilidad que las excitaciones se produzcan no sólo en las colisiones p-b, sino también en la cascada de colisiones. Existe actualmente una cierta tendencia¹⁻³⁻⁵ a discutir los procesos de excitación y decaimiento desde un punto de vista más cuantitativo, basado en cálculos de Monte Carlo para describir las trayectorias de los proyectiles y los modelos de excitación.

En esta tesis se presentan nuevos resultados experimentales de emisión de electrones Auger de blancos sólidos de Be, Na, Mg, Al, y Si, inducida por bombardeo con iones de gases nobles en el rango de energías de 0.5 a 20 keV. Para discutir estos resultados hemos adaptado un programa de Monte Carlo que simula las trayectorias de los átomos dentro del sólido, los eventos de excitación y los decaimientos Auger. Los objetivos principales del trabajo han sido: 1) Determinar las contribuciones relativas de las colisiones p-b y b-b y los posibles mecanismos de excitación de capas K y L de blancos de Be, Mg y Al, 2) identificar las estructuras atómicas en los espectros Auger del Na, Be y Si, y 3)

obtener un modelo que describa cuantitativamente los principales fenómenos que determinan la forma de las estructuras Auger atómicas y la dependencia de ésta con la energía de los proyectiles.

El trabajo está organizado de la siguiente manera: En las secciones siguientes de este capítulo se introducen los conceptos básicos sobre los mecanismos de excitación, los decaimientos Auger y las interacciones de los átomos eyectados con la superficie metálica. En el capítulo 2 se presentan los equipos experimentales utilizados y el método de medición. En el 3 se describe el programa de Monte Carlo. En el 4 se presentan resultados y discusiones sobre los mecanismos de excitación de capas electrónicas internas para varias combinaciones de proyectiles y blancos. En el capítulo 5 se identifican las componentes de algunas estructuras Auger y finalmente en el 6 se discute la dependencia de la forma de las estructuras Auger con la energía y el ángulo de incidencia de los proyectiles, y con el ángulo de observación de los electrones emitidos.

1-1 PROCESOS DE EXCITACION DE CAPAS INTERNAS

En esta sección introduciremos los conceptos básicos de los modelos que utilizaremos en el capítulo 4 para estimar las probabilidades de excitación de capas electrónicas internas, en colisiones ión-sólido. El lector encontrará una descripción más completa en alguna de las numerosas revisiones que existen sobre el tema.^{1.4-12}

Para que se produzca la excitación de una capa electrónica interna se necesita una colisión violenta, en la cual la distancia de acercamiento entre los dos átomos debe ser menor que una dada distancia crítica, generalmente pequeña. Por este motivo las colisiones de excitación dentro del sólido se pueden considerar como colisiones entre dos átomos y se pueden descartar las colisiones donde el proyectil interactúa con más de un átomo a la vez, ya que es muy improbable que éstas últimas sean violentas.

Las colisiones atómicas que pueden producir excitaciones de capas internas se clasifican^{1.7} de acuerdo a tres regímenes diferentes: atómico, intermedio y molecular. En el régimen atómico los electrones de las capas internas son débilmente perturbados durante la colisión. Ejemplos representativos de este régimen son las colisiones de protones y partículas α sobre blancos pesados, a velocidades de los proyectiles (V_p) mayores que las velocidades medias de los electrones de las capas internas (V_e). El mecanismo de excitación en estos casos es la interacción Coulombiana entre el proyectil y los electrones del blanco; para describirlo se utilizan modelos perturbativos. Estos pueden ser cuánticos (Aproximación de Born^{1.7.1.13}), clásicos (encuentro binario^{1.4-7}) y

semiclásicos (método del parámetro de impacto^{1-7,1-13}). A medida que disminuye la velocidad del proyectil, el tiempo durante el cual interactúan las partículas aumenta y la perturbación de los electrones es mayor. Los modelos se vuelven más complicados porque se deben incluir factores que consideren el cambio de la velocidad del proyectil debido a la repulsión internuclear y el aumento en la energía de ligadura de los electrones durante la colisión.¹⁻¹⁴⁻¹⁶ En este rango de energías (rango intermedio) los métodos perturbativos comienzan a fallar.

El régimen molecular corresponde a proyectiles con velocidades mucho menores que v_e . Aquí la perturbación en las energías de ligadura es grande y los métodos mencionados arriba no son aplicables. El movimiento lento de los proyectiles permite que los electrones se adapten al cambio de posición de los núcleos, formándose una molécula de distancia internuclear variable en el tiempo. Este ajuste casi adiabático de los electrones hace que, durante la colisión, el comportamiento de los electrones pueda ser descrito por la aproximación de Born-Oppenheimer. Las transiciones entre estados son muy improbables salvo entre aquellos que poseen energías muy próximas, es decir, transiciones resonantes o casi resonantes. Este efecto selectivo de las colisiones a bajas energías simplifica los cálculos de las probabilidades de excitación, porque sólo se deben considerar unos pocos acoplamientos entre estados. A medida que aumenta la velocidad del proyectil los cálculos resultan más complicados porque se deben incluir más canales de excitación, hasta que a velocidades muy grandes el tiempo de interacción es muy corto y nuevamente son

aplicables los métodos perturbativos. El rango de energías donde deberían empalmar ambas teorías, régimen intermedio, ha sido poco estudiado aún.

Todos los procesos de excitación que discutiremos en este trabajo están dentro del régimen molecular. Para determinar en cada sistema colisionante cuáles son los posibles mecanismos de excitación, se necesita un cierto conocimiento de la estructura electrónica de la molécula formada durante la colisión.

a) Estructura electrónica:

La relajación adiabática de los electrones en colisiones lentas no implica que los procesos inelásticos sean imposibles, por el contrario, suele ocurrir que dos niveles, muy separados en energía a distancias internucleares grandes, se vuelvan casi degenerados a determinadas distancias internucleares, dando así las condiciones resonantes necesarias para que se produzca la excitación. La determinación de los niveles de energía de la molécula como función de la distancia internuclear, resulta entonces crucial para la interpretación de los fenómenos de excitación y es el punto de partida para cualquier cálculo explícito.

El campo Coulombiano nuclear que actúa sobre los electrones de capas internas es mucho más fuerte que los campos creados por los otros electrones. Debido a este efecto y a que la separación entre las energías de ligadura de las subcapas internas es grande, estos electrones se comportan en forma casi independiente del resto de los electrones, los cuales pueden ser considerados como simples espectadores y cuyo único efecto es apantallar el

campo de los núcleos. Esto permite expresar los estados de la molécula en términos de orbitales moleculares de un único electrón (σ). Las energías de los σ han sido calculadas bajo diferentes aproximaciones. Los métodos no relativistas más usados son: 1) Aproximación hidrogénica, 2) método de Hartree-Fock y 3) método de apantallamiento variable.

En la aproximación hidrogénica, el problema se reduce a calcular, para cada valor de la distancia internuclear R , los estados de un único electrón en el campo de los dos núcleos. En la fig.1-2 se muestra un diagrama semicuantitativo de energías, presentado por Fano y Lichten¹⁻¹⁷ para explicar los procesos de excitación en colisiones Ar-Ar.

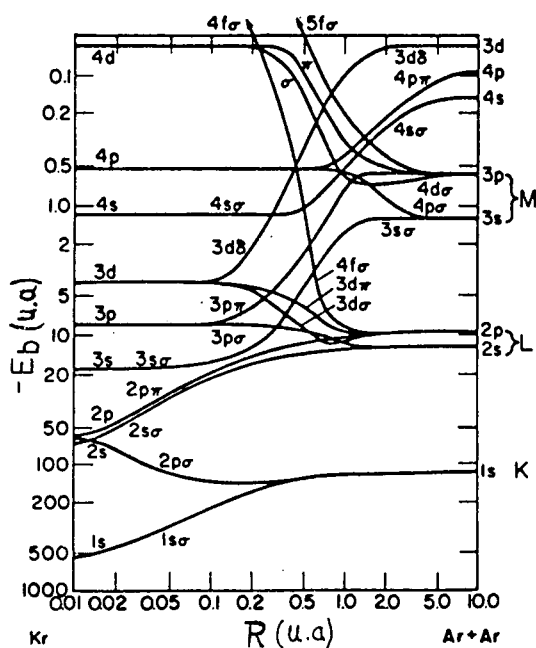


Fig.1.2: Diagrama de energías para el sistema Ar-Ar en función de la distancia internuclear, estimado en el marco de la aproximación hidrogénica (de Fano y Lichten, Ref. 1.17)

Se ve en la fig.1-2 que el rango internuclear se puede dividir en tres regiones. Cuando la distancia internuclear es grande ($R > 5$ u.a.), la interacción entre los átomos es apenas apreciable y los estados electrónicos, y las correspondientes energías de ligadura, son simplemente las del límite de átomos infinitamente separados (AS). Para R menores, las nubes electrónicas comienzan a solaparse y se forman nuevos estados electrónicos (los om) como combinaciones lineales de las funciones de onda atómicas. Para R pequeños comparados con los radios medios de las capas atómicas, nuevamente aparece un comportamiento atómico y los estados electrónicos tienden a los del límite de átomos unidos (AU). En el caso de la colisión Ar-Ar, para $R \rightarrow 0$, los estados electrónicos tienden a los correspondientes del Kr. La nomenclatura de los om está definida por los orbitales atómicos (oa) a los cuales tienden los om en el límite de AU y por la proyección del impulso angular en la dirección del eje internuclear λ , (para $\lambda = 0, 1, 2$ corresponden estados σ, π, δ).

Una consecuencia de la formación de om durante la colisión, es el fenómeno de promoción de electrones, mediante el cual se pueden producir excitaciones electrónicas en colisiones a bajas energías. Este fenómeno consiste en el aumento del número cuántico principal de algunos electrones, al pasar del límite de AS al de AU. En la fig.1-2 se pueden observar, como ejemplos de este proceso, la promoción de los om $2p\sigma$ y $4f\sigma$. El primero correlaciona el oa $1s$ del límite de AS con el $2p$ del AU y el om $4f\sigma$ correlaciona los oa $2p$ con el $4f$. Veamos como se explica la producción de vacancias en el oa $2p$ de uno de los átomos de Ar por la promoción del om $4f\sigma$. Dos de los electrones $2p$ de los

átomos de Ar evolucionan con R según el $4f\sigma$. A distancias de ~ 0.5 u.a. este $4f\sigma$ se vuelve degenerado (se cruza) con otros $4f$, algunos de los cuales están despoblados (en el estado fundamental los $3d$, $4s$ y $4p$ del Ar están despoblados). Si la colisión es suficientemente violenta como para que se alcancen esas distancias internucleares, existirá una cierta probabilidad que, en el momento del cruce, uno o los dos electrones del $4f\sigma$ queden en alguno de los $4f$ desocupados, dejando excitado al Ar cuando los núcleos se separan.

Después de la presentación del modelo de Fano-Lichten para explicar los procesos de excitación en colisiones simétricas, se dedicó un gran esfuerzo a la construcción de los diagramas de energías para diferentes sistemas colisionantes y a establecer las reglas para correlacionar los niveles de AS con los de AU. En el trabajo de Barat-Lichten^{1, 10} se estableció que para correlacionar los $4f$ se debe empezar por el $4f$ más ligado en el límite de AS y correlacionarlo con el más ligado del límite de AU, que posea el mismo número de nodos radiales, es decir el mismo valor de $n-l-1$, siendo n el número cuántico principal y l el impulso angular. Luego se sigue este procedimiento en orden decreciente de energías de ligadura. El principio de exclusión de Pauli, responsable del efecto de promoción, determina el número de ocupación de los $4f$. Un $4f\sigma$ puede contener hasta un máximo de dos electrones, un $4f\pi$ hasta cuatro electrones. Las reglas mencionadas funcionan bien para correlacionar $4f$ internos, en cambio, se deben aplicar con cuidado para los $4f$ externos porque allí los efectos de correlación entre electrones pueden ser

importantes y empieza a fallar el modelo de electrón independiente. En la fig.1-3 se muestra un diagrama de correlaciones para el sistema Ne-O, construido siguiendo las reglas de Barat-Lichten.

Un modelo más elaborado que la aproximación hidrogénica y que considera átomos multieletrónicos, consiste en calcular las energías de ligadura, para cada valor de R, por el método de Hartree-Fock¹⁻¹⁹⁻²² (H-F). Aquí no se tienen en cuenta aspectos dinámicos debidos al movimiento de los núcleos, se los considera "congelados". Otro método para calcular los diagramas de energías es el de apantallamiento variable,¹⁻²³ el cual produce resultados similares a los de H-F utilizando menos tiempo de computación. No haremos aquí la descripción de los cálculos, para ello referimos al lector a los trabajos originales.

En la fig.1-4 se muestra el diagrama de energías para la molécula Ne-O, obtenido por el método de H-F. A diferencia de lo que se observa en la fig.1-3, el $1s$ del O (AS) se correlaciona con el $2s$ del Ar (AU) y el $2p$ del Ne se correlaciona con el $3p$ del Ar. Este cambio en las correlaciones se debe a que para sistemas multieletrónicos en la aproximación perfectamente adiabática (núcleos congelados), los om de la misma simetría (igual valor de λ) no pueden cruzarse.¹⁻¹¹⁻¹⁻²⁴ Mientras que debido a la simetría específica¹⁻¹¹ del potencial Coulombiano de dos centros, los om hidrogénicos de la misma simetría sí pueden cruzarse. Para distinguir a los om adiabáticos de los hidrogénicos se utiliza otra nomenclatura, se los clasifica por su simetría y se los enumera empezando por los más ligados.

Debido al movimiento de los núcleos se producen acoplamientos fuertes en la zona de R donde las energías de los om cambia

bruscamente y se aproximan a las de otros om (2σ y 3σ alrededor de 0.05 u.a.). Estos acoplamientos hacen que, desde un punto de vista cualitativo, el comportamiento de los electrones se asemeje más al descrito por los om hidrogénicos (el electrón "prefiere" pasar al otro om siguiendo las reglas de correlación de los om hidrogénicos). Por tal motivo, para describir los procesos de excitación se utilizan, a veces, combinaciones de om adiabáticos, que posean las mismas correlaciones que los om hidrogénicos.¹⁻⁹ Estos nuevos om se denominan *diabáticos* y la nomenclatura es la misma que la usada para los hidrogénicos. En la fig.1-5 se muestran los om diabáticos para la colisión Ne-O, obtenidos de los correspondientes adiabáticos (fig.1-4).

En la fig.1-5 se han indicado los acoplamientos que pueden producir excitaciones de la capa K de alguno de los átomos colisionantes. A distancias de acercamiento pequeñas se produce una condición resonante entre los om $2p\sigma$ y $2p\pi$ (proceso A). Si existe inicialmente una vacancia en el $2p\pi$, el proceso A, denominado acoplamiento rotacional, representa un mecanismo efectivo para transferirla al $2p\sigma$ y dejar al átomo de O excitado después de la colisión. Por otro lado, el movimiento radial de los núcleos puede hacer que el acoplamiento entre los om $1s\sigma$ y $2p\sigma$ sea importante a $R \sim 0.5$ u.a. (acoplamientos por intercambio de vacancias K-K).

En las discusiones de los próximos capítulos se estimarán las probabilidades de excitación por promoción del om $4f\sigma$ y cruce de niveles, por acoplamientos rotacionales $2p\sigma$ - $2p\pi$, y por intercambio de vacancias. Describiremos entonces brevemente los mode-

los utilizados en los cálculos.

b) Promoción del $om\ 4f\sigma$:

En colisiones a bajas energías, los modelos teóricos que describen los mecanismos de creación de vacancias internas tratan el movimiento de los núcleos en forma clásica.¹⁻⁷⁻¹² Esto permite expresar la probabilidad de excitación (P) en función del parámetro de impacto (b) y de la velocidad del proyectil (V_p). La sección eficaz total de excitación se calcula integrando $P(b, V_p)$ sobre todos los valores de b: $\sigma = 2\pi \int P(b, V_p) b\ db$.

Para estimar las vacancias producidas por cruce de niveles durante la promoción del $om\ 4f\sigma$ utilizamos el modelo empírico de Kessel,¹⁻⁶ en el cual P está dado por una función escalón y es independiente de V_p :

$$P(b) = p \quad \text{si } b < b_x$$

$$P(b) = 0 \quad \text{si } b > b_x$$

siendo p una constante menor o igual que 1 y b_x el parámetro de impacto con el cual se alcanza justo la distancia de acercamiento entre los núcleos (R_x), necesaria para producir el cruce de niveles. La sección eficaz resulta:

$$\sigma(E) = \pi R_x^2 P(1 - V(R_x)/E),$$

donde E es la energía en el sistema centro de masa y V la energía potencial.

c) Acoplamiento rotacional $2p\sigma-2p\pi$:

El acoplamiento rotacional entre los $2p\sigma$ y $2p\pi$ está inducido por la rotación no adiabática de los núcleos, a distancias internucleares menores que el radio de la capa K. En esta región de R existen expresiones analíticas para la separación de energía entre los $2p\sigma$ y las trayectorias nucleares están bien descritas por potenciales Coulombianos apantallados. Utilizando esto, Taulbjerg y col.¹⁻²⁵ extendieron un modelo previo,¹⁻²⁶ realizado para sistemas homonucleares, a sistemas heteronucleares y mostraron que $P(b\zeta, Vp/W)$ y $\zeta^2\sigma(Vp/W)$ deben ser funciones universales de los argumentos, con parámetros de transformación de unidades ζ y W dados por:

$$W^2 = (Z_1-1)(Z_2-1)((Z_1+Z_2-2)/2)^2(Z_1Z_2/A)^2$$

$$\zeta^2 = (Z_1-1)^2(Z_2-1)^2((Z_1+Z_2-2)/2)^2/(Z_1Z_2/A),$$

siendo Z_1 y Z_2 los números atómicos del proyectil y blanco, respectivamente y A la masa reducida de los núcleos. Los resultados de esta ley de escalamiento concuerdan dentro del ~10 % con otros cálculos *ab initio*, efectuados para sistemas particulares, y están en buen acuerdo también con resultados experimentales¹⁻¹¹.

Los resultados de la probabilidad de excitación P y la sección eficaz de acoplamiento rotacional σ_{rot} están tabulados en el trabajo original¹⁻²⁵ y se muestran en las figs. 1-6 y 1-7.

σ_{rot} da la sección eficaz de producción de vacancias en el $2p\sigma$ normalizada a una vacancia en el $2p\pi$, de manera que para confrontar la teoría con resultados experimentales habrá que

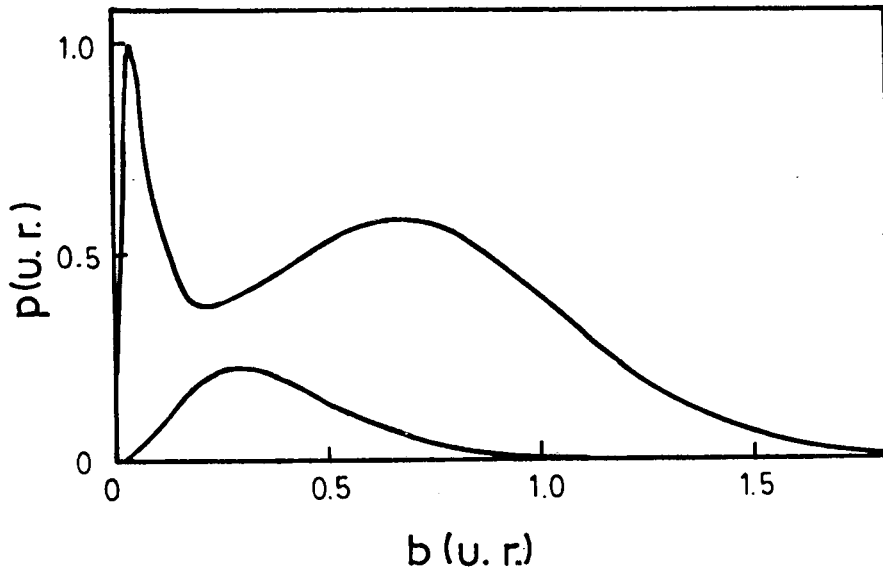


Fig.1-6: Probabilidad de excitación por acoplamiento rotacional $2p\sigma-2p\pi$ en función del parámetro de impacto (b), en unidades reducidas de Taubjerg y col. (Ref. 1.25).

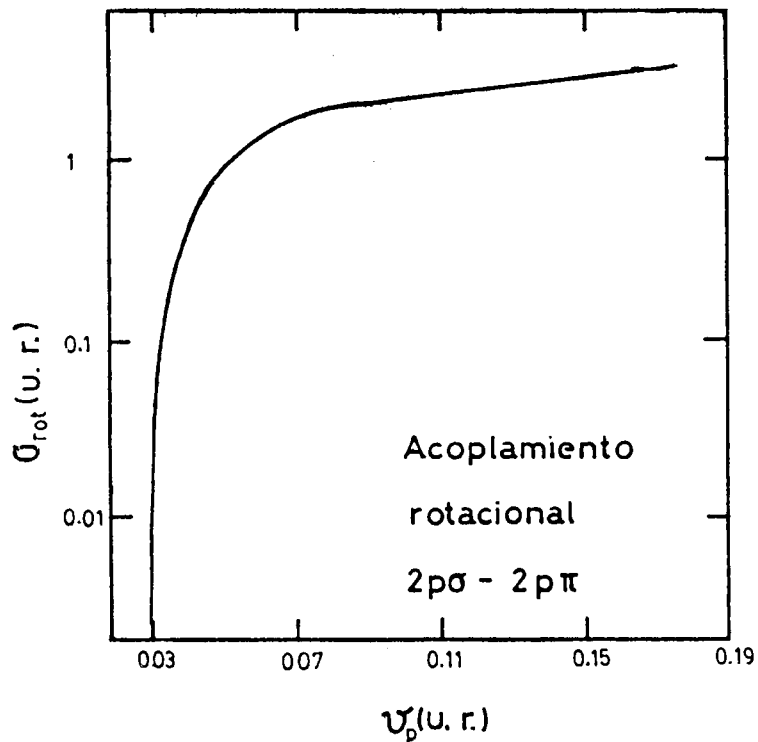


Fig.1-7: Sección eficaz de acoplamiento rotacional $2p\sigma-2p\pi$ en función de la velocidad del proyectil, en unidades reducidas de Taubjerg y col. (Ref. 1.25).

conocer el número de vacancias presentes en el $2p\pi$ (N_{π}), justo antes de la colisión de excitación. Desafortunadamente estos números no se conocen con precisión. Para determinarlos se han hecho experiencias con varios sistemas colisionantes¹⁻²⁷ y se han encontrado diferencias entre los valores medidos y los calculados, suponiendo una distribución estadística de las vacancias en los om .¹⁻²⁸ Inclusive se encontró que estas diferencias aumentan con la velocidad del proyectil.

d) Intercambio de vacancias:

Otro mecanismo importante de excitación de capas internas es el intercambio de vacancias, producido por el movimiento radial de los núcleos. En el trabajo de Stolterfoht¹⁻¹¹ se puede encontrar una amplia discusión de las diferentes aproximaciones utilizadas para describirlo. Estos acoplamientos ocurren a distancias internucleares relativamente grandes, usualmente en la zona de transición de orbitales atómicos a moleculares. Mediante este acoplamiento se transfieren vacancias desde un om a otro más ligado y de la misma simetría, sin que se produzca una condición perfectamente resonante. En la fig.1-5 se puede ver un ejemplo de este acoplamiento. La vacancia inicial del om $2p\sigma$, producida por acoplamiento rotacional a R pequeños, puede transferirse al $1s\sigma$ a $R \sim 0.5$ u.a., resultando excitada la capa K del Ne en lugar de la del O. Otros ejemplos similares son el intercambio de vacancias entre los om $2p\sigma$ y $3d\sigma$ en la colisión Ne-Be¹⁻²⁹ y entre los om $3d\sigma$ y $4f\sigma$ en la colisión Ne-Mg (fig.4-14). En el primero, el intercambio de vacancias se produce entre las capas L y K, mientras que en el segundo se produce entre las capas L de ambos

átomos.

Un esquema cualitativo de los om entre los cuales puede producirse un intercambio de vacancias se muestra en la fig.1-8.

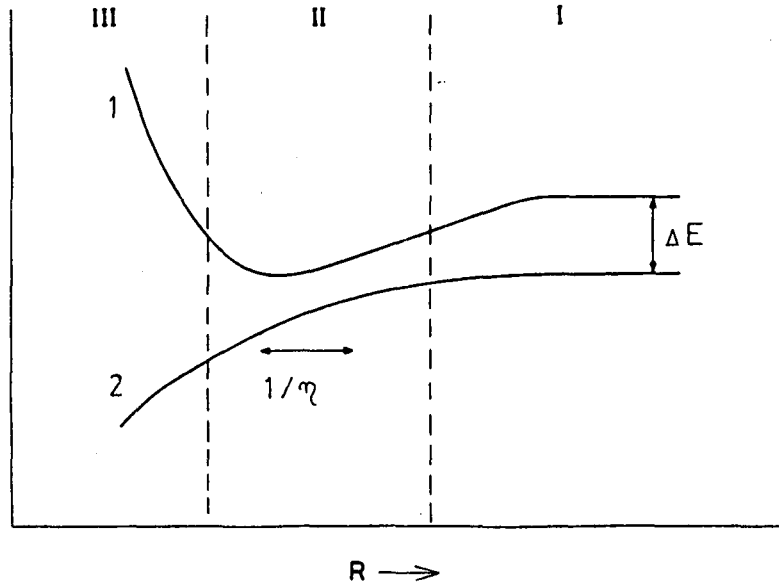


Fig.1-8: Esquema cualitativo típico para un acoplamiento por intercambio de vacancias. ΔE : separación de energía entre los orbitales atómicos en el límite de átomos infinitamente separados, $1/\eta$: rango de distancias internucleares donde puede producirse el acoplamiento.

El esquema se ha separado en tres regiones, en la región I los estados electrónicos conservan su carácter atómico y en la III ya están bien conformados los om, es en la región de transición II donde se produce el acoplamiento. Usando una base de orbitales atómicos y el hecho que el solapamiento entre los oa, a grandes valores de R, tienen una dependencia exponencial con la distancia, Nikitin¹⁻³⁰ encontró una expresión analítica para el cociente entre la probabilidad de encontrar la vacancia en el estado 2

y la probabilidad de encontrarla en el 1 (fig.1-8). Esta expresión depende de la velocidad del proyectil y de tres parámetros ΔE , η y θ en la forma

$$\frac{P_2}{P_1} = P_{12} = \frac{\exp(2\pi \Delta E \cos^2(\theta/2) / \eta V_p) - 1}{\exp(2\pi \Delta E / \eta V_p) - 1},$$

donde ΔE es la separación de energía entre los om a $R=\infty$, $1/\eta$ es el ancho de la región donde puede producirse el acoplamiento y θ un parámetro relacionado con la forma de los niveles. En algunos casos esta expresión se puede reducir a otra más simple^{1.7.1.11}

$$P_{12} = \exp(-\pi ((2 U_1)^{1/2} - (2 U_2)^{1/2}) / V_p),$$

siendo U_1 y U_2 las energías de ligadura de los niveles participantes. El problema se reduce entonces a obtener los valores correctos de U_1 y U_2 . Esto no siempre es fácil porque las energías de ligadura dependen de la cantidad de vacancias inicialmente presentes en el om 1. Este efecto de relajación dinámica de los om impone un límite de validez a la aproximación de electrón independiente y para superarlo se necesitan, a veces, cálculos de energías totales de la molécula, para las distintas configuraciones electrónicas y en función de R .^{1.11.1.31}

1-2 DECAIMIENTOS AUGER

Los átomos excitados por alguno de los procesos discutidos en la sección anterior, decaen al llenarse las vacancias internas con electrones de niveles más externos. La energía liberada puede ser emitida en forma de radiación (rayos-X) o entregada a otro electrón (efecto Auger), el cual puede resultar eyectado del sólido. Este último es el modo de decaimiento más favorable para átomos livianos, tales como los que hemos utilizado en este trabajo ($Z \ll 14$).

Para estimar las energías de los electrones Auger se pueden usar varios métodos. Uno de ellos, aplicable a átomos libres, se basa en cálculos de Hartree-Fock. Aquí la energía del electrón Auger (E_e) se obtiene por:

$$E_e(ABC) = E(A) - E(B,C),$$

donde $E(A)$ es la energía del átomo con un agujero en el nivel interno A y $E(B,C)$ es la energía del estado final con el átomo ionizado y con posible excitación adicional. Hay pocos valores de E_e calculados por este método; en general se estiman a partir de las energías de ligadura de los niveles que intervienen en la transición Auger y de la energía de interacción entre los agujeros del estado final $U(B,C)$:

$$E(ABC) = E(A) - E(B) - E(C) - U(B,C),$$

siendo $E(i)$ la energía de ligadura del nivel i .

Cuando el decaimiento Auger ocurre en el interior de un

sólido y los electrones que intervienen pertenecen a la banda de valencia, las energías Auger se pueden estimar con una expresión similar a la anterior (ver fig.1-9):

$$E(AV_1V_2) = E(A) - E(V_1) - E(V_2) - U_{ef}(V_1, V_2)$$

En este caso la energía de interacción entre los agujeros del estado final (U_{ef}) está apantallada por la relajación de los electrones de la banda. Para metales como los que hemos estudiado nosotros, Be, Mg y Al, la banda está constituida por electrones delocalizados (s y p) y U_{ef} resulta muy pequeño. En cambio, U_{ef} es importante (~ 7.7 eV) en materiales como el Cu, donde intervienen dos electrones d y los agujeros del estado final resultan más localizados.¹⁻³²

Cuando se puede desprestigiar U_{ef} , el rango de energías Auger es aproximadamente dos veces el ancho de la banda de valencia (ver fig.1-9). En estos casos los espectros Auger dan información de la densidad de estados de la banda, $N(E)$, perturbada por la presencia del agujero inicial en el carozo. En una primera aproximación, y sin considerar el transporte de los electrones dentro del sólido y otros efectos, la forma del espectro Auger se puede calcular mediante la autoconvolución de la densidad de estados. Los espectros que responden a este modelo se denominan espectros tipo banda y la intensidad Auger $I(E)$ es proporcional a:

$$I(E) \propto \begin{cases} \int_0^E N(E+\xi) N(E-\xi) d\xi, & 0 < E < E(D)/2 \\ \int_0^{E(D)-E} N(E+\xi) N(E-\xi) d\xi, & E(D)/2 < E < E(D) \end{cases}$$

Se obtiene un mejor acuerdo con los resultados experimen-

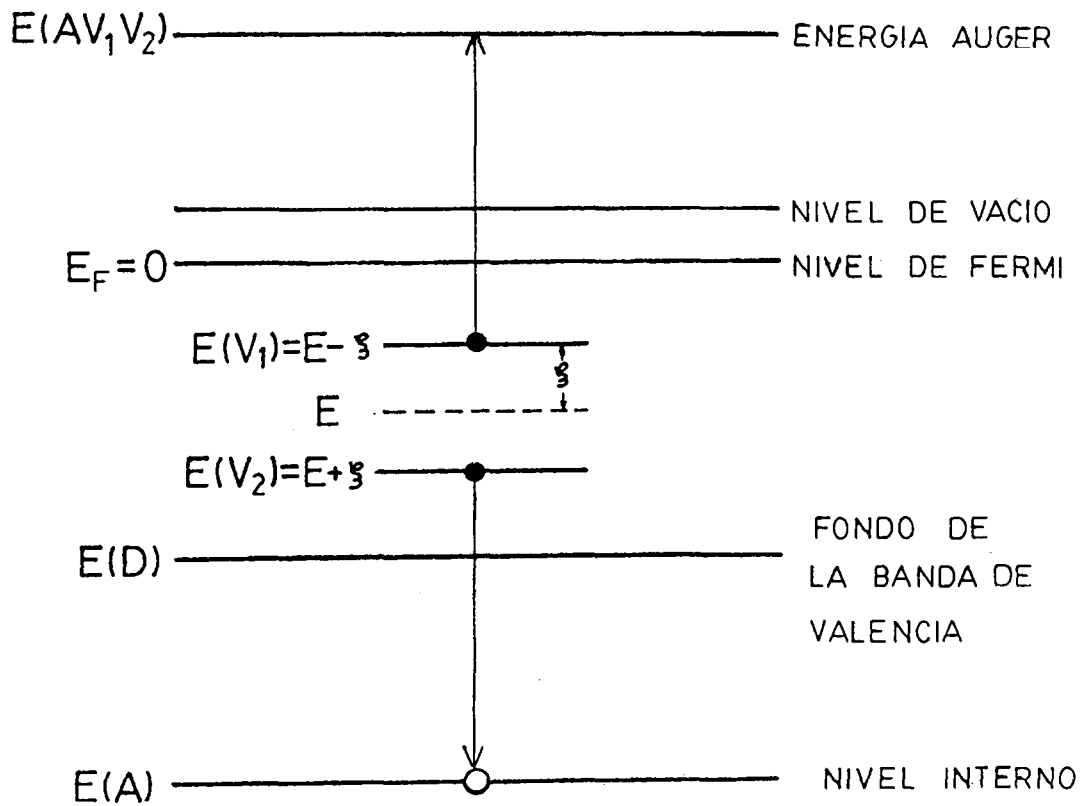


Fig.1-9: Diagrama esquemático para una transición Auger dentro del sólido.

tales cuando en el cálculo de la autoconvolución se incluye la variación de la probabilidad de la transición Auger a lo largo de la banda.¹⁻³²⁻³⁶

Los materiales que tienen U_{ef} grande comparado con el ancho de la banda,¹⁻³⁷ por ejemplo Cu, poseen espectros Auger con características atómicas, formados por varios picos angostos correspondientes a los diferentes multipletes del estado final de los dos agujeros. Una discusión de estos efectos y de la relajación de los electrones de la banda para apantallar el agujero interno inicial se puede encontrar en el trabajo de Mathew¹⁻³² y en las referencias que allí se citan.

En esta tesis discutiremos solamente espectros del tipo banda. Uno típico de este grupo es el que se muestra en la fig.1-10a y corresponde a la distribución de electrones Auger del Al, inducida por bombardeo de electrones a 4.5 keV. En la fig.1-10b se muestra también un espectro Auger del Al inducido por bombardeo con iones. Se puede observar que este último presenta picos angostos superpuestos a una estructura ancha, los cuales no aparecen en el espectro excitado por electrones. Para determinar el origen de estos picos angostos, similares a los observados en espectros tipo atómico (U_{ef} grande) se han realizado muchos trabajos.^{1-4,1-38-43} Actualmente se acepta que dichos picos provienen de transiciones Auger en átomos excitados que escapan del sólido y decaen luego en el vacío, mientras que la estructura Auger ancha es similar a la obtenida por bombardeo con electrones y proviene de los decaimientos Auger dentro del sólido.

Uno de los propósitos de este trabajo es estudiar la forma

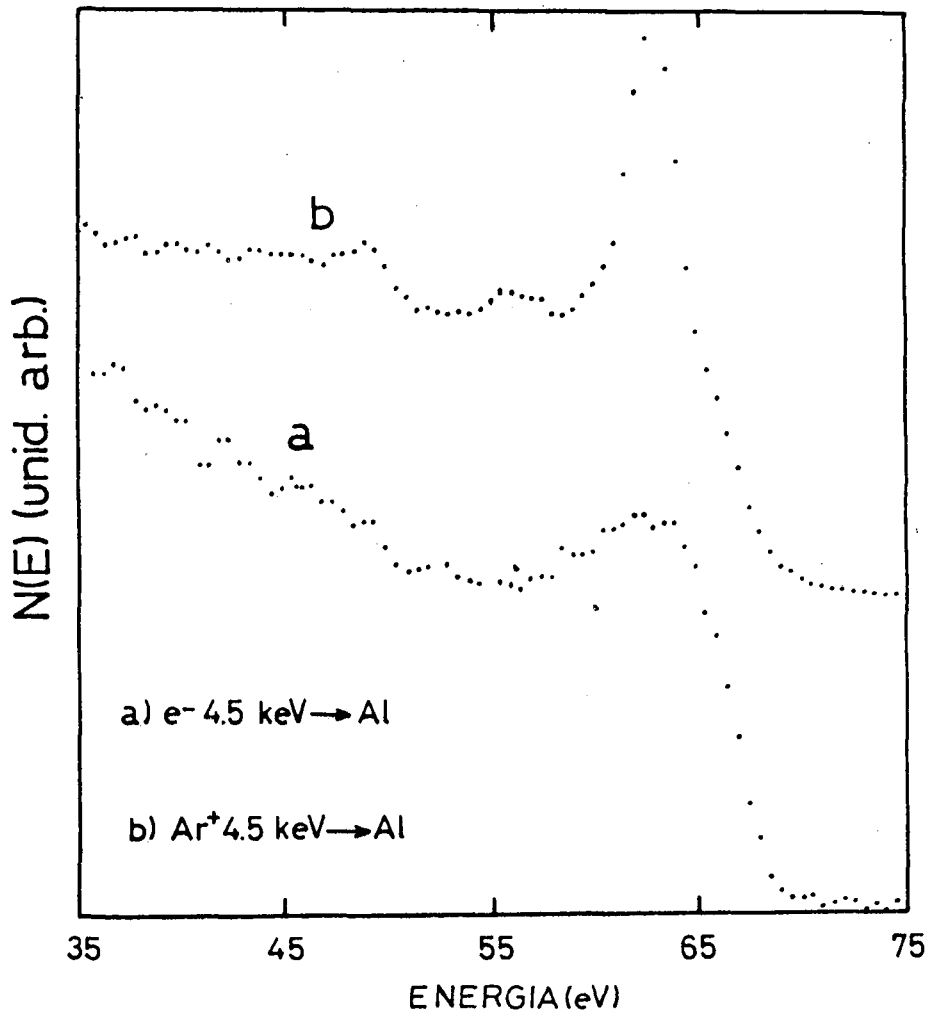


Fig.1-10: Espectros de electrones Auger del Al inducidos por bombardeo con electrones (a) e iones de Ar (b), a 4.5 keV. Ambos espectros fueron adquiridos con el equipo de superficies.

de las estructuras angostas. Mostraremos que se pueden calcular a partir de la distribuciones en energía y en ángulo de los átomos excitados emitidos por el sólido.

Las desexcitaciones que ocurren fuera del sólido se producen cerca de su superficie y por lo tanto, la energía y la población de los niveles externos del átomo eyectado están afectadas por la interacción entre éste y los electrones de la superficie. En la sección siguiente discutiremos los aspectos básicos de esta interacción.

1-3 INTERACCION ATOMO-SUPERFICIE

Consideraremos primero las transiciones electrónicas que pueden ocurrir entre una superficie sólida y un átomo excitado, o ionizado, que se acerca o se aleja lentamente de la superficie. En los diagramas de la fig.1-11 se muestran los procesos identificados hasta el presente.¹⁻⁴⁴ El proceso de *neutralización resonante*, indicado en la fig.1-11a, juega un papel importante tanto en el ión incidente (proyectil) como en los iones emitidos. En este proceso se transfiere un electrón desde un nivel ocupado de la banda de valencia del sólido a un nivel de la misma energía en el átomo. Generalmente la transferencia electrónica se produce a un nivel excitado del átomo; la neutralización resonante al estado fundamental sólo es posible cuando éste se encuentra a la misma energía de los niveles ocupados en la banda. Si la energía del agujero que queda en la banda, medida respecto del nivel de vacío, es mayor que dos veces la función trabajo del sólido, se puede producir emisión de electrones con energías de unos pocos

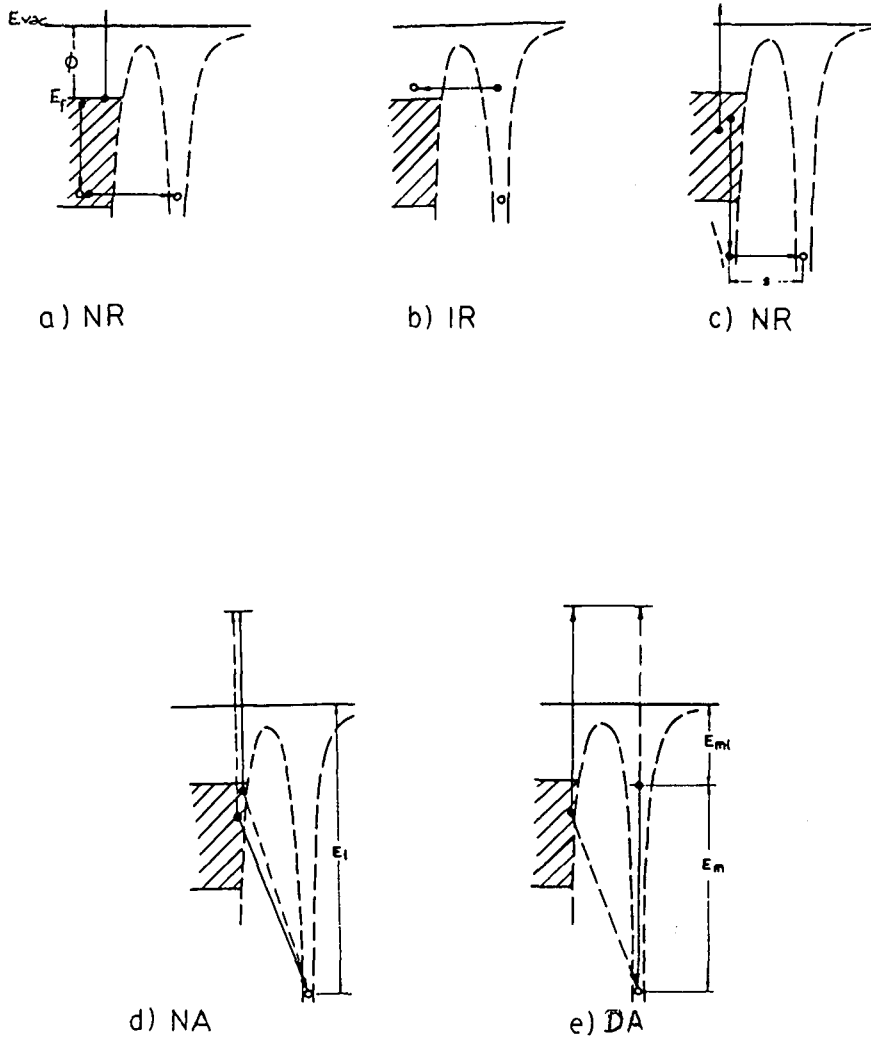


Fig.1-11: Diagrama de energía para las transiciones electrónicas entre una superficie y un átomo moviéndose lentamente cerca de ella. a) neutralización resonante (NR), b) ionización resonante (IR), c) NR desde un nivel interno, d) neutralización Auger (NA), e) desexcitación Auger (DA), E_{vac} : nivel de vacío, E_f : nivel de Fermi, ϕ función trabajo. (de Baragiola, Ref.1.44).

eV, por procesos Auger dentro de la banda.

Otro proceso que afecta la población de los niveles externos del átomo eyectado es la *ionización resonante* (fig.1-11b). Mediante este proceso se transfiere un electrón desde un nivel del átomo, a un nivel de la banda desocupado y de la misma energía. En la fig.1-11c se muestra un tercer proceso resonante, en el cual el electrón proviene de un nivel interno de un átomo de la superficie. La desexcitación de este átomo puede ocurrir mediante un proceso Auger, donde intervienen dos electrones de la banda.

Los otros procesos indicados en la fig.1-11 involucran transiciones Auger en el primer paso. En la *neutralización Auger* (fig.1-11e) intervienen dos electrones de la banda, uno de ellos neutraliza al átomo a su estado fundamental y la energía remanente se transfiere a otro electrón de la banda, el cual puede resultar eyectado. Por último un proceso que también puede producir emisión electrónica es la *desexcitación Auger*, que ocurre en átomos metaestables, fig.1-11e.

Para finalizar el capítulo 1 discutiremos como se modifican los niveles de energía de los átomos que escapan del sólido por la presencia de la superficie. Las expresiones que obtendremos aquí serán utilizadas en el capítulo 6 para estimar la forma del pico atómico principal del espectro Auger del Al.

Los niveles de energía de un átomo que se mueve cerca de un sólido se corren y se ensanchan por la interacción entre los electrones de la superficie y del átomo (fig.1-12). El corrimiento en energía se debe a la acción combinada de tres potenciales: 1) El potencial repulsivo originado por el solapamiento de la nubes electrónicas del átomo y del sólido, 2) El potencial imagen

que actúa cuando el átomo está ionizado y 3) El potencial de Van der Waals debido a la polarización del átomo.

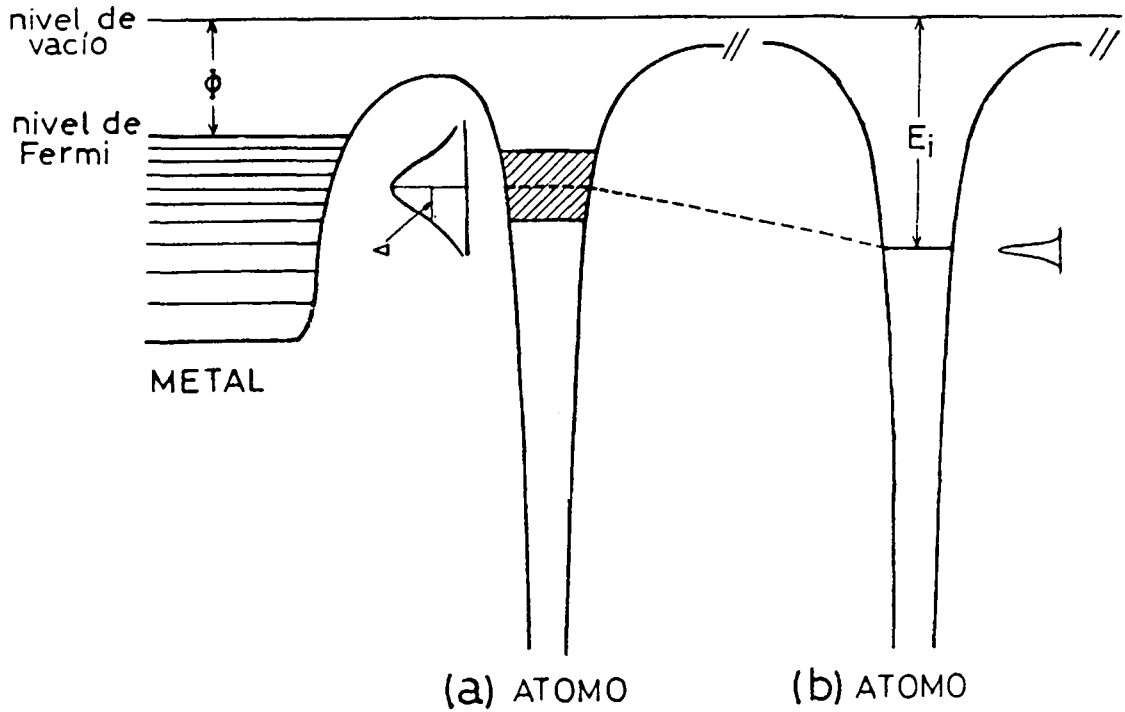


Fig.1-12: Esquema para ilustrar el corrimiento y ensanchamiento de un nivel electrónico en un átomo a) muy cerca, b) lejos de la superficie del sólido.

El potencial repulsivo tiene una dependencia aproximadamente exponencial¹⁻⁴⁵ con la distancia entre el átomo y la superficie. Comienza a ser significativo a una distancia $Sr \sim d/2 + a/2$, donde d es el diámetro medio de los orbitales más externos del átomo y a el parámetro de red del sólido.

La atracción imagen entre un metal y un ión ubicado fuera de la superficie (solapamiento pequeño o nulo entre las nubes

electrónicas del metal y del átomo) ha sido estudiada por Laing y Kohn.¹⁻⁴⁶ Usando una distribución uniforme de cargas positivas, estos autores mostraron que para una carga q ubicada una distancia S de la superficie, el potencial imagen está dado por: $V^i(S) = - q^2/4(S-S_0)$, donde S_0 es el centro de masa de la densidad de carga en la superficie del metal. Para el caso del Al el potencial imagen resulta:

$$V^i(S/A) = - 3.6 \text{ eV} / (S-0.85) \quad 1.1$$

La fuerza de atracción de van der Waals entre un átomo y un metal ha sido estudiada por Zaremba y Kohn,¹⁻⁴⁷ quienes mostraron que el potencial atractivo está dado por: $V^w(S) = - C/(S-S_1)^3$, donde C es un parámetro que depende del metal y de la polarización de átomo¹⁻⁴⁸ (α_p) y S_1 la posición de un plano de referencia de la superficie metálica. Para calcular C y S_1 usamos las siguientes expresiones.¹⁻⁴⁹

$$C = \frac{g_0 \alpha_p}{8} \frac{E_a E_s}{E_a + E_s} \quad \text{y} \quad S_1 = 1/2 \frac{E_a + 2E_s}{E_a + E_s} S_0$$

E_a es una energía característica del átomo que puede ser tomada igual a la energía de ionización, E_s es una energía característica del sólido, usualmente aproximada por la energía de un plasmón de superficie y g_0 una cantidad que depende sólo del sólido. g_0 fue evaluada ajustando valores conocidos de C . Con estas aproximaciones calculamos el potencial de van der Waals en función de la distancia a la superficie, para un átomo de Al neutro con una vacancia interna (V_{met}^w) y para un ión de Al (V_{ion}^w), que escapan del sólido (Al). Estos potenciales resultan:

$$V_{met}^W(S/A) = - 4.4 \text{ eV} / (S-0.6)^3$$

1.2

$$V_{ion}^W(S/A) = - 3.8 \text{ eV} / (S-0.5)^3$$

Los niveles de energía de un átomo moviéndose cerca de la superficie de un sólido, no solo se corren, sino también se vuelven más anchos a medida que aumenta el solapamiento de las nubes electrónicas del átomo y la superficie.¹⁻⁵⁰ Este ensanchamiento es importante muy cerca de la superficie y disminuye en forma aproximadamente exponencial con la distancia a la superficie $\Delta = \Delta_0 \exp(-\gamma S)$. Los pocos valores conocidos de los parámetros Δ_0 y γ fueron obtenidos a partir de estudios de átomos adsorbidos a superficies metálicas.¹⁻⁵¹⁻⁵²

REFERENCIAS

- 1.1 C.J. Powell, Surface Sci. 44 (1974) 29.
- 1.2 C.J. Tung, J.C. Ashley, y R.H. Ritchie, Surface Sci. 81 (1979) 427.
- 1.3 J.J. Vrakking y A. Kroes, Surface Sci. 84 (1979) 153.
- 1.4 T.D. Andreadis, J. Fine, y J.A.D. Matthew, Nucl. Instr. & Methods 209/210 (1983) 495.
- 1.5 C. Benazeth, N. Benazeth, y M. Hou, Surface Sci. Lett. 151 (1985) L137.
M. Hou, C. Benazeth, N. Benazeth, y C. Mayoral, Nucl. Instr. & Methods B13 (1986) 645.
- 1.6 J.D. García, R.J. Fortner, y T.M. Kavanagh, Rev. Mod. Phys. 45 (1973) 111.

- 1.7 W.E. Meyerhof, y K. Taulbjerg, Ann. Rev. Nucl. Sci. 27 (1977) 279.
- 1.8 Q.C. Kessel, y B. Fastrup, Case Studies in Atomic Physics 3 (1973) 137.
- 1.9 J.S. Briggs, Rep. Prog. Phys. 39 (1976) 217.
- 1.10 Q.C. Kessel, E. Pollack, y W.W. Smith, en Collision Spectroscopy, R.B. Cooks (Ed.) (Plenum, N.Y., 1978, p. 147)
- 1.11 N. Stolterfoht, SPIG-78 Inv. Lect. Prog. Rep. 93 (1978) y en Structure and Collisions of Ions and Atoms, I.A. Sellin (Ed.) (Springer, Berlin, 1978) p. 155.
- 1.12 P.H. Mokler, y F. Folkmann, Topics in Current Physics Vol.5, ed. I.A. Sellin (Springer, Heidelberg, 1978), y p. 201.
- 1.13 D.H. Madison, y E. Merzbacher, en Atomic Inner-shell Processes, Vol.1, ed. B. Crasemann (Academic Press, New York, 1975) p.1.
- 1.14 G. Basbas, W. Brandt, y R. Laubert, Phys. Rev. A7 (1973) 983.
- 1.15 W. Brandt, y G. Lapicki, Phys. Rev. A23 (1981) 1717.
- 1.16 R. Anholt, y W.E. Meyerhof, Phys. Rev. A16 (1977) 190.
- 1.17 U. Fano, y W. Lichten, Phys. Rev. Lett. 14 (1965) 627.
- 1.18 M. Barat, y W. Lichten, Phys. Rev. A6 (1972) 211.
- 1.19 F.P. Larkins, J. Phys. B5 (1972) 571.
- 1.20 J.S. Briggs, y M.R. Hayns, J. Phys. B6 (1973) 514.
- 1.21 V. Sidis, M. Barat, y D. Dhuicq, J. Phys. B8 (1975) 474.
- 1.22 K. Taulbjerg, y J.S. Briggs, J. Phys. B8 (1975) 1895.
- 1.23 J. Eichler, y U. Wille, Phys. Rev. Lett. 33 (1974) 56, Phys. Rev. A11 (1975), 1973.
- 1.24 J. Von Neumann, y E.P. Wigner, Z. Phys. 30 (1929) 467.
- 1.25 K. Taulbjerg, J.S. Briggs, y J. Vaaben, J. Phys. B9 (1976)

1351.

- 1.26 J.S. Briggs, y J.H. Macek, J. Phys. B6 (1973) 982.
- 1.27 D. Schneider, y N. Stolterfoht, Phys. Rev. A19 (1979) 55.
- 1.28 J.H. Macek, y J.S. Briggs, J. Phys. B6 (1973) 841.
- 1.29 R.D. Piacentini, y A. Salin, J. Phys. B9 (1976) 959.
- 1.30 E. Nikitin, Adv. G. Chem. 5 (1970) 135.
- 1.31 J. Østgaard Olsen, T. Andersen, M. Barat, Ch. Courbin-Gaussorgues, V. Sidis, J. Pommier, J. Agusti, N. Andersen, y A. Russek, Phys. Rev. A19, 4 (1979) 1457.
- 1.32 J.A.D. Matthew, Phys. Scripta T6 (1983) 79.
- 1.33 C.J. Powell, Phys. Rev. Lett.30 (1973) 1179.
- 1.34 P.J. Feibelman, E.J. McGuire, y K.C. Pandey, Phys. Rev. B15 (1977) 2202, B17 (1978) 690.
- 1.35 D.W. Jennison, Phys. Rev. Lett. 40 (1978) 807.
- 1.36 J.A.D. Matthew, Surface Sci. 53 (1975) 716.
- 1.37 G.A. Sawatzky, Phys. Rev. Lett 39 (1977) 504.
- 1.38 R.A. Baragiola, E.V. Alonso, y H.J.L. Raiti, Phys. Rev. A25 (1982) 1969.
- 1.39 R.A. Baragiola, en Inelastic Particle-Surface Collisions, Vol.17, de Springer in Chemical Physics, ed. E. Taglauer y W. Heiland (Springer, Berlin, 1981) p. 38.
- 1.40 K.O. Legg, W.A. Metz, y E.W. Thomas, Nucl. Inst. & Methods 170 (1980) 170.
- 1.41 N. Benazeth, Nucl. Inst. & Methods, 194 (1982) 405.
- 1.42 K. Wittmaack, Nucl. Inst. & Methods, 170 (1976) 635.
- 1.43 J. Mischler, M. Negre, y N. Benazeth, Surface Sci. 118 (1982) 193.
- 1.44 R.A. Baragiola, Radiat. Eff. 61 (1982) 47.

- 1.45 H.D. Hagstrum, en Inelastic Ion-Surface Collisions, ed. N.H. Tolk, J.C. Tully, W. Heiland, y C.W. White, (Academic, New York, 1977), p. 1.
- 1.46 N.D. Lang, y W. Kohn, Phys. Rev. B7,8 (1973) 3541.
- 1.47 E. Zaremba, y W. Kohn, Phys. Rev. B13,6 (1976) 2270.
- 1.48 S. Fraga, J. Karwowski, y K.M.S. Saxena, At. Data and Nucl. Data Tables 12 (1973) 467.
- 1.49 G. Vidali, y M.W. Cole, Surface Sci. 110, (1981) 10.
- 1.50 M. Remy, J. Chem. Phys. 53,6 (1970) 2487.
- 1.51 N.D. Lang, Phys. Rev. B27,4 (1983) 2019.
- 1.52 N.D. Lang, y A.R. Williams, Phys. Rev. B18 (1978) 616.

CAPITULO 2 -EQUIPOS Y METODO EXPERIMENTAL

Las mediciones fueron realizadas con dos equipos experimentales. Uno de ellos es un dispositivo comercial²⁻¹ de ultra alto vacío (uav) equipado con varias facilidades para espectroscopía de superficies. El rango disponible de energías de los proyectiles en este equipo es de 0.2 a 10 keV y las direcciones de incidencia de los proyectiles y de observación de los electrones están fijas. El otro equipo utilizado, Kevatrito,²⁻² trabaja en un rango de energías de ~5 a 80 keV y el ángulo de observación es variable. Ambos equipos representan una buena herramienta para el estudio de colisiones ión-sólido a bajas energías porque se complementan en el rango de energías y también en la disposición geométrica de los cañones de iones y analizadores de electrones. En las secciones siguientes describiremos las principales características de cada equipo y el método de medición.

2-1 EQUIPO DE ANALISIS DE SUPERFICIES

2-1-1 Descripción general

En la fig.2-1 se muestra un esquema del equipo de análisis de superficies con las partes relevantes para nuestro trabajo. El dispositivo experimental básico para efectuar las mediciones consta de una cámara de uav, un portamuestras con capacidad para colocar unas 20 muestras, un cañón de iones (AG5) y un analizador de energía y detector de electrones. La adquisición de datos puede efectuarse en forma manual o mediante una minicomputadora.

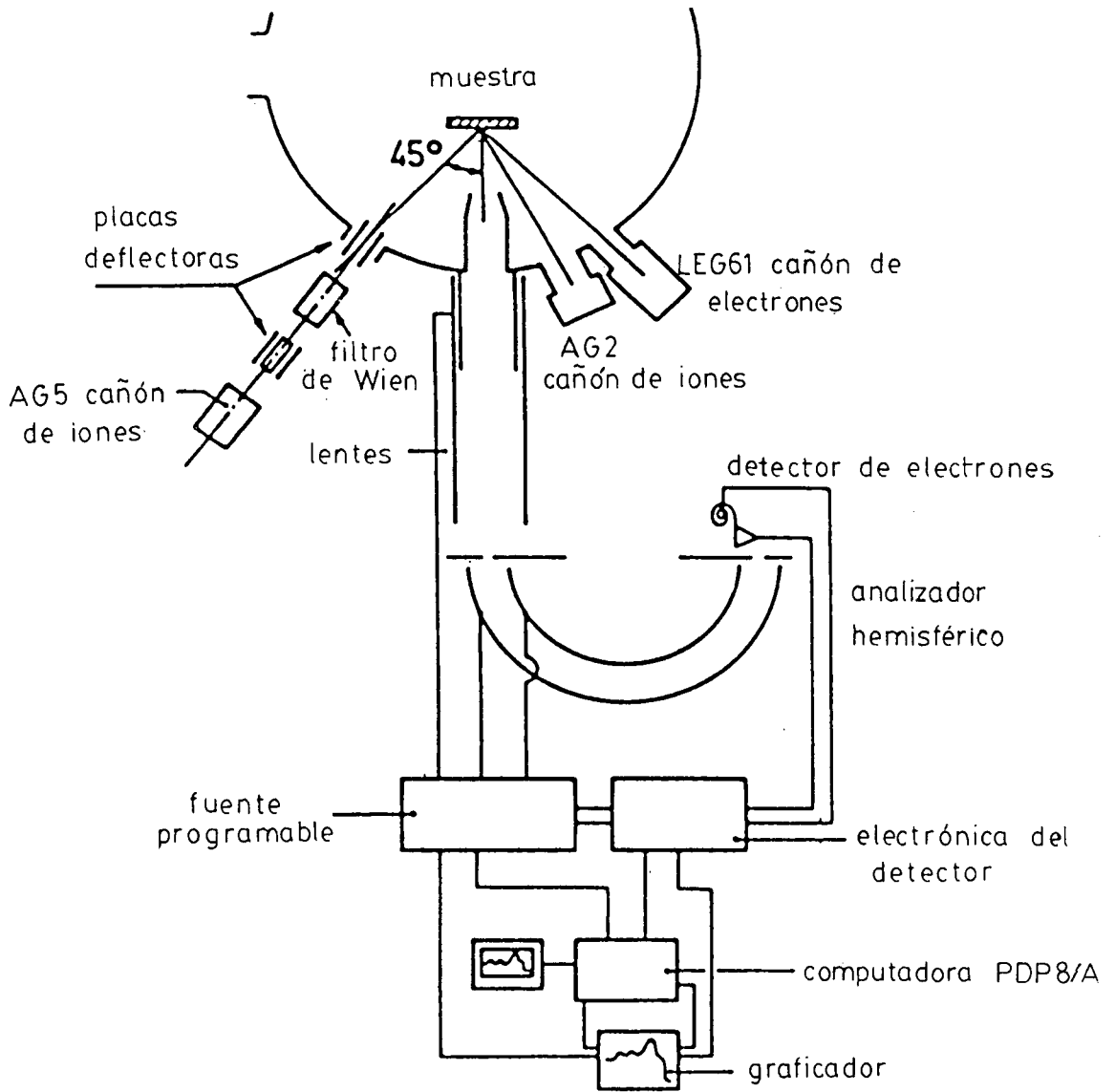


Fig.2-1: Esquema de las partes utilizadas del equipo de análisis de superficies.

También se muestran en la fig.2-1 otros accesorios que, si bien que no se usan durante la adquisición de espectros, son necesarios para la preparación y limpieza de la muestra y para controlar el nivel de contaminantes en la cámara. Estos accesorios son: Un cañón de electrones (LEG 61), un cañón de iones (AG2), un cañón de álcalis y un analizador de masa de iones (en la vista del equipo que se muestra en la fig.2-1, los dos últimos accesorios aparecerían superpuestos al AG5 y al analizador de electrones, respectivamente).

a) Cámara de uav y muestras:

La cámara principal está construida de mu-metal y mediante una bomba difusora, una bomba iónica y una bomba de sublimación de titanio se mantiene a una presión base de $\sim 10^{-10}$ Torr.

Se utilizaron muestras policristalinas de Be, Mg, Al y Si de pureza mayor que 99.999 %. Las mismas se encuentran montadas sobre un portamuestras con forma de disco que puede rotar sobre su eje y desplazarse en las tres direcciones x, y, z. La limpieza de las muestras se realiza erosionando sus superficies ("sputtering") mediante bombardeo con iones de Ar a energías de algunos keV y 52° de ángulo de incidencia (medido respecto de la normal a la muestra). Estos iones son producidos en un cañón del tipo de cátodo frío (AG2). La evolución de la limpieza se controla mediante análisis Auger inducido por bombardeo con electrones de 3 keV y se suspende la erosión de la muestra cuando la concentración de los contaminantes en la superficie (principalmente C y O) cae por debajo del 1 % ²⁻³

Hemos utilizado también una muestra de Na depositado sobre

un sustrato limpio de Mg, preparada *in situ* mediante el cañón de álcalis. Este cañón posee una fuente emisora de álcalis por calentamiento indirecto^{2,4} y una lente que permite enfocar y acelerar los iones hacia la muestra.

b) Cañón de iones AG5:

La dirección de incidencia de los iones está fija y forma un ángulo de 47° respecto de la dirección de observación del analizador y 45° respecto de la normal a la muestra, cuando ésta se encuentra tangencial al disco portamuestras (fig.2-2).

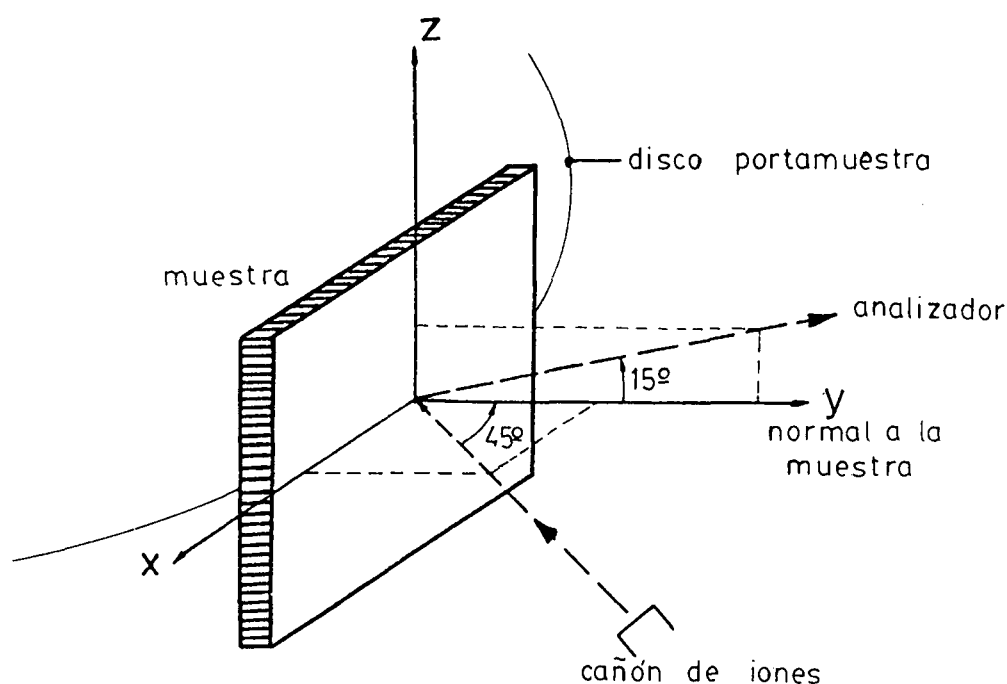


Fig.2-2: Esquema de la disposición geométrica de la muestra, cañón de iones y analizador de electrones en el equipo de análisis de superficies.

La energía de los iones se puede seleccionar dentro del rango de ~ 0.2 a 5 keV si los iones están simplemente ionizados y se

puede extender hasta 10 o 15 keV si están doble o triplemente ionizados.

Los iones son producidos en una cámara de ionización por bombardeo de electrones y son analizados en masa mediante un filtro de Wien. Luego de pasar por el filtro los iones son desviados hacia la muestra mediante un cuadrupolo. De esta manera se elimina la posible contaminación del haz por átomos neutros no analizados en masa y además se puede barrer una zona determinada de la muestra.

El área de la zona irradiada depende de la energía del haz y típicamente tiene alrededor de 2 mm de diámetro. Las corrientes están en el rango de 10^{-8} a 10^{-7} A para iones simplemente cargados y de 10^{-9} a 10^{-10} A para los múltiplemente cargados.

Durante el funcionamiento del AG5 la presión en la cámara de uav aumenta a $\sim 10^{-8}$ Torr. Esto no afecta mayormente las condiciones de limpieza de la muestra porque se trabaja con gases nobles puros, con lo cual la presión parcial de los otros gases contaminantes permanece en $\sim 10^{-10}$ Torr.

c) Analizador de energía:

Los electrones emitidos a 15° de la normal a la muestra, cuando ésta se encuentra en la posición usual (fig.2-2), son analizados en energía por un analizador electrostático hemisférico. El área de aceptación sobre la superficie de la muestra es mayor que el área irradiada por el cañón de iones. Una lente electrostática produce una imagen de la fuente de electrones en la ranura de entrada del analizador. Esto permite mantener el analizador alejado de la muestra, mejorándose así la relación

señal-ruido.

Antes de entrar al analizador los electrones pueden ser acelerados o retardados. Esto da origen a dos modos de operación, en uno de ellos la energía de paso de los electrones en los sectores esféricos del analizador se mantiene constante (modo CAE). En este modo, la resolución (2 %) y la transmisión del analizador permanecen constantes para aquellos electrones con energías (E_e) menores que la energía de paso. El otro modo de operación, CRR, consiste en mantener constante la relación entre el potencial de retardo y la energía de paso. La inclusión del potencial de retardo tiene por objeto mejorar la resolución del analizador, lo cual se logra a expensas de la transmisión. En el modo CRR la resolución absoluta y la transmisión resultan proporcionales a la energía analizada. Todos nuestros espectros fueron adquiridos en el modo CRR, eligiéndose valores de compromiso entre resolución y transmisión.

Los electrones que poseen la energía adecuada recorren trayectorias comprendidas entre las dos placas del analizador y al salir de éste son detectados por un multiplicador de electrones tipo "channeltron". La señal del detector es amplificada usando técnicas de pulsos y los datos son registrados manualmente o automáticamente por medio de una minicomputadora Digital PDP-8.

Dos aspectos del analizador que discutiremos con un poco más de detalle son: 1) La calibración de la escala de energía de los electrones y 2) La resolución del analizador. El primero es importante porque se compararán las posiciones de los picos Auger en nuestros espectros con las obtenidas por otros autores y el

segundo porque se comparará la forma de los picos Auger atómicos con resultados calculados, debiéndose conocer entonces si el equipo puede producir alguna modificación en la posición o en la forma de dichos picos.

d) Calibración de la escala de energía:

Para efectuar la calibración de la escala de energías ≈ 2.5 bombardeamos la muestra con electrones acelerados a través de un potencial V_f , conocido con suficiente precisión, y observamos el pico de electrones reflejados elásticamente en el blanco. El diagrama de energías correspondiente a esta medición se muestra en la fig.2-3. Todos los potenciales están medidos entre los niveles de Fermi de los diferentes electrodos.

En este caso, la energía de los electrones respecto del nivel de Fermi del blanco es conocida y está dada por:

$$E_e = e V_f + \phi_f + E_{kt} \quad (2-1)$$

donde e es la carga del electrón, V_f la tensión aplicada entre el filamento y la muestra, $\phi_f = 4.55$ eV la función trabajo del filamento de tungsteno y $E_{kt} = 0.23$ eV la energía térmica más probable de los electrones emitidos.

Para que estos electrones lleguen al multiplicador de electrones, se debe sintonizar la energía de paso (T) del analizador de manera que se cumpla:

$$E_e = e R + T + \phi_{sp} \quad (2-2)$$

donde R es el potencial de retardo seleccionado de antemano y ϕ_{sp} la función trabajo del analizador. De 2-1 y 2-2 se calcula la

función trabajo del analizador, que es el único parámetro desconocido.

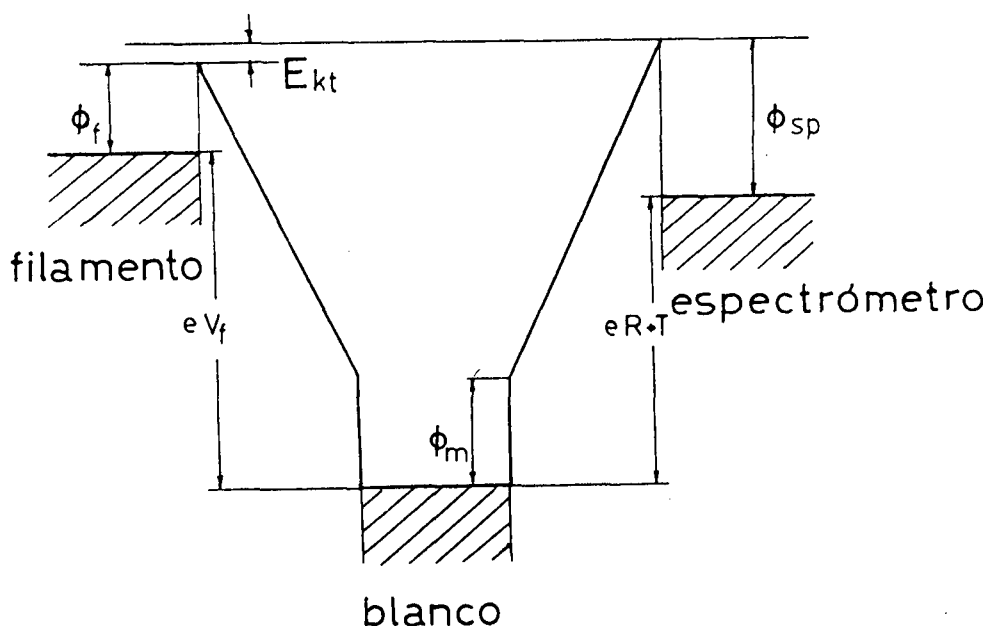


Fig.2-3: Diagrama de energías utilizado en la medición de la función trabajo del espectrómetro, ϕ_{sp} , y la calibración de la escala de energía de los electrones.

Conociendo el valor de ϕ_{sp} , la energía de cualquier otro electrón detectado queda determinada por la relación 2-2. Esta energía está medida respecto del nivel de Fermi del blanco y para compararla con resultados obtenidos en fase gaseosa conviene expresarla referida al nivel de vacío. En la fig.2-3 se ve que la energía de los electrones referida al nivel de vacío de la muestra está dada por:

$$E_{e^{-}} = e R + T + \phi_{sp} - \phi_m$$

donde ϕ_m es la función trabajo de la muestra. En nuestro trabajo usamos valores de ϕ_m obtenidos de tablas,^{2.6} los cuales están en muy buen acuerdo con los medidos en el equipo de superficies por Zampieri.^{2.7}

e) Resolución del analizador:

La resolución absoluta en energía depende de la geometría y de la energía de paso del analizador,^{2.8} en nuestro caso está dada por:

$$E = 0.02 T = 0.02 (E_e - \phi_{sp}) / RR$$

donde se ha definido el factor de retardo RR por: $RR = (E_e - \phi_{sp}) / T$. Para energías de los electrones mucho mayores que ϕ_{sp} , el factor de retardo representa aproximadamente el cociente entre la energía inicial del electrón y la energía con que ingresa a los hemisferios del analizador. En el equipo de análisis de superficies RR puede seleccionarse entre los valores 1, 2, 4, 10, 20, 40 y 100.

La transmisión del analizador disminuye con el aumento de RR en la forma.^{2.8} $Tran \propto 0.02 E_e / RR^2$, de manera que un aumento en un factor 10 en la resolución produce una disminución de la transmisión en un factor 100.

En el capítulo 5 compararemos la forma de los picos Auger atómicos del Al con resultados experimentales. Estos picos poseen una energía $E_e \sim 63$ eV y un ancho a mitad de altura que varía entre 0.7 y 2 eV. Trabajando con $RR=10$ obtendremos una resolución

mejor que 0.2 eV y es de esperarse entonces que el equipo no altere apreciablemente la forma de los picos.

Para verificar que efectivamente la forma de los picos no resulta afectada por la resolución del analizador, en la fig.2-4 mostramos el pico de electrones (de 63 eV) elásticamente reflejados en una superficie de Al, medido con diferentes valores del factor de retardo. Se ve en esta figura que la forma del pico, determinada por la dispersión en energía del haz de electrones incidentes, no cambia para factores de retardos mayores que 10. Como este pico es un poco más angosto que los picos Auger que observaremos, el uso de $RR \approx 10$ es el mejor compromiso entre resolución y transmisión. El ensanchamiento producido por el equipo se puede estimar mediante un cálculo de convolución con una gaussiana de ancho igual a la resolución absoluta del analizador de electrones (fig.2-4).

f) Cañón de electrones LEG 61:

Este cañón se utiliza para: 1) Adquirir espectros Auger excitados por electrones, 2) controlar la limpieza de la muestra mediante espectroscopía Auger, 3) calibrar la escala de energía del analizador y 4) obtener una imagen física de la muestra. En este último caso se utiliza en combinación con un colector de electrones secundarios y un monitor de video.

Los electrones son emitidos por un filamento de cinta de tungsteno, son acelerados por dos ánodos y enfocados por un sistema de lentes. Posteriormente, los electrones pasan por un cuadrupolo que fija la dirección del haz hacia la muestra o barre una porción de la misma. La energía de los electrones se puede

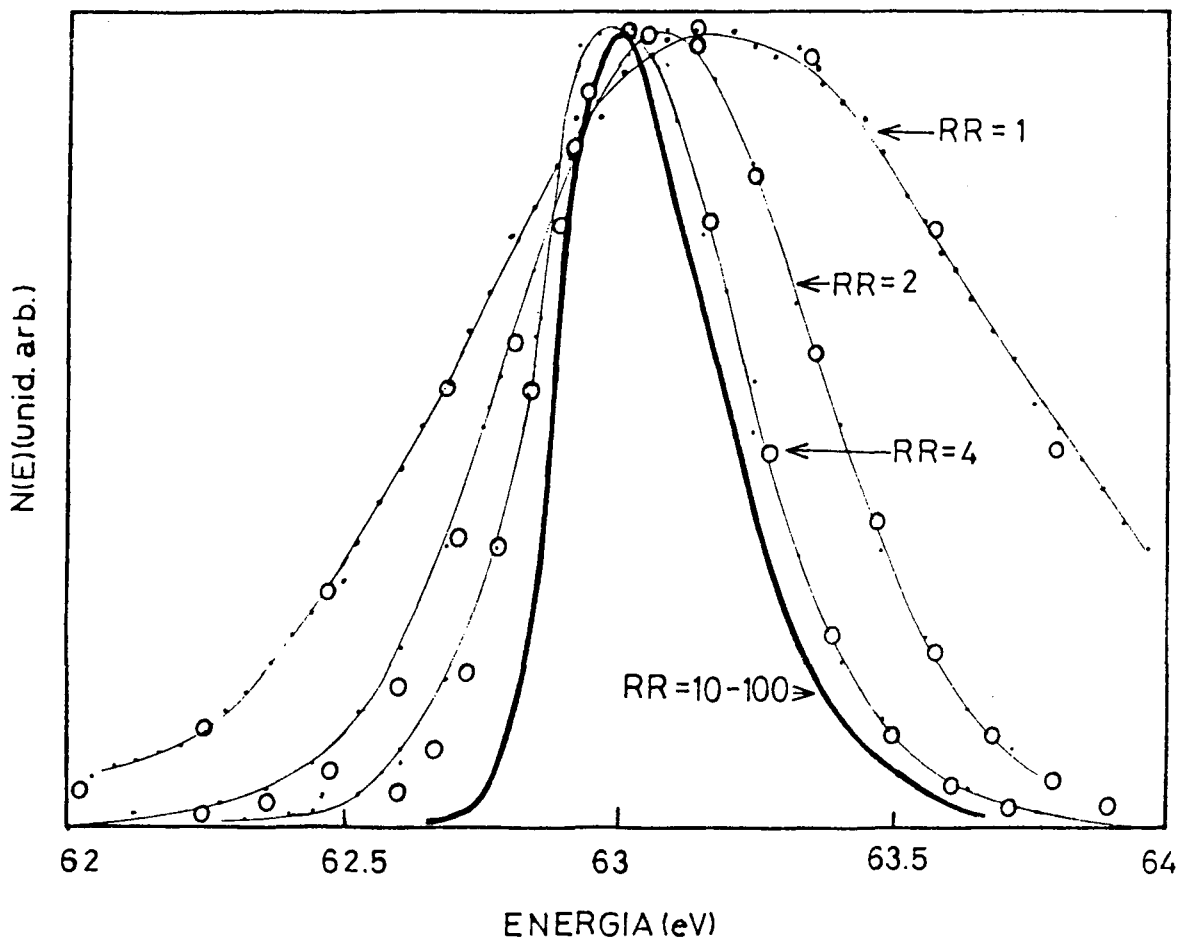


Fig.2-4: Picos de electrones reflejados elásticamente en una superficie de Al, obtenidos con factores de retardo (RR) 1, 2, 4, 10, 20, 40 y 100. Los picos medidos con $RR > 10$ coinciden con la línea gruesa, dentro de la dispersión estadística. Los espectros están normalizados en altura. \circ - resultados de la convolución entre una Gaussiana de ancho igual a la resolución absoluta del analizador (dependiente de RR) y el pico elástico medido con $RR=20$.

seleccionar en el rango de 100-5000 eV, la corriente es del orden de los microamperes y el diámetro del haz es < 0.1 mm.

2-1-2 Método experimental

Para adquirir los espectros de electrones que se muestran en este trabajo hemos seguido los siguientes pasos:

- i) Limpieza de la muestra
- ii) Ubicación de la muestra en el punto de convergencia del haz de iones y el analizador
- iii) Medición de la corriente incidente
- iv) Adquisición de los espectros por computadora
- v) Nuevo control de la limpieza de la muestra
- vi) Calibración de la escala de energía
- vii) Procesamiento de los datos

El primer paso ya fue descrito en la sección 2-1a. El segundo paso consiste en hacer incidir el haz de iones sobre la zona de la muestra donde la transmisión del analizador es máxima. Para ello se dispone de una copa de Faraday y una muestra de Ta con un centro de Al montados en el disco portamuestras. Se hace incidir el haz de electrones proveniente del LEG 61 sobre el centro de Al y operando sobre el manipulador del portamuestras y el cuadrupolo del LEG 61 se busca la posición que produzca la máxima señal Auger del Al. Luego se determina la posición del haz de electrones con la copa de Faraday. Se apaga el cañón de electrones, se enciende el de iones y operando sobre su cuadrupolo se lo hace incidir en la copa. Finalmente, se coloca la muestra a

medir, ya limpia, en la zona de incidencia del haz de iones.

Cuando se quiere medir la intensidad de los picos Auger, o compararla con la de otros espectros, es necesario medir la corriente de iones que incide sobre la muestra. Esta operación se realiza con un electrómetro conectado en la forma que se indica en la fig.2-5.

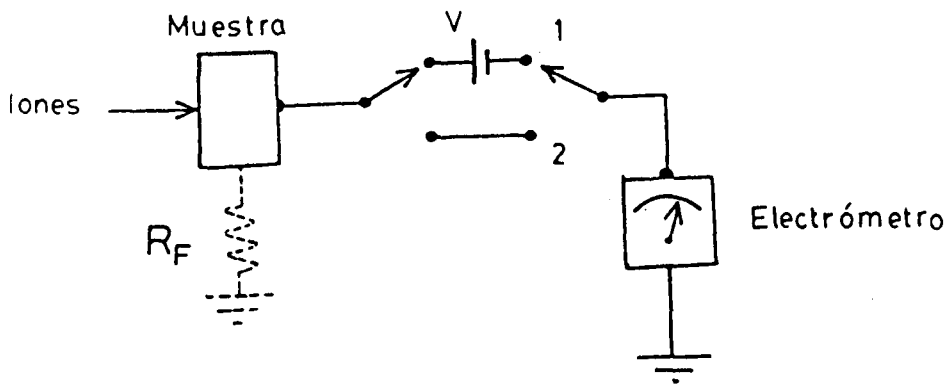


Fig.2-5: Circuito utilizado para medir la corriente de iones incidentes. R_F es la resistancia de fuga entre el portamuestras y masa. V el potencial aplicado a la muestra para suprimir la emisión de electrones secundarios. La posición 2 corresponde a la de adquisición de espectros.

R_f representa la resistencia de fuga entre el portamuestras y masa, y su valor es $>10^{12} \Omega$. V es el potencial al cual se debe levantar la muestra a fin de suprimir la emisión de electrones secundarios, generalmente se usa $V=50$ o 100 volts. Si se trabaja en una escala del electrómetro tal que su resistencia interna sea mucho menor que R_f , la corriente que se mide es la diferencia entre la corriente de iones incidente y la corriente de fuga a través de R_f . Para energías de los proyectiles menores que 600 eV o para iones múltiplemente cargados, la corriente de fuga puede ser del mismo orden que la corriente incidente; para medirla basta con apagar el cañón de iones.

Todos los espectros mostrados en este trabajo fueron adquiridos por computadora. Este método tiene la ventaja de permitir la superposición de barridos de un mismo espectro, con lo cual se mejora la relación señal-ruido. Durante la adquisición de datos el monitor de la computadora muestra el espectro normal $N(E)$ (número de cuentas por intervalo de energía) y el espectro derivado $dN(E)/dE$. Este último es útil para distinguir picos pequeños superpuestos a fondos intensos que varíen en forma suave con la energía. El programa de adquisición permite guardar uno de los dos espectros mostrados.

Durante la adquisición se controla periódicamente la corriente de iones incidente y una vez finalizada la medición de los espectros se vuelve a controlar la limpieza de la muestra para verificar que no se contaminó durante la adquisición.

Cuando la posición de los picos va a ser comparada con la de otros espectros se calibra la escala de energía en la forma in-

dicada en 2-1d.

Por último, los espectros se corrigen por la transmisión del analizador. Como ésta es proporcional a la energía, se divide el número de cuentas en cada canal por la energía correspondiente a ese canal. En la fig.2-6 mostramos un espectro de electrones del Al excitado por bombardeo con iones de Ar a 4 keV, adquirido siguiendo los pasos mencionados.

2-2 KEVATRITO

Este equipo fue utilizado para estudiar la dependencia de la forma de los espectros Auger con el ángulo de incidencia de los proyectiles y con el ángulo de observación de los electrones eyectados. No fue utilizado para comparar las posiciones y las intensidades absolutas de los picos Auger con las correspondientes a espectros adquiridos con otros equipos, por lo tanto no fue necesario calibrar en forma muy precisa la escala de energías, ni medir la corriente incidente.

En la fig.2-7 se muestra un esquema con la disposición experimental. Actualmente De Ferrariis²⁻⁷ está preparando una descripción detallada de cada una de las partes del Kevatrito, nosotros haremos sólo una descripción breve de las partes utilizadas.

a) Cámara principal y muestras:

El vacío en la cámara principal se efectúa mediante una bomba iónica de 200 l/seg, una bomba difusora y una bomba de sublimación de titanio. Con estas bombas se alcanza una presión ba-

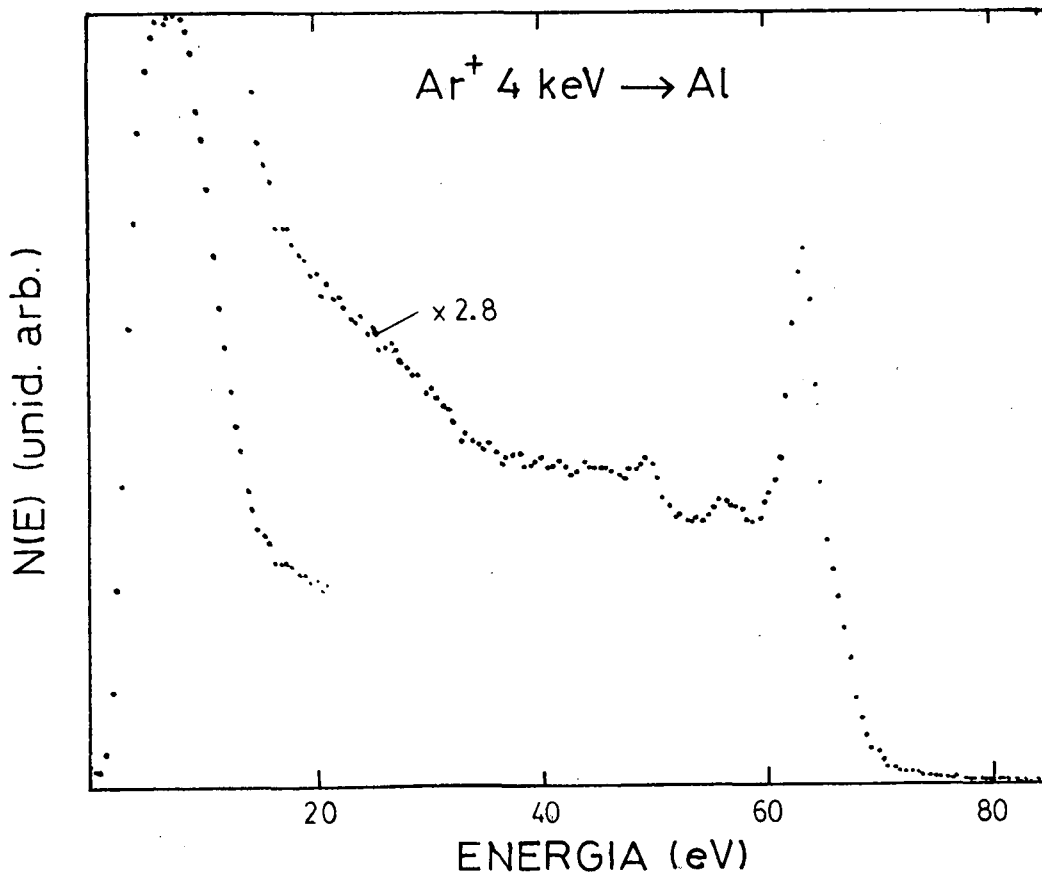


Fig.2-6: Espectro de energía de electrones emitidos durante el bombardeo de la muestra de Al con iones de Ar a 4 keV, adquirido con el equipo de análisis de superficies.

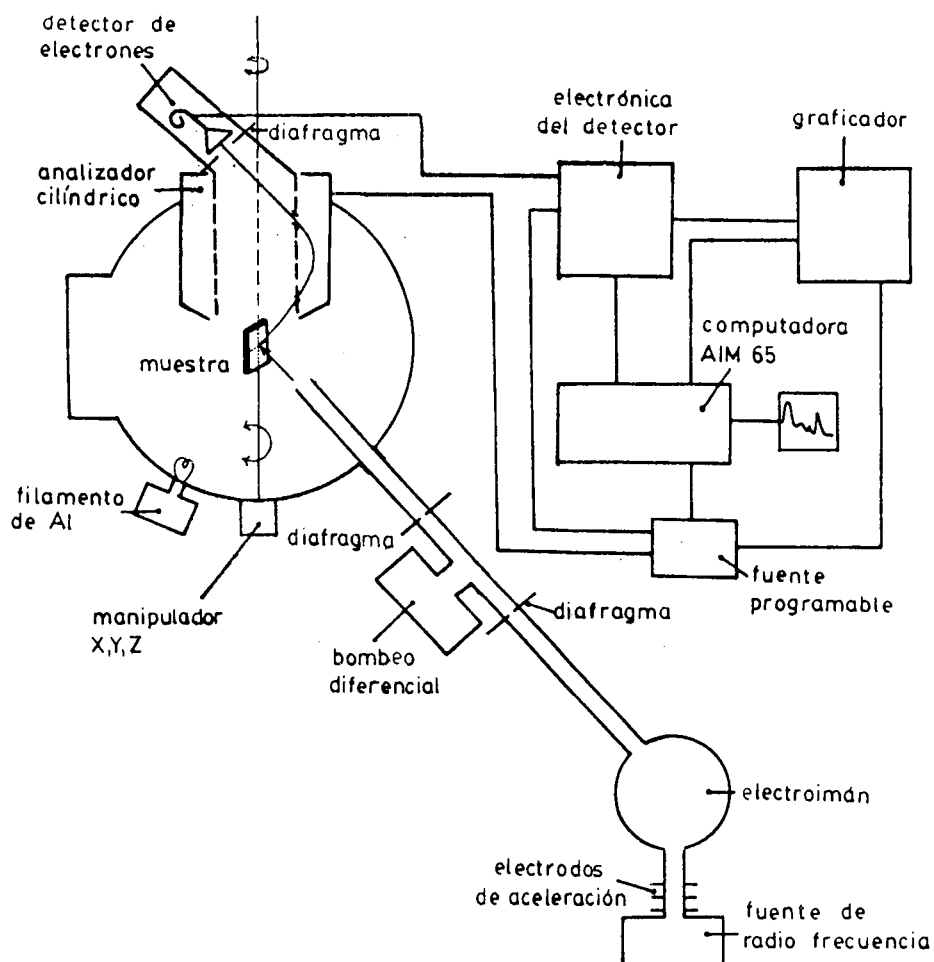


Fig.2-7: Esquema de las partes principales del Kevatron.

se de $\sim 10^{-10}$ Torr.

Se utilizaron dos muestras, una de ellas es un monocristal comercial de Si ($1000 \Omega \text{ cm}$), de 4 mm de ancho y pulida a espejo, y la otra es una muestra de Al obtenida por evaporación *in situ* sobre un sustrato de Si.

En el momento en el cual se efectuaron las mediciones el Kevatrito no contaba con la facilidad de limpieza de las muestras por "sputtering", ni control de la limpieza por espectroscopia Auger.²⁻¹⁰ Por tal motivo y para evitar que se contamine la superficie de la muestra, la adquisición de los espectros de Al se efectuaba inmediatamente después de la evaporación.

Para la muestra de Si, antes de adquirir los espectros hacíamos incidir el haz de iones sobre la zona a medir durante una o dos horas. En el transcurso de los primeros 10 o 20 minutos de bombardeo se observaban variaciones en la emisión total de electrones secundarios y luego ésta permanecía constante. Como la emisión de electrones secundarios es fuertemente dependiente del estado de contaminación de la superficie,²⁻¹¹⁻¹² después de transcurrida ~ 1 hora desde que dejaban de observarse dichas variaciones se consideraba que la muestra estaba suficientemente limpia y se iniciaba la adquisición de los espectros.

Las muestras están montadas en un portamuestras cuyo eje principal de rotación, x, coincide con el eje del analizador, ver fig.2-8. A su vez, el eje del portamuestras es controlado por un manipulador con el cual, además de las rotaciones alrededor del eje x, se pueden efectuar desplazamientos en las tres direcciones x,y,z.

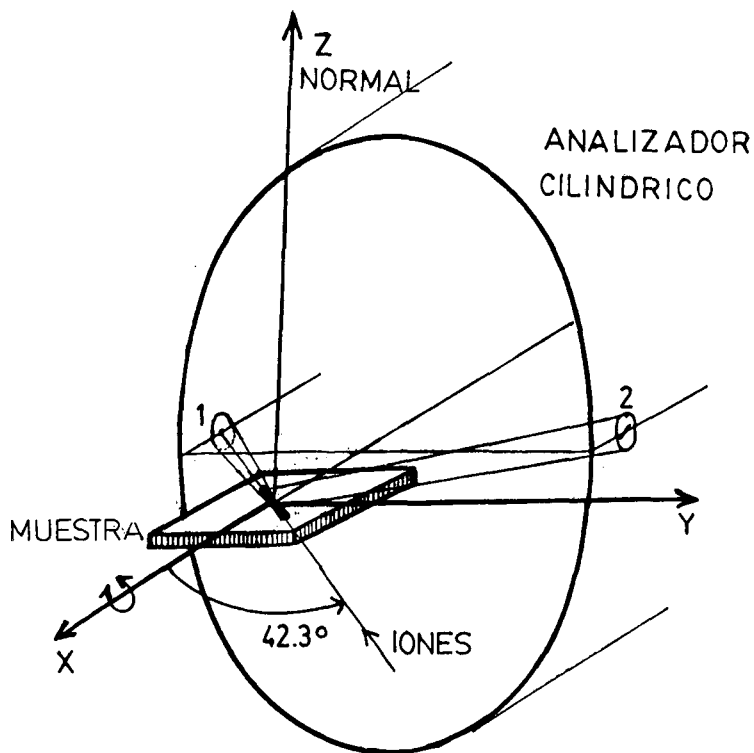


Fig.2-8: Esquema de la disposición geométrica de la muestra, cañón de iones y analizador de electrones en el Kevatrío. La muestra puede rotar alrededor del eje x y desplazarse en las tres direcciones x, y, z. El cilindro interior del analizador, junto con el detector de electrones pueden rotar alrededor del eje x. La dirección de incidencia de los iones está en el plano x-y.

b) Cañón de iones:

Los iones son producidos con una fuente de radio frecuencia y son acelerados por un campo eléctrico constante hasta una energía seleccionable en el rango de ~5 a 80 keV. La presión de trabajo en la zona de aceleración es $\sim 10^{-6}$ Torr. Luego de acelerados, los iones son analizados en masa mediante un electroimán. Para mantener el alto vacío en la cámara principal y mejorar la colimación del haz, los iones pasan por una zona de bombeo

diferencial con dos diafragmas pequeños en sus extremos. El diámetro del haz al final del recorrido es ~ 0.5 mm y la dispersión angular 0.1° .

La dirección de incidencia de los iones se encuentra en el plano x y (ver fig.2-8) y forma un ángulo de 42.3° respecto del eje x .

c) Analizador de energía y detector de electrones:

Los electrones emitidos por la muestra son analizados en energía mediante un analizador electrostático de simetría cilíndrica y luego colectados por un multiplicador de electrones tipo "channeltron". La ubicación del analizador dentro de la cámara de uav se muestra en las figs.2-7 y 2-8.

El cilindro interno del analizador y el detector de electrones están montados en forma tal que pueden rotar en forma continua alrededor del eje del analizador. Esto permite medir distribuciones en energía de electrones para diferentes ángulos de observación. El cono de aceptación del analizador es 3.2° y la dirección de observación puede desplazarse sobre un cono de 42.3° de semiapertura (fig.2-8).

Cuando se coloca la superficie de la muestra cerca del plano xy , de manera que los iones incidan en forma rasante, se pueden observar los electrones emitidos a ángulos rasantes, en la dirección del haz incidente (posición 1 en la fig.2-8). En estas condiciones la zona irradiada por el haz es grande, pero, no se producen desenfoques en el analizador porque éste ve una zona "puntual". En cambio, para otras posiciones de observación (2) este efecto puede ser significativo. Por tal motivo para incidencia

rasante sólo se han tomado espectros cerca de la posición 1.

Colocando la muestra en el plano xz , la dirección de incidencia de los iones forma un ángulo de 47.7° respecto de la normal a dicha muestra. En estas condiciones se pueden observar los electrones emitidos en la zona de reflexión especular del haz (posición 2 en la fig.2-8) y rotando el cilindro interior respecto de esa posición se puede obtener información de la distribución angular de los electrones eyectados.

La resolución del analizador depende de la posición de la fuente de electrones, definida por la zona de la muestra bombardeada por el haz. Diversas mediciones efectuadas para varias posiciones de la muestra indican que la resolución debe ser menor o a lo sumo igual a 1.5 %

Los electrones que poseen la energía adecuada describen trayectorias entre los dos cilindros, escapan por el agujero de salida del cilindro interior y pasan por uno de los seis diafragmas colocados entre el detector y el analizador (fig.2.7). Seleccionando el diafragma se selecciona el ángulo de aceptación del analizador. Para buscar la mejor condición de enfoque el detector está montado de forma tal que mediante un tornillo micrométrico puede ser desplazado en el plano de la órbita que describen los electrones.

Finalmente los pulsos del detector son amplificados, discriminados y convertidos en pulsos TTL. La adquisición de los datos se efectúa en forma manual o automática por medio de una microcomputadora ROCKWELL AIM 65. La adquisición automática de datos puede realizarse de dos maneras diferentes, elegidas por

"software". En una de ellas el tiempo de acumulación de cuentas en cada canal es constante y en la otra es inversamente proporcional a la corriente de iones incidente sobre la muestra. En esta última configuración las mediciones resultan independientes de las posibles fluctuaciones del haz.

Además de los programas de adquisición el sistema posee programas de procesamiento de los datos y de transferencia a otra computadora DIGITAL PDP 11, más poderosa que la AIM 65. Para concluir esta sección se muestra en la fig.2-9 un espectro Auger del Si inducido por iones de Ar a 20 keV, adquirido con el Kevatron.

REFERENCIAS

- 2.1 Fabricado por V.G. Scientific, Inglaterra.
- 2.2 Fabricado en el Centro Atómico Bariloche.
- 2.3 P.W. Palmberg, G.E. Riach, R.E. Weber, y N.C. Mac Donald, Handbook of Auger Electron Spectroscopy, Physical Electron. Ind. Inc., Edina (1972).
- 2.4 Fabricado por Spectramat.
- 2.5 R.A. Baragiola, E.V. Alonso, y H.J.L. Raiti, Phys. Rev. 25 (1982) 1969.
- 2.6 V.S. Fomenko, Handbook of Thermoionic Properties, ed. G.V. Sansonov (Plenum, New York, 1966).
- 2.7 G. Zampieri, y R.A. Baragiola, Phys. Rev. B29 (1984) 1480.
- 2.8 R. Kuyat, y W. Simpson, Rev. Sci. Inst. 38,1 (1967) 103.
- 2.9 L. De Ferrariis, F. Tutzauer, y R.A. Baragiola, "UHV

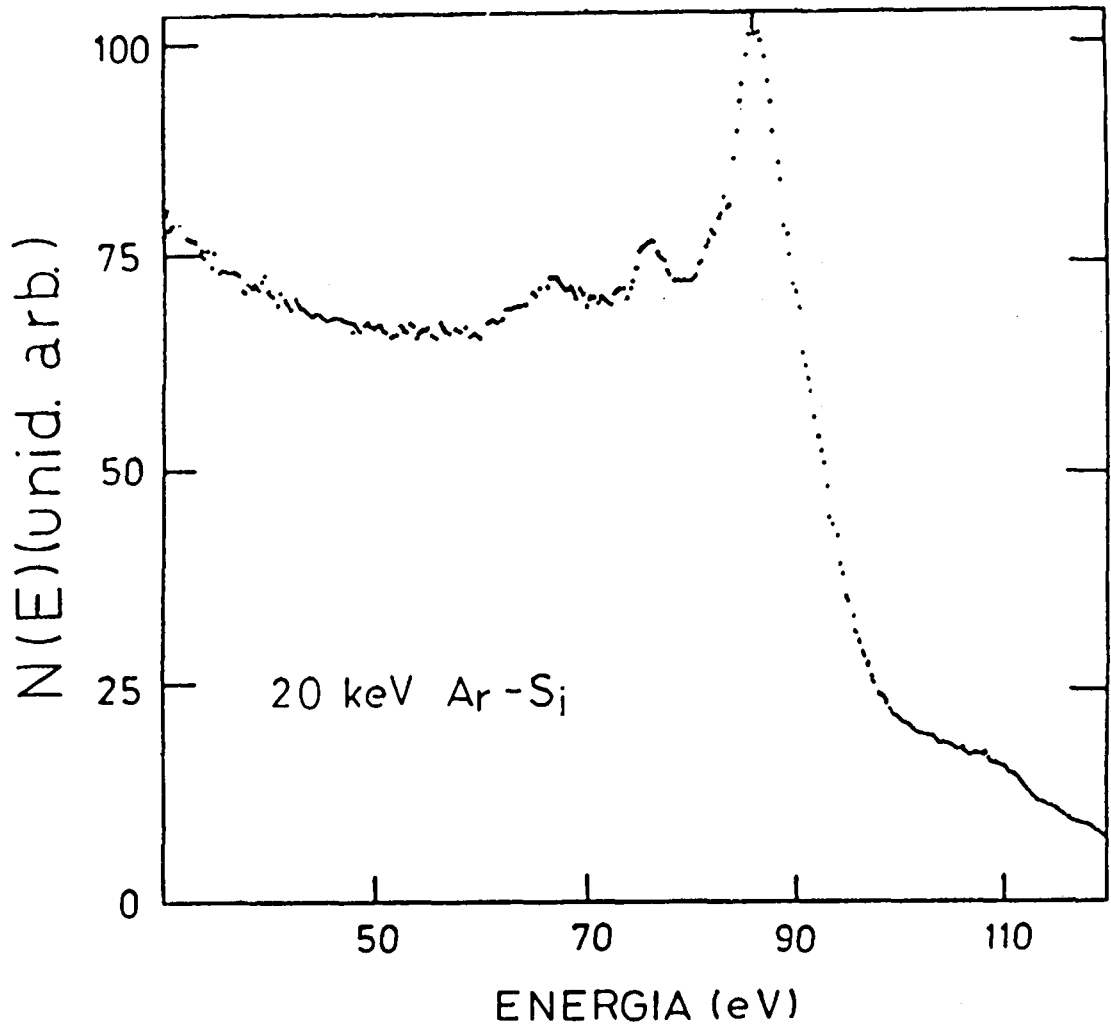


Fig.2-9: Espectro de electrones Auger del Si inducido por bombardeo con iones de Ar a 20 keV, adquirido con el Kevatrilo.

compatible cylindrical mirror analyzer designed for angular measurements", en preparación.

2.10 Actualmente se están implementando estas facilidades.

2.11 M.M. Guraya, Trabajo Especial, Instituto Balseiro (1986).

2.12 R.A. Baragiola, E.V. Alonso, J. Ferrón, y A. Oliva-Florio, Surface Sci. 90 (1979) 240.

CAPITULO 3 - SIMULACION POR MONTE CARLO

En esta sección describiremos el programa de computación utilizado para simular las trayectorias y los eventos de excitación en colisiones de iones con sólidos. Diversos problemas inherentes a las colisiones de átomos con sólidos, tales como determinación de rangos,³⁻¹ desplazamientos atómicos,³⁻² "sputtering"³⁻³ y emisión de electrones Auger,³⁻⁴⁻⁵ han sido estudiados mediante simulaciones numéricas basadas en el método de Monte Carlo. En las publicaciones mencionadas se pueden encontrar las descripciones detalladas de cada programa. Nosotros modificamos el programa TRIM ("transporte de iones en la materia"),^{3-1,3-3} para incluir los procesos de excitación y para seguir a los átomos excitados hasta que se produzca su decaimiento dentro del sólido o afuera del mismo.

Cada historia se inicia con una dada energía (E_p), dirección y posición del proyectil y termina cuando la energía de éste cae por debajo de un valor prefijado o cuando el proyectil escapa del sólido. Las partículas se mueven en segmentos rectilíneos, cambiando su dirección en colisiones binarias con átomos del blanco situados en el extremo de cada segmento. Se supone que el blanco es amorfo con átomos situados al azar. La distancia entre dos colisiones sucesivas, L , está dada por $L = N^{-1/3}$, donde N es la densidad atómica del blanco.

Los proyectiles pierden energía en las colisiones con los núcleos del blanco y en interacciones inelásticas con los electrones del sólido. En cada colisión el proyectil transfiere una

energía T al átomo del blanco y sale de la colisión con una energía $E-T$, siendo E la energía del proyectil antes de la colisión y T función del ángulo de dispersión. Si T es mayor que la energía de cohesión del sólido, el átomo blanco se pone en movimiento y colisiona contra otros átomos, generándose así la cascada de colisiones.

La dispersión nuclear determina entonces parte del frenamiento de los proyectiles y también sus trayectorias. La forma más rigurosa de obtener los ángulos de dispersión es a través de evaluaciones numéricas de la integral de dispersión clásica. Algunos de los programas de simulación existentes utilizan este método de cálculo, el cual tiene como principal desventaja el elevado tiempo de computación que requiere. El programa que adaptamos nosotros utiliza para el cálculo de los ángulos de dispersión una expresión analítica simple,³⁻¹ que posee una desviación típica del 1% respecto de las evaluaciones numéricas³⁻². Para describir el potencial interatómico se utiliza un potencial de Thomas-Fermi con la aproximación de Moliere.³⁻⁴

El ángulo de dispersión azimutal θ se obtiene mediante $\theta=2\pi R_n$, donde R_n es un número elegido al azar, uniformemente distribuido entre 0 y 1.

En cada colisión se calcula el parámetro de impacto p mediante $p = p_{max} R_n^{1/2}$, donde R_n es otro número elegido al azar y p_{max} es el parámetro de impacto máximo. p_{max} se obtiene a partir de $N^{2/3} p_{max}^2 = 1$, siendo N la densidad de átomos del sólido.

El frenamiento de los proyectiles debido a la interacción inelástica con los electrones del sólido se obtiene, despreciando la dependencia con el parámetro de impacto, usando $E_{-}=N^{2/3} S_{-}(E)$,

donde S_e es la sección eficaz de frenamiento electrónico. Para bajas energías resulta $S_e = k E^{1/2}$, siendo k el parámetro de frenamiento de Lindhard y Scharff.³⁻⁷ La dependencia del frenamiento electrónico con p puede ser importante a bajas energías,³⁻¹ pero, para proyectiles pesados como los que hemos estudiado nosotros, la degradación en energía está determinada principalmente por el frenamiento nuclear y, por lo tanto, despreciar la dependencia con p no debería alterar significativamente los resultados.

Todos aquellos átomos del blanco que adquieren energía cinética suficiente como para producir excitaciones en colisiones posteriores con otros átomos del blanco son considerados como nuevos proyectiles y sus trayectorias son seguidas hasta que se frenen o escapen del sólido.

Para la mayor parte de los cálculos que realizaremos es suficiente con seguir a las partículas respecto de un eje fijo, la normal a la superficie de la muestra. Después de cada colisión se calcula el ángulo de emergencia de la partícula, respecto de este eje. Con este ángulo se calculan las posiciones (referidas a la superficie) donde se producen las colisiones de excitación o los decaimientos Auger.

En cada colisión primaria entre el proyectil y los átomos del blanco (p-b), y en cada colisión secundaria entre dos átomos del blanco (b-b), el programa calcula la probabilidad que se produzca una vacancia interna en el átomo del blanco (recordemos que no se estudia la producción de vacancias en el proyectil). Cuando se trata de colisiones simétricas (entre dos átomos i-

guales) se suponen iguales probabilidades de excitación para cada átomo colisionante. El mecanismo de creación de vacancias depende de la energía de los proyectiles y de los números atómicos de los proyectiles y los blancos utilizados. Si bien el cálculo específico de la probabilidad de excitación será discutido en la sección siguiente, podemos adelantar aquí que para que se produzca la excitación es necesaria una colisión violenta. En esta colisión los núcleos deben acercarse más que una dada distancia crítica (R_c). En los casos que hemos estudiado estas distancias críticas son menores que 1 Å y para alcanzarlas se necesitan típicamente energías mayores que 1 keV.

El programa que hemos utilizado considera que cada átomo colisiona con otro que está en reposo y no tiene en cuenta la posibilidad de colisiones simultáneas u otros efectos que provienen de interacciones múltiples.³⁻⁶ Estos efectos pueden representar una limitación seria en simulaciones donde se describe el movimiento de átomos lentos (energías del orden de las decenas de eV). En cambio, es de esperarse que modifiquen poco nuestros resultados porque se describe solamente la parte más energética de la cascada de colisiones, donde los efectos simultáneos son muy poco probables.

Para estudiar con el programa de Monte Carlo la emisión de electrones Auger es necesario seguir a cada átomo excitado hasta que se produzca la desexcitación. Para cada átomo excitado se calcula, al final de cada segmento de trayectoria L , la probabilidad que se haya producido la transición Auger (P_A). Esta probabilidad se obtiene mediante $P_A = 1 - \exp(-t/T_{sol})$, donde T_{sol} es el parámetro que representa la vida media de la vacancia dentro del

sólido y t el tiempo que emplea el átomo excitado en recorrer la distancia L . A P_A se le suma un número elegido al azar R_n , uniformemente distribuido entre 0 y 1. Si $P_A + R_n$ es mayor que 1 se considera que se produjo el decaimiento. Si $P_A + R_n < 1$ se repite el procedimiento para el segmento de trayectoria siguiente y así sucesivamente, hasta que se ubica la posición donde se produjo el decaimiento. Puede ocurrir también que el átomo excitado escape del sólido conservando la vacancia interna. En estos casos la transición Auger ocurre en el vacío, cerca de la superficie del sólido.

Los decaimientos que ocurren dentro del sólido dan origen a electrones Auger con una cierta probabilidad de escapar del sólido. Esta probabilidad de escape se puede calcular por $\exp(-x/C_1)$, donde x es la posición donde se produjo el decaimiento (medida desde la superficie del sólido) y C_1 el camino libre medio de los electrones Auger dentro del sólido. De esta manera se puede dividir al sólido en capas y calcular el número de decaimientos en cada capa, luego, la suma de estos números, multiplicadas por la probabilidad de escape de los electrones debe ser proporcional a la intensidad Auger correspondiente a los decaimientos dentro del sólido (estructura ancha del pico Auger).

En forma similar, el número de átomos emitidos por el sólido con una vacancia interna será proporcional a la intensidad Auger atómica (área de los picos angostos). Comparando los resultados de la simulación con los experimentales podremos obtener información tanto de los procesos de excitación como de la transición Auger. En particular, a partir de las distribuciones de energías

y de ángulos de los átomos excitados emitidos se puede calcular la forma de los picos atómicos. Esto último será descrito en el capítulo 6.

En el apéndice 1 se presenta un listado del programa de simulación adaptado para estudiar las colisiones Ar-Al a 4 keV, y la información necesaria para la utilización del mismo.

REFERENCIAS

- 3.1 J.P. Biersack, y L.G. Haggmark, Nucl. Inst. & Methods 174 (1980) 257.
- 3.2 M.T. Robinson, I.M. Torrens, Phys. Rev. B9, 12 (1974) 5008.
- 3.3 J.P. Biersack, y W. Eckstein, Appl. Phys. A34 (1984) 73.
- 3.4 T.D. Andreadis, J. Fine, y J.A.D. Matthew, Nucl. Instr. & Methods 209/210 (1983) 495.
- 3.5 C. Benazeth, N. Benazeth, y M. Hou, Surface Sci. Lett. 151 (1985) L137.
M. Hou, C. Benazeth, N. Benazeth, y C. Mayoral, Nucl. Instr. & Methods B13 (1986) 645.
- 3.6 W.D. Wilson, L.G. Haggmark, y J.P. Biersack, Phys. Rev. B15 (1977) 2458.
- 3.7 J. Lindhard, y M. Scharff, Phys. Rev. 124 (1961) 128.
- 3.8 M.M. Jakas, y D.E. Harrison, Jr. a publicarse en Nucl. Inst. & Methods.

CAPITULO 4 - EXCITACIONES DE CAPAS INTERNAS

En este capítulo estudiaremos algunos aspectos de los procesos de excitación de capas K y L en colisiones a bajas energías de iones pesados con sólidos. Consideraremos sólo la excitación de los átomos del blanco, en la tesis de G. Zampieri⁴⁻¹ y en las referencias que se citan allí se discute la excitación del proyectil. Como ejemplo de capa K estudiaremos la excitación del Be producida por bombardeo con proyectiles de números atómicos Z_p de 4 a 10 y por Ar y Kr. Como ejemplo de capa L discutiremos la excitación de Mg y Al inducida por bombardeo con gases nobles.

4-1 CAPA K

Existen varios trabajos previos realizados a energías mayores que las que usamos nosotros y cuyos resultados serán utilizados en la discusión de los procesos de excitación. Por ello comenzaremos esta sección refiriéndonos a ellos.

Terasawa y col.⁴⁻² midieron los rayos-X de la capa K del Be emitidos durante el bombardeo de un blanco grueso de Be con proyectiles de Z_p de 1 a 18 y energías de impacto entre 15 a 600 keV. Calcularon las secciones eficaces de producción de vacancias K en Be a partir de las intensidades de rayos-X, del factor de fluorescencia del Be y del frenamiento de los proyectiles en el sólido. No consideraron en el cálculo la posibilidad de excitaciones en colisiones simétricas entre átomos del blanco. Piacentini y Salin⁴⁻³ confrontaron estos resultados con los derivados de su teoría sobre acoplamientos rotacionales entre los orbitales

moleculares (σ_m) $2p\sigma$ y $2p\pi$ en la colisión p-b. Encontraron diferencias entre la teoría y los experimentos en el caso de Ne-Be y las atribuyeron a posibles excitaciones por distribución de vacancias K-L entre los σ_m $2p\sigma$ y $3d\sigma$.

Por otro lado, Benazeth y col.⁴⁻⁴ midieron las intensidades de electrones Auger del Be bajo bombardeo de proyectiles pesados en el rango de energías de 10 a 100 keV. Estos autores encontraron secciones eficaces de excitación diferentes a las obtenidas por Terasawa⁴⁻² y las atribuyeron al valor incierto del factor de fluorescencia del Be. Estimaron la probabilidad de excitación en colisiones b-b y encontraron que era pequeña para el rango de energías y los proyectiles utilizados. Finalmente Scharnagl y Hink⁴⁻⁵ midieron los rayos-X producidos en una lámina de Be, bombardeada con proyectiles de Zp 1 a 5 y energías de 10 a 120 keV. Los datos fueron discutidos en términos de los acoplamientos rotacionales $2p\sigma$ - $2p\pi$ en la colisión proyectil-blanco (p-b) y un número determinado de vacancias iniciales en el orbital atómico (oa) 2p del proyectil.

Queda abierta la pregunta sobre los roles relativos de las colisiones b-b y p-b en la excitación del Be y la determinación de los mecanismos de excitación a energías menores que 10 keV. En este rango de energías se inicia la excitación y la medición de los umbrales de excitación puede dar información sobre los mecanismos dominantes.

En la siguiente sección presentamos las mediciones de electrones Auger del Be bombardeado con iones de Ne, Ar y Kr a 45° de incidencia y en el rango de energías de 2 a 10 keV. Posteriormente discutimos estos resultados y los obtenidos previamente por

los autores mencionados, utilizando para ello los datos calculados con el programa de Monte Carlo.

4-1-1 Resultados experimentales

Estudiando la dependencia de las intensidades Auger con la energía de los proyectiles (E_p), se puede obtener información sobre los procesos de excitación. Las intensidades, o valores representativos de las mismas, se obtienen a partir de las distribuciones de energía de los electrones tales como la que se muestra en la fig.4-1 para Ar a 4.5 keV sobre Be. Para medir la intensidad o área del pico Auger necesitaríamos restar el fondo de electrones secundarios. Esto es difícil de hacer sin cometer errores grandes, particularmente cerca del umbral de excitación, porque el fondo de electrones secundarios varía mucho y con una dependencia poco conocida con la energía y tipo de proyectil.

Como no se observan cambios en la forma del pico Auger al variar E_p y el tipo de proyectil, se puede elegir como valor representativo de la intensidad a la altura del pico Auger, medida desde la extrapolación del fondo de electrones secundarios de alta energía (fig.4-1). La altura fue medida a una energía de 98.5 eV por dos razones: 1) El máximo de la estructura Auger se encuentra aproximadamente a esta energía 2) está suficientemente cerca del borde de alta energía como para hacer la extrapolación del fondo de electrones secundarios sin riesgo de cometer errores grandes. En la zona de bajas energías resulta más difícil determinar el fondo de electrones secundarios porque allí tiene mayor

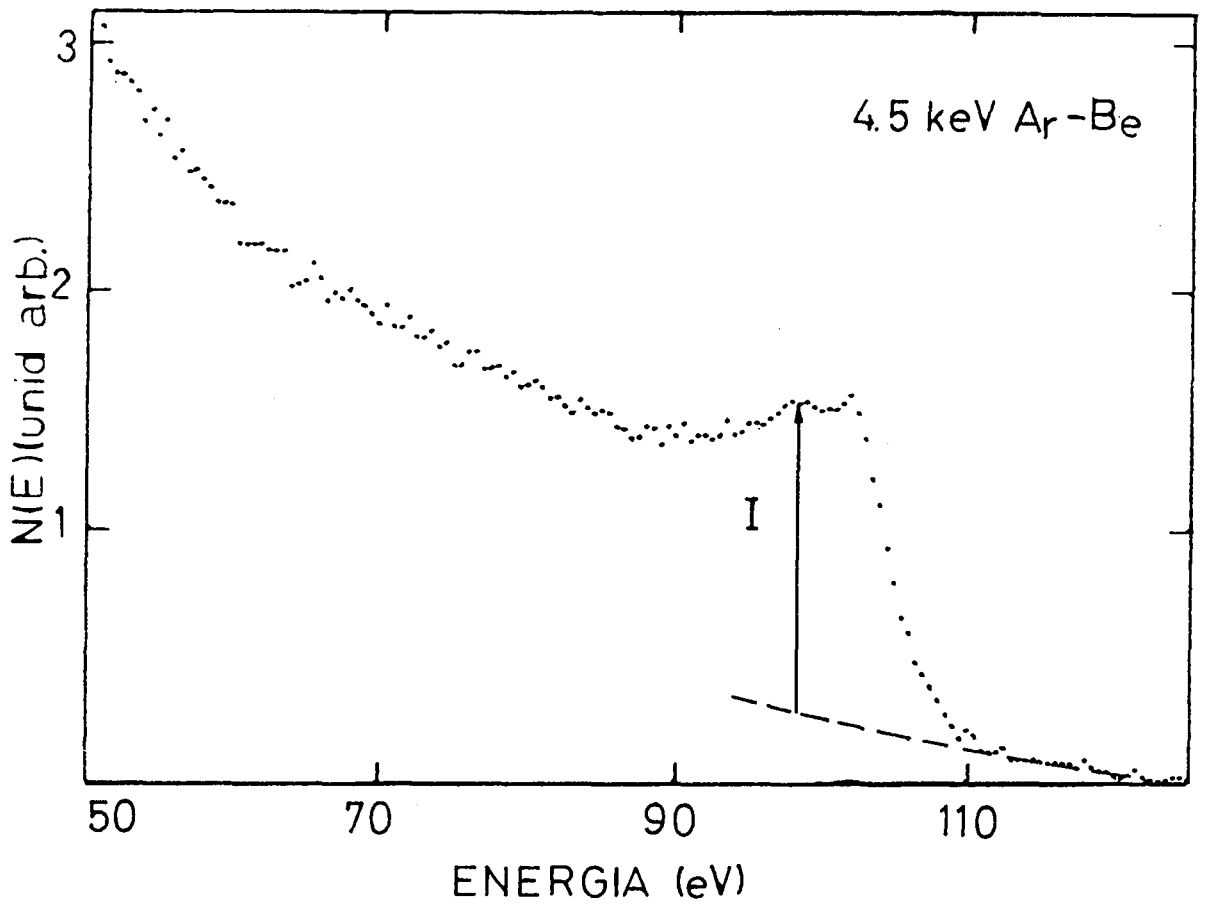


Fig.4-1: Distribución de energía de electrones emitidos durante el bombardeo de una muestra de Be con iones de Ar^+ a 4.5 keV. La línea de trazos representa la extrapolación del fondo de electrones secundarios de alta energía, I la intensidad Auger. La energía está referida al nivel de vacío de la muestra. El espectro de fue adquirido con el equipo de análisis de superficies.

pendiente y se superpone la cola de electrones Auger degradados en energía. Dado que los datos están expresados en unidades arbitrarias, el uso de otra energía cercana como medida de la intensidad Auger hubiera sido equivalente. El fondo de electrones secundarios se calculó ajustando la función $N(E)=A+B/(E-E_0)^n$ a la zona de alta energía del espectro, donde A, B, E_0 y n son los parámetros a optimizar.

En la fig.4-2 se muestran las intensidades Auger correspondientes a los tres proyectiles utilizados: Ne, Ar y Kr simple y doblemente ionizados, en función de la energía del proyectil. Se puede ver que la forma de las curvas es similar para los tres proyectiles y que las intensidades decrecen con el aumento del número atómico del proyectil. Se observó también que, dentro de los errores experimentales, las intensidades son independientes del estado de ionización del proyectil incidente.

4-1-2 Discusión

a) Excitación de la capa K del Be a energías menores que 10 keV:

Uno de los propósitos de esta sección es discutir para energías menores que 10 keV si las excitaciones del Be se producen en colisiones asimétricas, p-b, o en colisiones simétricas b-b.

Veamos que debe ocurrir si las excitaciones se producen en las colisiones p-b. En primer lugar, para los proyectiles utilizados los posibles mecanismos de excitación son diferentes. En las figs. 4-3 b, c y d se muestran los diagramas de correlación

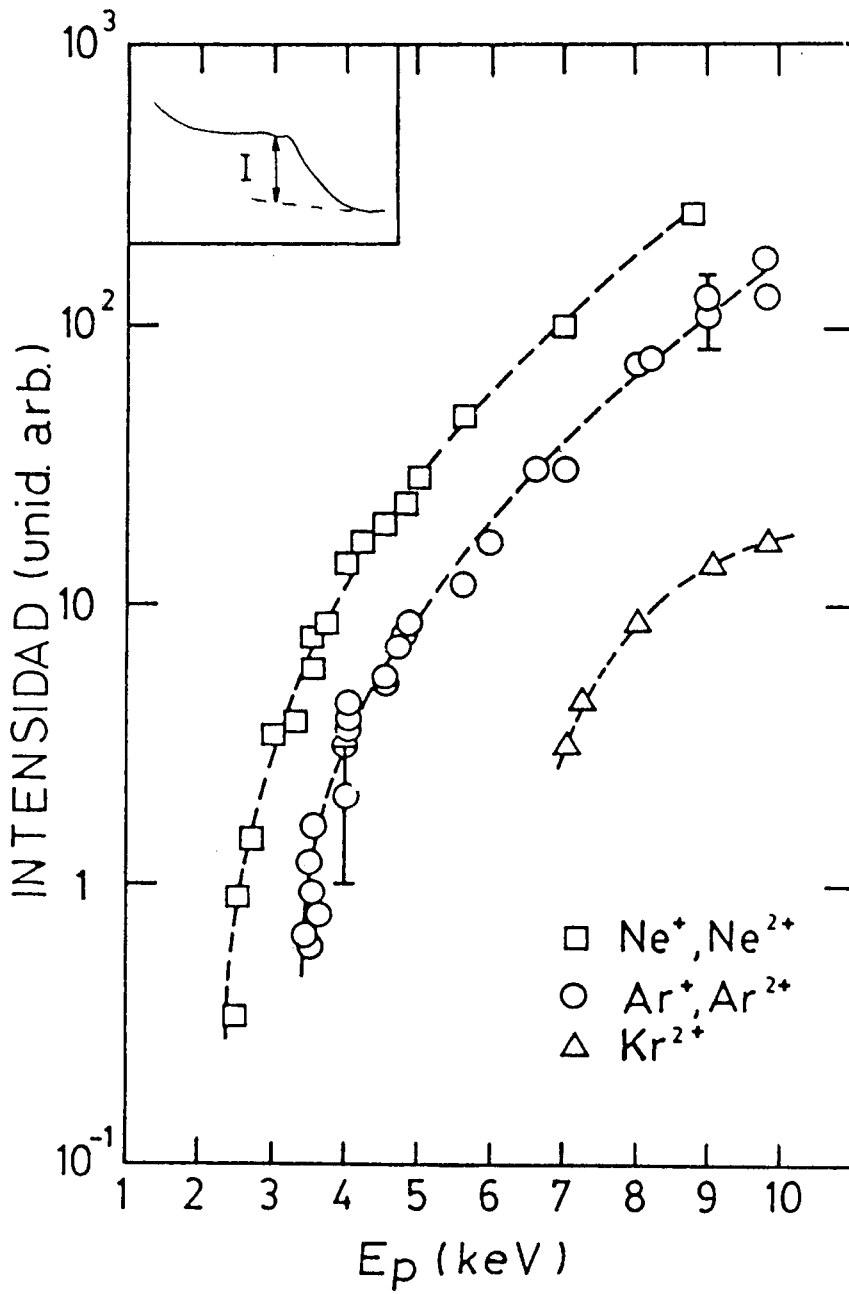


Fig.4-2: Intensidades Auger experimentales del Be en función de la energía de los proyectiles, y barras de error típicas.

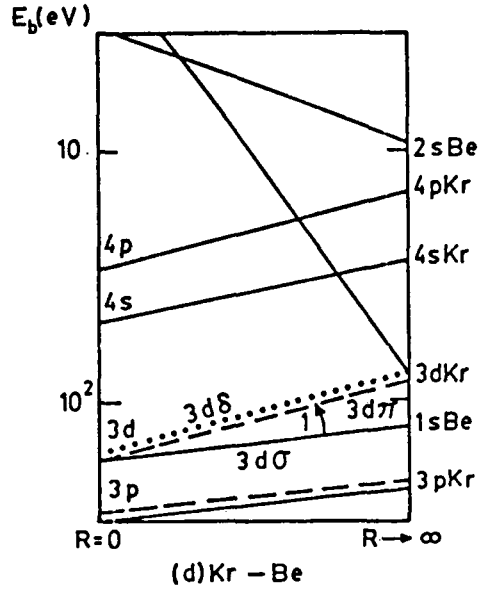
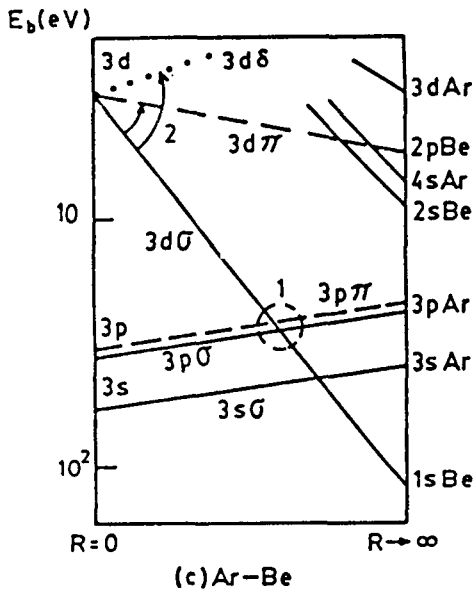
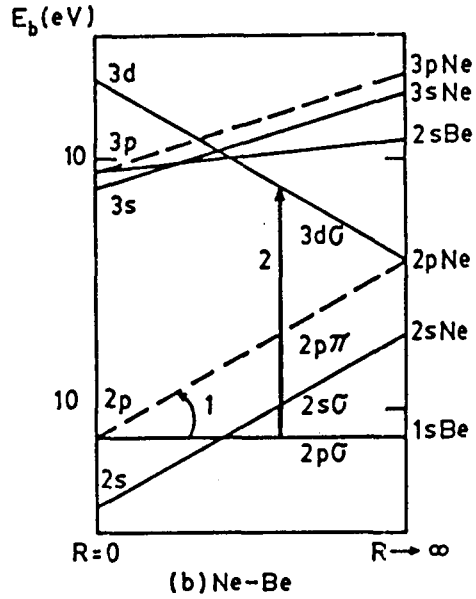
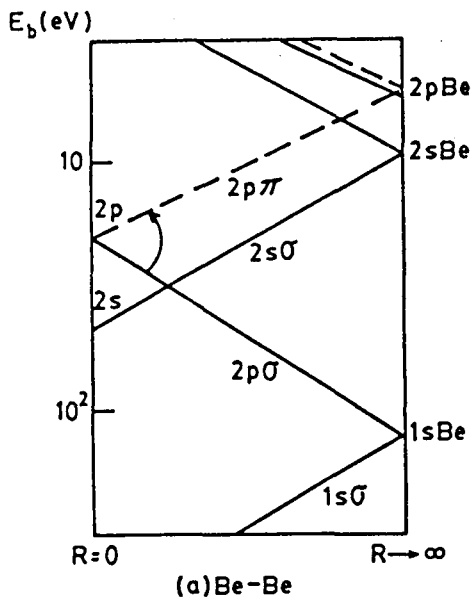


Fig.4-3: Diagramas de correlación para los sistemas a) Be-Be, b) Ne-Be, c) Ar-Be y d) Kr-Be. Los posibles mecanismos de excitación de la capa K del Be están indicados por flechas y círculos.

correspondientes a los sistemas colisionantes, contruidos siguiendo las reglas de Barat-Lichten⁴⁻⁶. Allí se puede ver que las vacancias de la capa K del Be se podrían producir por a) Ne-Be: acoplamiento rotacional $2p\sigma-2p\pi$ y distribución de vacancias K-L entre los om $2p\sigma$ y $3d\sigma$, b) Ar-Be: promoción del om $3d\sigma$ y acoplamiento rotacional $3d\sigma-3d\pi-3d\delta$ y c) Kr-Be: acoplamiento rotacional entre los om $3d\sigma-3d\pi-3d\delta$ luego de producirse una vacancia en el oa 3d del Kr por promoción del om $4f\sigma$. Para que estos mecanismos sean posibles es necesario que en el momento de la colisión de excitación haya al menos una vacancia en los orbitales externos del proyectil. El hecho que no se produzcan saltos en las intensidades Auger al cambiar el estado de carga de los proyectiles antes de entrar al sólido, está de acuerdo con observaciones previas que sugieren que los proyectiles se neutralizan al llegar a la superficie.⁴⁻¹ Habría que encontrar entonces un mecanismo que explique la presencia de la vacancia en las capas externas del proyectil para hacer posibles los acoplamientos indicados en a), b) y c).

Discutamos ahora la posibilidad de excitación en colisiones b-b. El mecanismo de excitación sería, fig.4-3, el acoplamiento rotacional entre los om $2p\sigma-2p\pi$. En este caso siempre hay vacancias en el om $2p\pi$, las cuales pueden ser transferidas al $2p\sigma$ si se alcanzan distancias de acercamiento suficientemente pequeñas.⁴⁻⁷

En las colisiones simétricas, además de considerar el mecanismo de acoplamiento, se debe considerar si la energía transferida por los proyectiles a los átomos de Be es suficiente para que en una colisión posterior se produzca excitación de la capa

K. La máxima energía que un proyectil puede transferir a un átomo del blanco es γE_p , donde $\gamma = 4 M_p M_t / (M_p + M_t)^2$ (M_p y M_t son las masas del proyectil y del blanco respectivamente). En trabajos anteriores, realizados a energías cercanas al umbral de excitación, se ha mostrado que cuando dominan las colisiones b-b las intensidades Auger graficadas en función de γE_p , resultan independientes del tipo de proyectil.⁴⁻⁹ La fig.4-4 muestra las mismas intensidades de la fig.4-2 graficadas en función de γE_p . Ahora, dentro de los errores experimentales, los datos para los tres proyectiles coinciden y tienden hacia una misma energía umbral de ~ 2 keV. Este valor de energía umbral está en buen acuerdo con el valor, 2.2 keV, que predice la teoría para acoplamientos rotacionales $2p\sigma \rightarrow 2p\pi$ en colisiones Be-Be.⁴⁻⁷

Usando un potencial interatómico de Moliere⁴⁻¹⁰ calculamos, para la energía umbral medida, la distancia de acercamiento máximo (R_c) entre los dos átomos de Be. El valor obtenido, $R_c \sim 0.28$ u.a., es menor que la suma de los radios medios de la capa K del Be (~ 0.54 u.a.), tal como se debería esperar para acoplamientos rotacionales.

La preponderancia de las colisiones b-b en la excitación del Be a energías debajo de 10 keV, está en desacuerdo con las suposiciones previas⁴⁻²⁻⁵ que las excitaciones a energías mayores que 10 keV se producen en las colisiones p-b. Resulta entonces interesante estudiar cuando las colisiones p-b comienzan a ser más importantes que las b-b, y cómo depende este efecto de la energía y el número atómico de los proyectiles.

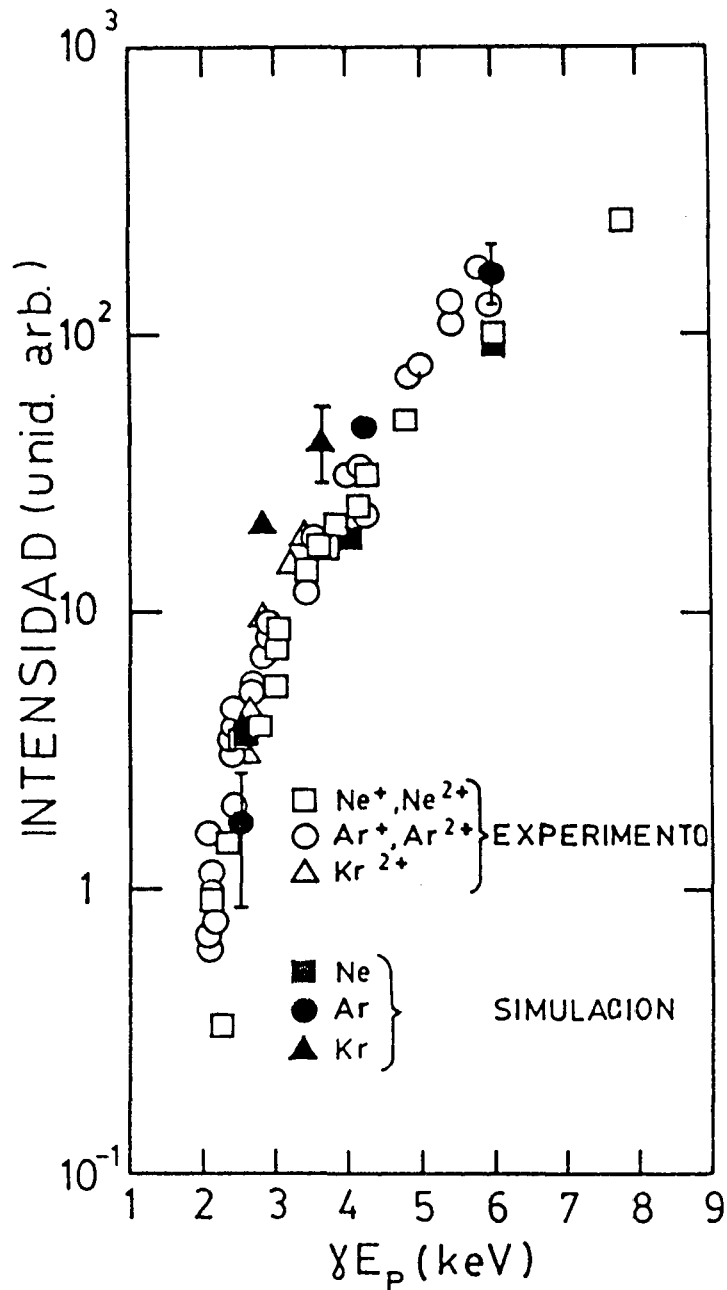


Fig.4-4: Intensidades Auger experimentales del Be en función de la máxima energía que un proyectil transfiera a un átomo de Be (γE_p). Los símbolos llenos corresponden a la simulación por Monte Carlo de los eventos de excitación en colisiones t-t, normalizados a $E_p = 6$ keV. Las barras representan los errores estadísticos típicos de la simulación.

b) Excitación de la capa K del Be a energías mayores que 10keV:

Para discutir los procesos de excitación de la capa K del Be a energías mayores que 10 keV utilizaremos los resultados previos (Ref. 4.2,4.5) de secciones eficaces de producción de rayos-X (σ_x). En la fig.4-5 se muestran los valores de σ_x para proyectiles de Zp de 4 a 10, en el rango de energías de 15 a 80 keV. Como se dijo anteriormente, en estos trabajos se consideró que las vacancias eran producidas, en todo el rango de Ep, en colisiones asimétricas y no se tuvo en cuenta la posibilidad de excitaciones en colisiones b-b. En la fig.4-5 las secciones eficaces aparecen ordenadas, salvo para el Ne, en forma decreciente con el aumento de Zp. Este efecto está en aparente acuerdo con a) un radio medio de capa K más reducido y una mayor repulsión Coulombiana, y b) una disminución del número de vacancias en el oa 2p del proyectil, a medida que aumenta Zp.

Para todos los proyectiles indicados en la fig.4-5 σ_x está dada por $\sigma_x = W N_{nr} \sigma_{rot}$, donde W es el factor de fluorescencia del Be, N_{nr} el número inicial de vacancias en el om 2p_{nr} y σ_{rot} la sección eficaz de acoplamiento rotacional 2p σ -2p π . La mayor sección eficaz para el Ne fue atribuida a posibles acoplamientos de distribución de vacancias entre los om 2p σ -3d σ .⁴⁻³

Si las excitaciones ocurren en colisiones p-b, debería obtenerse el mismo ordenamiento de σ_x cuando se trabaja en las unidades reducidas de Taulbjerg y col.⁴⁻⁷ (sección 1-1). Esto debe ser así porque en estas unidades σ_{rot} es independiente de Zp y solamente influiría la disminución de N_{nr} con el aumento de Zp.

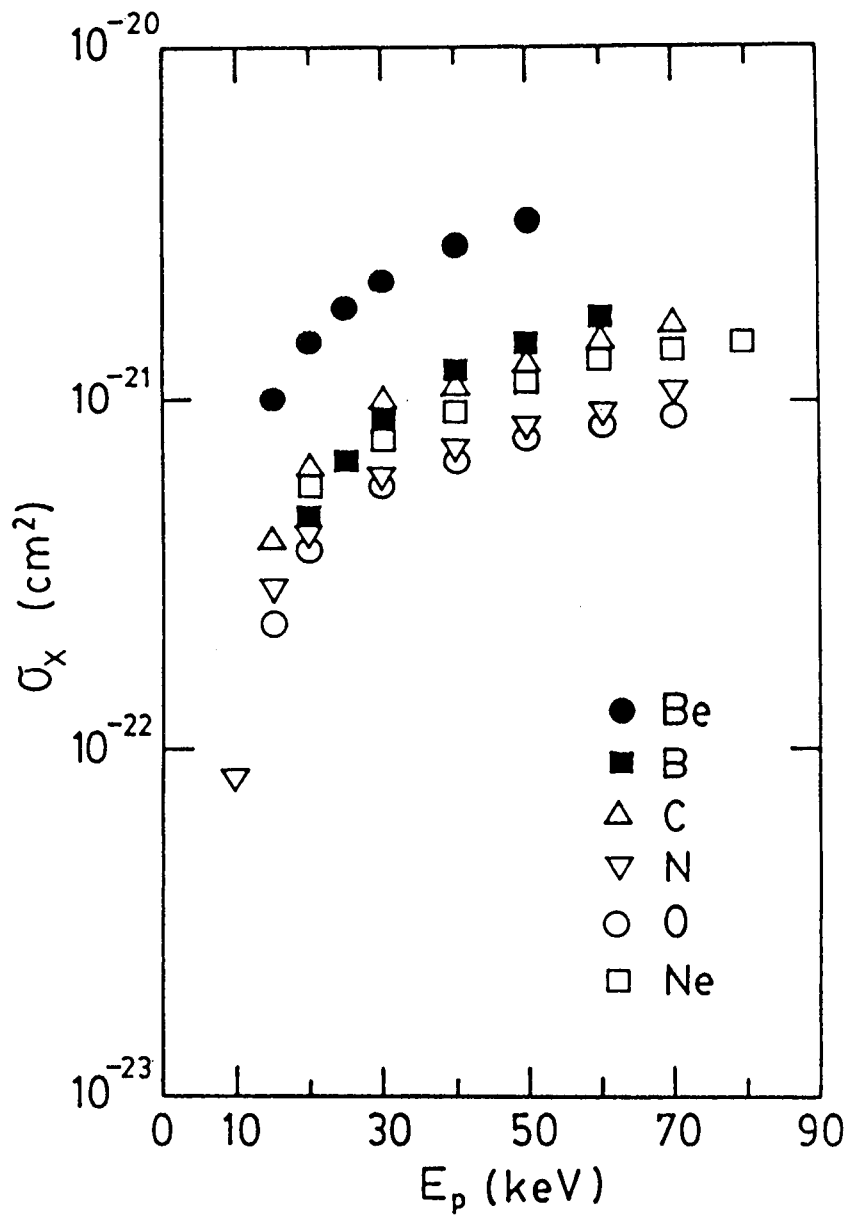


Fig.4-5: Secciones eficaces de producción de rayos-X (σ_x) en función de la energía de los proyectiles, obtenidas por Terasawa (Ref.4.2; C, N, O, Ne), y Scharnagal (Ref.4.5; Be, B).

En la fig.4-6 se muestran las secciones eficaces de producción de rayos-X en función de las velocidades de los proyectiles en unidades reducidas (ur). Se puede ver en esta figura que se ha invertido el orden para velocidades de los proyectiles menores que 0.1 ur, los proyectiles más pesados tienen ahora secciones eficaces σ_x mayores (0.1 ur corresponde a 40 keV para B, 76 keV para N y 175 keV para Ne). Este resultado parece indicar que las excitaciones no se pueden atribuir solamente a las colisiones p-b; se deberá incluir la posibilidad que haya excitaciones en colisiones b-b, aún en este rango de energías.

Para separar las contribuciones provenientes de las colisiones de excitación p-b y b-b utilizaremos el programa de Monte Carlo discutido en el capítulo 3.

c) Simulación por Monte Carlo:

En primer lugar utilizaremos el programa para reproducir la dependencia de las intensidades Auger del Be con E_p , en las colisiones con Ne, Ar y Kr a $E_p < 10$ keV. En este caso hemos considerado que las excitaciones ocurren principalmente en las colisiones simétricas. No podemos estimar la creación de vacancias en colisiones p-b con proyectiles de Ar o Kr, porque no se conocen modelos apropiados para describir las excitaciones en esos sistemas. En cambio, conociendo la energía y el parámetro de impacto (elegido al azar) en cada colisión b-b se puede calcular la probabilidad de acoplamiento rotacional $2p\sigma - 2p\pi$, σ_{rot} (ver apéndice). Además, conociendo la posición donde se produjo la excitación, x , se puede estimar la probabilidad de escape del electrón

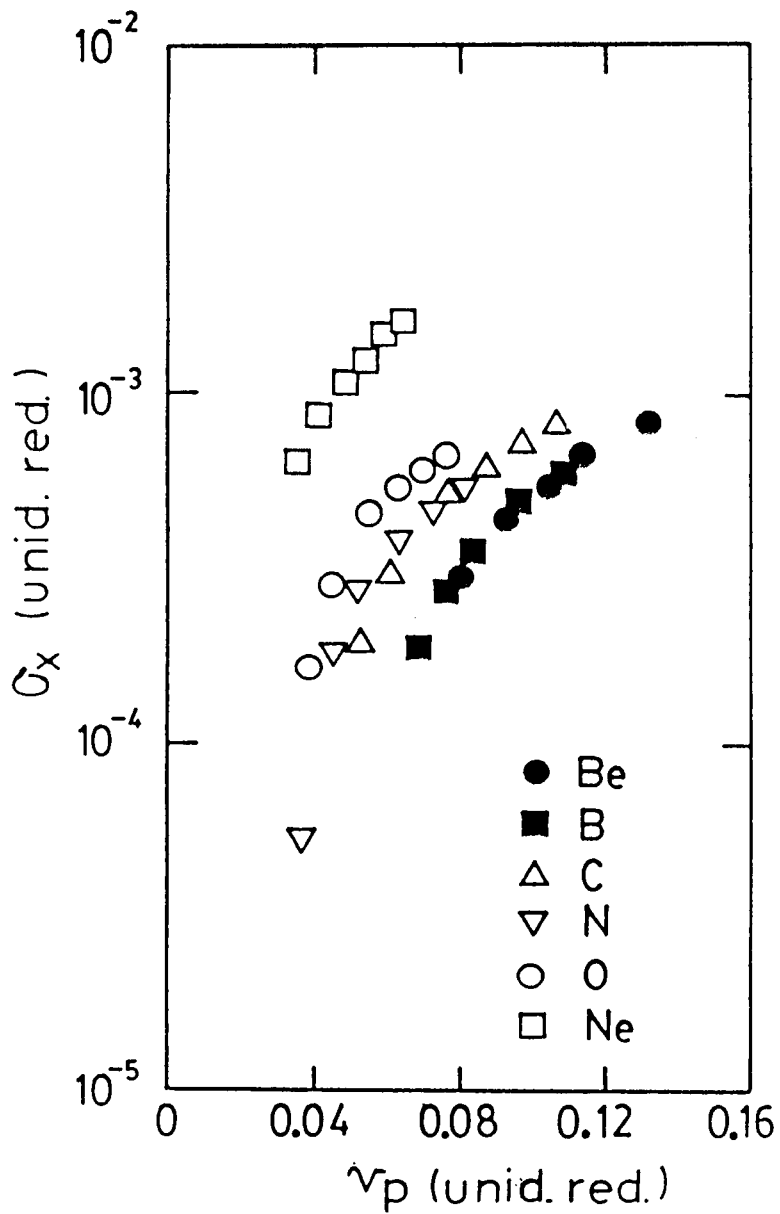


Fig.4-6: Secciones eficaces de producción de rayos-X (Ref.4.2 y Ref.4.5) en función de la velocidad del proyectil, en unidades reducidas de Taulbjerg y col. (Ref.4.7).

Auger mediante $\exp(-x/C_1)$, siendo $C_1 = 6.1 \text{ \AA}$, el camino libre medio para electrones de 100 eV en Be.⁴⁻¹¹ Finalmente con σ_{rot} y la probabilidad de escape de los electrones se pueden obtener valores proporcionales a las intensidades Auger. Debemos mencionar aquí que en la simulación no hemos considerado el movimiento del átomo durante el tiempo que transcurre desde que se excita hasta que decae. Esto podría modificar los valores absolutos de las intensidades Auger, pero, como en nuestro caso estamos comparando sólo las dependencias con E_p y en unidades arbitrarias, es de esperarse que no altere apreciablemente las conclusiones. En la simulación de la emisión de rayos-X, que poseen longitudes de escape mucho mayores que los electrones, este efecto es aún menos importante.

En la fig.4-4 se comparan los resultados de la simulación con las intensidades Auger experimentales, normalizados para Ar a 6 keV. Se puede ver allí que considerando solamente las colisiones b-b, los datos experimentales son reproducidos (dentro de los errores estadísticos y experimentales) en todo el rango de energía de los proyectiles.

En el sistema Ne-Be no hay excitaciones en colisiones p-b a energías menores que 10 keV por dos razones: 1) la energía umbral para acoplamiento rotacional es $\sim 15 \text{ keV}^{4-7}$ y 2) la distribución de vacancias K-L es extremadamente improbable en este rango de energías, comenzando a ser competitivo con el acoplamiento rotacional recién a $E_p \sim 100 \text{ keV}$. De la misma manera, el acoplamiento rotacional $3d\sigma-3d\pi-3d\delta$ en colisiones Ar-Be requiere energías considerablemente mayores que las usadas en nuestros experimentos.⁴⁻⁴

Para simular las mediciones de rayos-X^{4-2.4-5} utilizamos un tratamiento similar, con una probabilidad de escape de los rayos-X igual a la unidad. En las colisiones de Be, B, C, N, O y Ne sobre Be calculamos N_{pb} y N_{bb}, el número de vacancias producidas en colisiones p-b y b-b respectivamente, suponiendo que existe una vacancia inicial en el $2p\pi$.

En la fig.4-7 mostramos los cocientes N_{pb}/N_{bb} para E_p=20 keV y diferentes Z_p. La fuerte dependencia con Z_p puede entenderse cualitativamente como el resultado de dos efectos: 1) los proyectiles más pesados desplazan una mayor cantidad de átomos del blanco que los proyectiles más livianos, aunque la máxima energía que pueden entregar es menor,^{4.12} 2) A bajas energías la sección eficaz de acoplamiento rotacional $2p\sigma-2p\pi$ decrece rápidamente con el aumento de Z_p.

Por otro lado, los cocientes N_{pb}/N_{bb} aumentan rápidamente con la energía, tal como se muestra en la fig.4-8. Esto es consecuencia de varios factores: 1) La dependencia de σ_{rot} con la energía, 2) el desplazamiento de átomos blancos más energéticos a medida que aumenta E_p, y 3) la dependencia del número total de blancos desplazados con E_p.

Encontramos también que la profundidad media donde ocurren las colisiones de excitación b-b es algo mayor que aquella donde ocurren las p-b y ambas profundidades crecen al aumentar E_p. Esto no es importante cuando se observan rayos-X, los cuales poseen longitudes de escape grandes comparadas con las profundidades medias donde se producen las excitaciones, pero puede ser significativo cuando se observan electrones Auger ya que poseen longi-

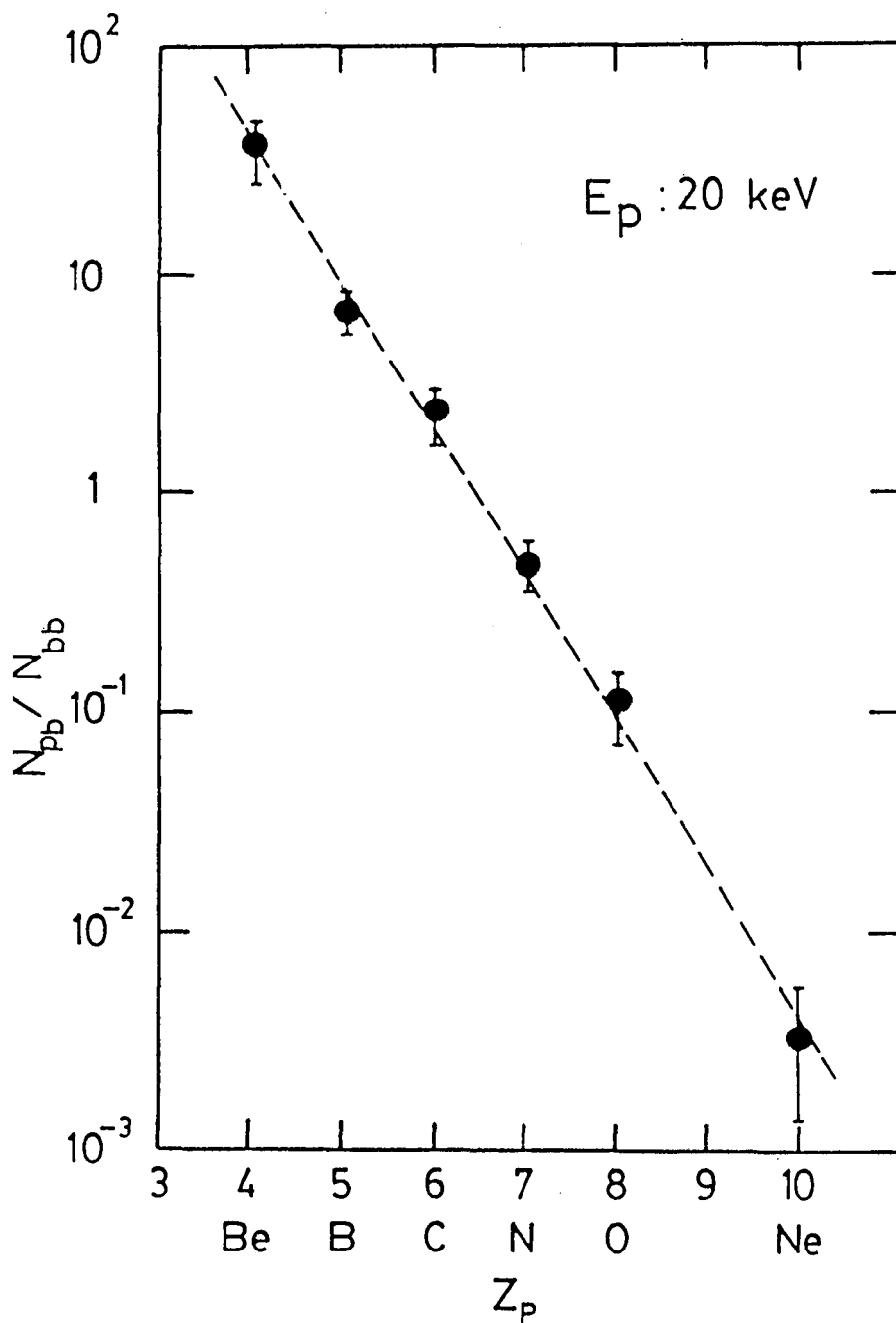


Fig.4-7: Cocientes calculados (N_{pb}/N_{bb}) entre los números de vacancias producidas en colisiones p-b y las producidas en colisiones b-b, normalizadas a una vacancia inicial en el $\text{om } 2p\pi$, en función del número atómico del proyectil, Z_p . Las barras representan el error estadístico de la simulación, la línea fue dibujada para guiar el ojo.

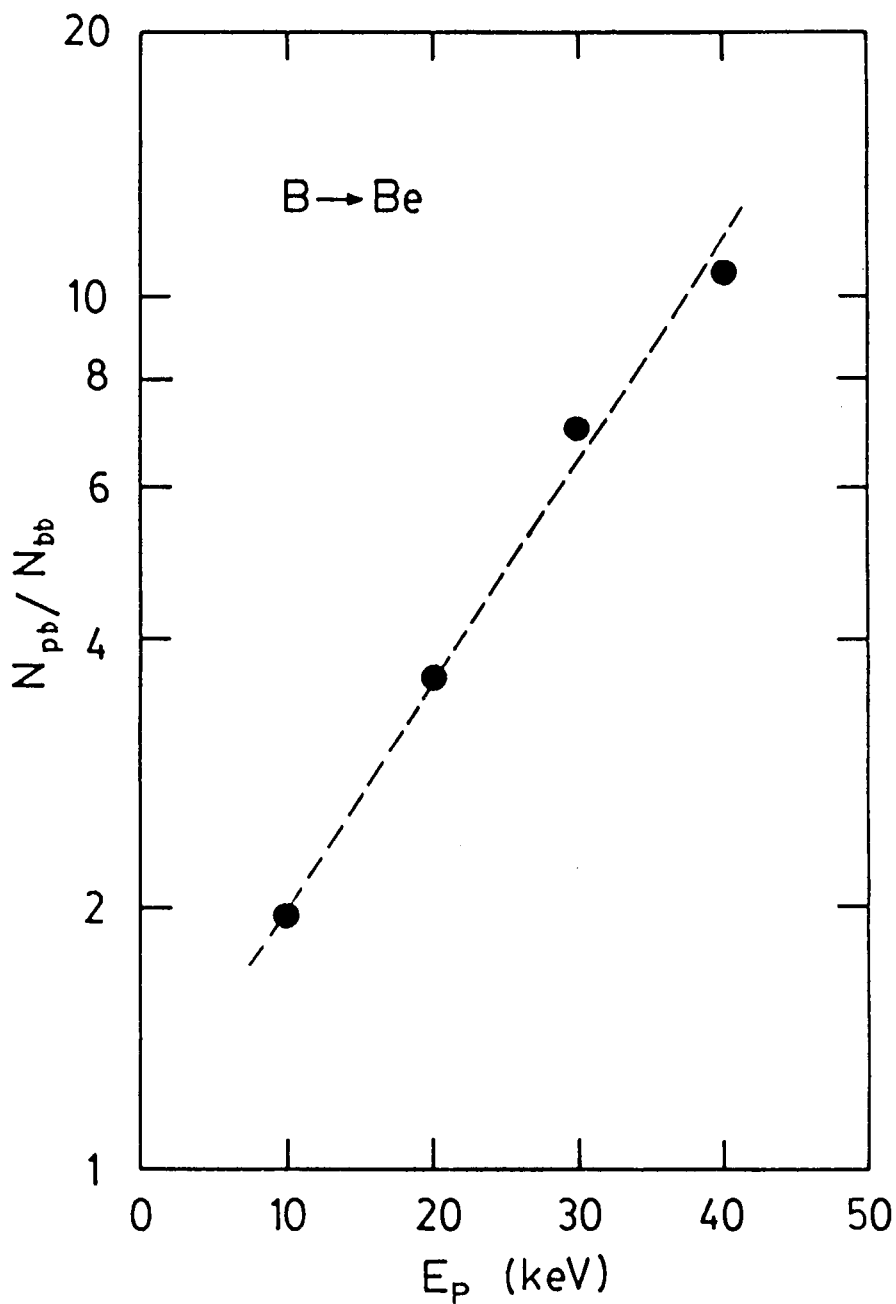


Fig.4-8: Cocientes calculados (N_{pb}/N_{bb}) entre los números de vacancias producidas en colisiones p-b y las producidas en colisiones b-b, normalizadas a una vacancia inicial en el $2p_{pr}$, en función de la energía de los proyectiles de B.

tudes de escape mucho menores.

La intensidad total de producción de rayos-X, Y^* , se puede escribir como la suma de las contribuciones de las colisiones p-b y b-b:

$$Y^* = Y^*_{pb} + Y^*_{bb} = W N_{\pi}(p) N_{pb} + W N_{\pi}(Be) N_{bb},$$

donde W es el factor de fluorescencia del Be y $N_{\pi}(p)$ ($N_{\pi}(Be)$) el número inicial de vacancias en el $om\ 2p\pi$ en la colisión de excitación asimétrica (simétrica).

Para comparar los resultados de la simulación con los experimentales se necesitarían los valores de W , N_{π} y sus variaciones con E_p , los que no son conocidos hasta el presente. En particular la dependencia de W con E_p ha sido estudiada en algunos sistemas colisionantes.⁴⁻¹³⁻¹⁵ En el caso de excitaciones de la capa K en colisiones Ne-Ne, W aumenta con la energía del proyectil y muy rápidamente cerca del umbral de excitación.

Si los proyectiles fuesen neutros dentro del sólido la teoría predice,⁴⁻¹⁶ en el límite de bajas velocidades, los siguientes números de vacancias iniciales en el $om\ 2p\pi$: $N_{\pi}(Be)=2$, $N_{\pi}(p)=5/3, 4/3, 1, 2/3$ y 0 para B, C, N, O y Ne, respectivamente. En experimentos de creación de vacancias en capa K en otros sistemas livianos y en nuestro rango de energías, se han encontrado valores de N_{π} mucho menores que los que predice la teoría.⁴⁻¹⁷ Se ha observado también que estos valores aumentan ligeramente con el aumento de la velocidad.

Aunque no se conozcan los valores de N_{π} y W , se puede obtener información de los casos límites, aquellos donde dominan las colisiones p-b o las b-b. Por la fig.4-7 podemos concluir que

cuando se usa Be como proyectil, las colisiones secundarias crean a lo sumo un pequeño porcentaje de las vacancias. Luego $Y^* \sim Y^*_{pb}$. Por el contrario, en el caso de proyectiles de Ne las excitaciones son producidas preferentemente en colisiones b-b, $Y^* \sim Y^*_{bb}$. Esto es así porque $N_{bb} \gg N_{pb}$ y, como hemos mencionado arriba, se puede esperar que $N_{rr}(Be)$ sea mayor que $N_{rr}(p)$. Por lo tanto, para estos dos proyectiles se puede obtener información acerca de la variación de $W \cdot N_{rr}$ del Be con la energía del proyectil, a partir de los cocientes R entre los datos experimentales y los calculados, donde:

$$R = \frac{Y^*_{exp}}{W_0 N_{pb} (N_{bb})} = N_{rr}(Be) W/W_0$$

para los sistemas Be-Be (Ne-Be). Aquí Y^*_{exp} es el valor experimental de las intensidades totales de producción de rayos-X⁴⁻⁵ y $W_0 = 3 \times 10^{-4}$ el factor de fluorescencia del Be medido por impacto de electrones.⁴⁻¹⁰

En la fig.4-9 se muestra la dependencia de R con la energía de impacto media $\langle E \rangle$ a la cual se producen las colisiones de excitación. Estos valores de $\langle E \rangle$ fueron obtenidos mediante el programa de Monte Carlo. Se ve que existe un muy buen acuerdo entre los datos del Be y los del Ne, lo cual confirma la hipótesis que en ambos casos las excitaciones se producen en las colisiones simétricas Be-Be.

También se muestra en la fig.4-9 los resultados para el sistema B-Be, suponiendo que las colisiones p-b dominan la producción de vacancias (ver fig.4-7). Aquí resulta $R \sim N_{rr}(B) W/W_0$ y

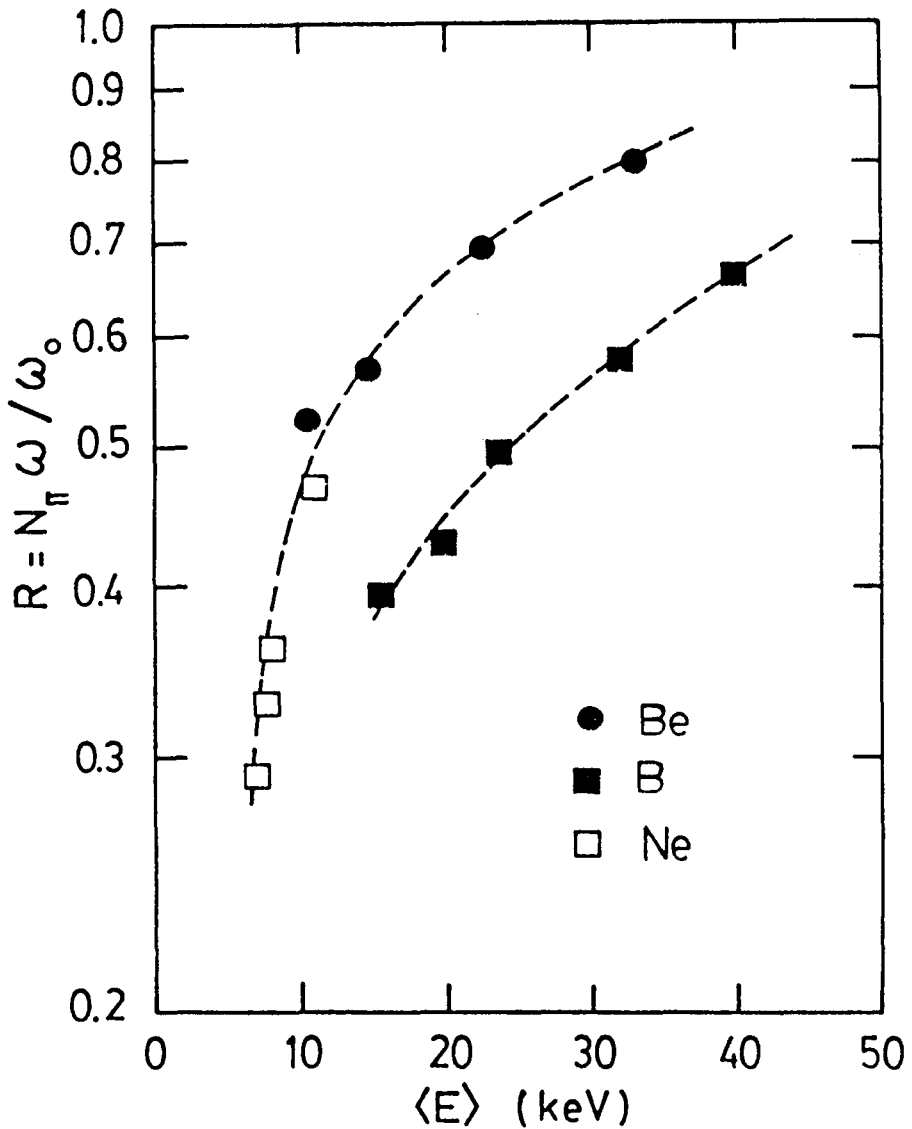


Fig.4-9: Cociente $R = N_{\pi} \omega / \omega_0$ entre las intensidades de rayos X medidas y calculadas en función de la energía de impacto a la cual se produce la colisión de excitación $\langle E \rangle$. Los datos experimentales fueron tomados de los trabajos de Terasawa (Ref.4.2) y Scharnagl (Ref.4.5). N_{π} es el número de vacancias en el $2p\pi$, $\omega_0 = 3 \times 10^{-4}$ el factor de fluorescencia del Be medido por impacto de electrones y ω el factor correspondiente al bombardeo con iones.

lo único que cambia respecto de los sistemas Be-Be y Ne-Be es el valor de N_{π} , que debe ser menor para B que para Be. Aunque la aproximación $Y^{\pi} \sim Y^{\pi}_{\text{Be}}$ no es tan buena como en el caso de Be-Be,

los cocientes $N_{\text{K}}(\text{Be})/N_{\text{K}}(\text{B})$, para distintos valores de $\langle E \rangle$, ~ 1.4 , están cercanos al valor teórico de 1.2 que se calcula del modelo de distribución estadística de vacancias 2pr.^{4-16}

Como N_{K} debe ser aproximadamente constante a bajas energías, se piensa que la variación de R cerca del umbral de excitaciones se debe a una disminución de W , similar a la encontrada previamente en colisiones Ne-Ne.^{4-17}

4.1.3 Conclusiones

Podemos resumir las conclusiones obtenidas para la excitación de la capa K del Be en la forma siguiente:

1) En el rango de energías bajas, algunos keV, las excitaciones se producen principalmente en colisiones simétricas entre átomos de Be en la cascada de colisiones. La dependencia de las intensidades Auger con la energía y tipo de proyectil pueden ser reproducidas por simulaciones de Monte Carlo, suponiendo que las excitaciones ocurren por acoplamiento rotacional $2p\sigma-2p\pi$. Se necesita una energía umbral de 1 keV, en el sistema centro de masa, para alcanzar las distancias internucleares donde este acoplamiento comienza a ser efectivo.

2) Se discutieron resultados previos sobre la emisión de rayos-X del Be bombardeado por proyectiles pesados. Se encontró que estos resultados están fuertemente afectados por los procesos de excitación que ocurren en la cascada de colisiones generada por el proyectil.

3) Se extendió a blancos sólidos la observación de la fuerte dependencia del factor de fluorescencia con la energía del proyectil, cerca del umbral de excitación.

En este diagrama se ve que si en la colisión se alcanzan distancias de acercamiento menores que ~ 1 u.a., entonces puede producirse la excitación de la capa L de uno de los dos átomos de Al por promoción del $om\ 4f\sigma$. Si las vacancias se originan en las colisiones p-b habrá que analizar en cada sistema colisionante cuál es el mecanismo de excitación y a qué energía del proyectil comienza a ser efectivo.

Existen varios trabajos realizados a energías de los proyectiles cercanas al umbral de excitación.^{4.8-9,4.22-23} En estos trabajos se encontró que los datos experimentales se pueden explicar correctamente suponiendo que las excitaciones ocurren en las colisiones simétricas. A energías más altas las excitaciones fueron atribuidas^{4.20,4.24-25} a colisiones p-b. Más aún, fueron observadas excitaciones de capa L en colisiones asimétricas en fase gaseosa en el rango de energías de 35 a 600 keV.^{4.26-27}

Nosotros adquirimos espectros Auger del Mg bombardeado por iones nobles a energías entre 0.5 y 10 keV y comparamos las intensidades Auger con las correspondientes para el Al.^{4.9} Luego adaptamos el programa de Monte Carlo para estudiar las distribuciones de las posiciones de excitación y de los decaimientos Auger en colisiones Ar-Al. La comparación de las intensidades Auger experimentales con los datos de la simulación nos permitió estimar el rango de energías donde las colisiones asimétricas Ar-Al empiezan a producir una cantidad significativa de excitaciones.

4-2-1 Resultados experimentales:

En la fig.4-11 se muestra un espectro Auger típico del Mg obtenido por bombardeo con iones de Ar a 4.5 keV. Nuevamente resulta difícil separar el espectro Auger del fondo de electrones secundarios cerca del umbral de excitación, con lo cual las intensidades Auger totales son difíciles de obtener. Sin embargo, se puede obtener información de los mecanismos de excitación a partir de las áreas de los picos atómicos y sus variaciones con la energía y tipo de proyectil. Como estos picos son más angostos, típicamente de 1 o 2 eV de ancho a mitad de altura, son relativamente más fáciles de separar del resto del espectro. Se debe tener presente que el origen de los picos atómicos (decaimientos afuera del sólido) es diferente que el de las estructuras anchas (decaimientos dentro del sólido) y estas estructuras pueden tener diferentes dependencias con la energía, con el ángulo de incidencia de los proyectiles y con el ángulo de observación de los electrones (ésto será discutido en el capítulo 6)

En la fig.4-12 se presentan resultados previos^{4,7} de las intensidades Auger atómicas del Al en función de la energía de los proyectiles, a, y en función de la máxima energía que los proyectiles pueden transferir a los átomos del blanco, b. Se ve en la fig.4-12 b que los proyectiles más pesados originan intensidades Auger que tienden a una energía umbral común de ~ 0.9 keV, mientras que el He y el Ne poseen comportamientos diferentes

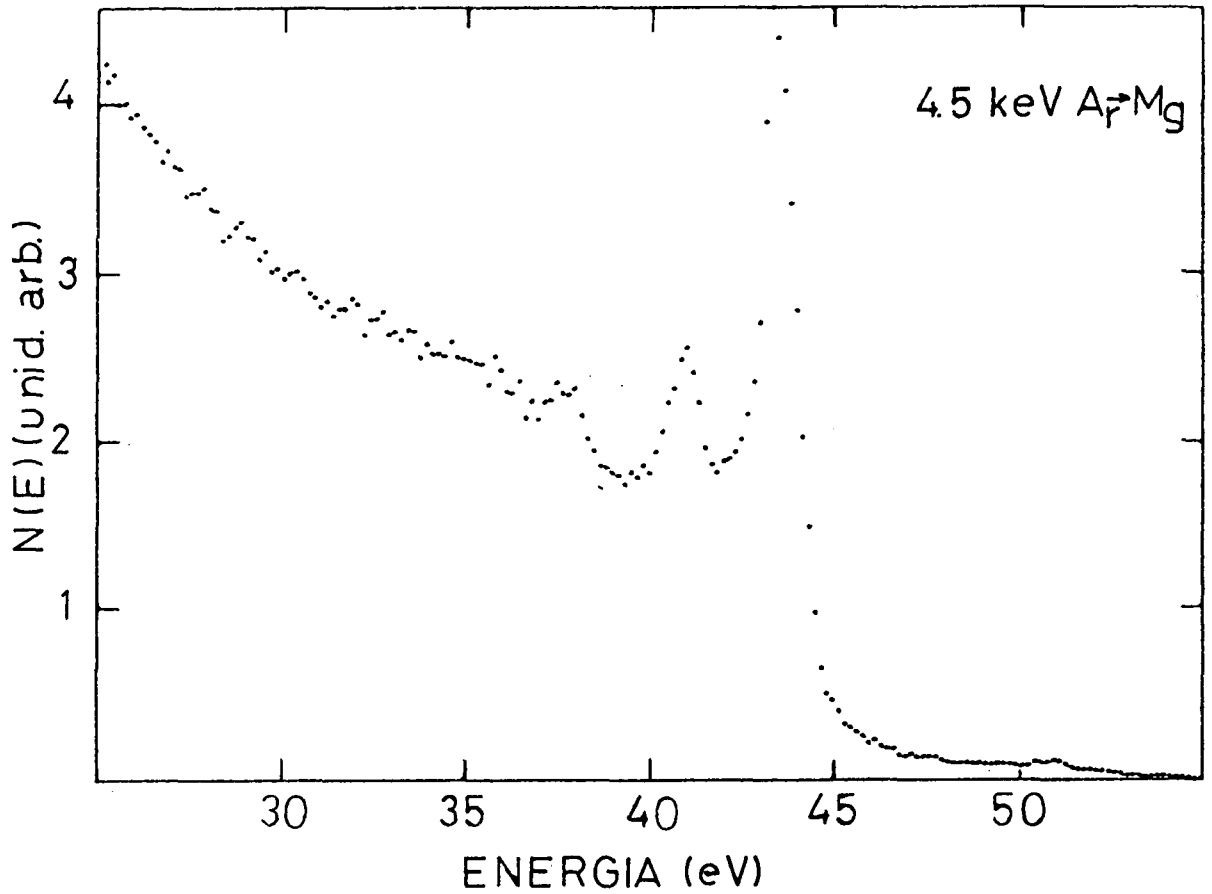


Fig.4-11: Distribución de energía de los electrones emitidos durante el bombardeo de una muestra de Mg con iones de Ar a 4.5 keV. El espectro fue adquirido con el equipo de análisis de superficies.

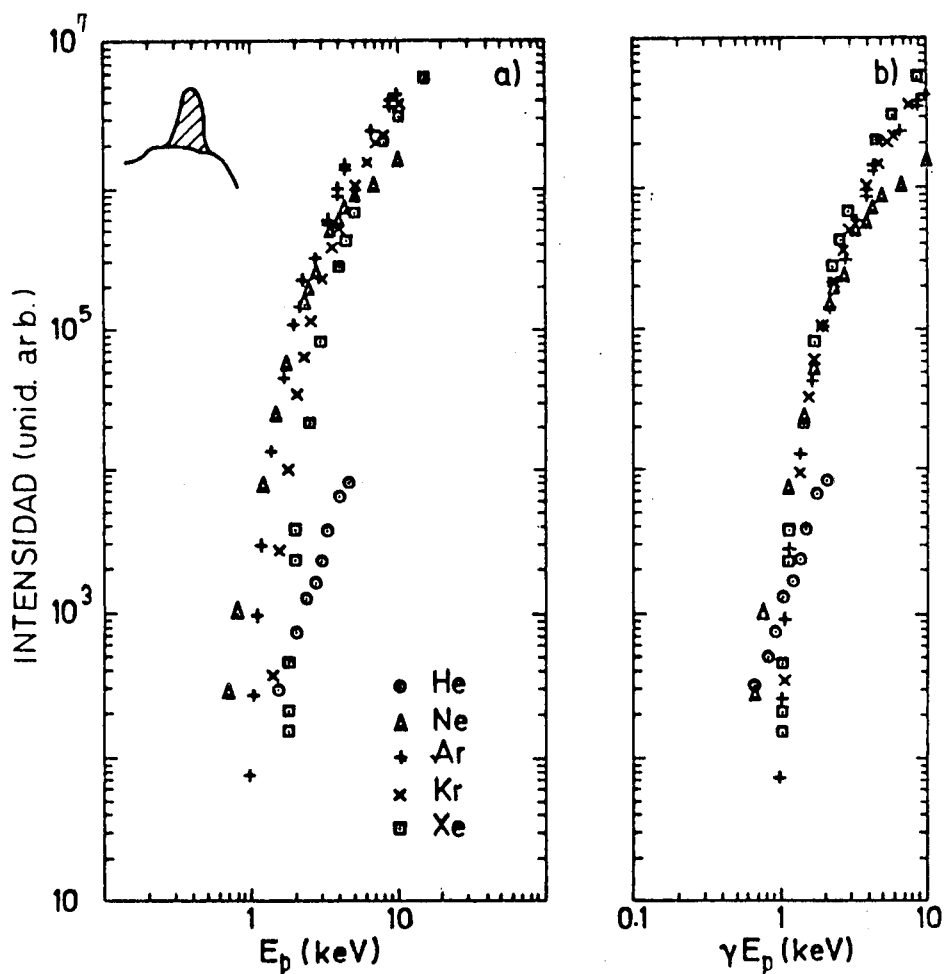


Fig.4-12: Intensidades Auger de la línea principal del Al en función a) de la energía del proyectil, E_p , y b) de la máxima energía transferida en la colisión proyectil-Al (Ref.4.9).

En las figs.4-13 a y b se muestran resultados similares para un blanco de Mg. Aquí los proyectiles más pesados, incluyendo el Ne, dan intensidades que tienden a una energía umbral de ~ 0.5 keV y nuevamente el He presenta un comportamiento ligeramente diferente al de los demás proyectiles.

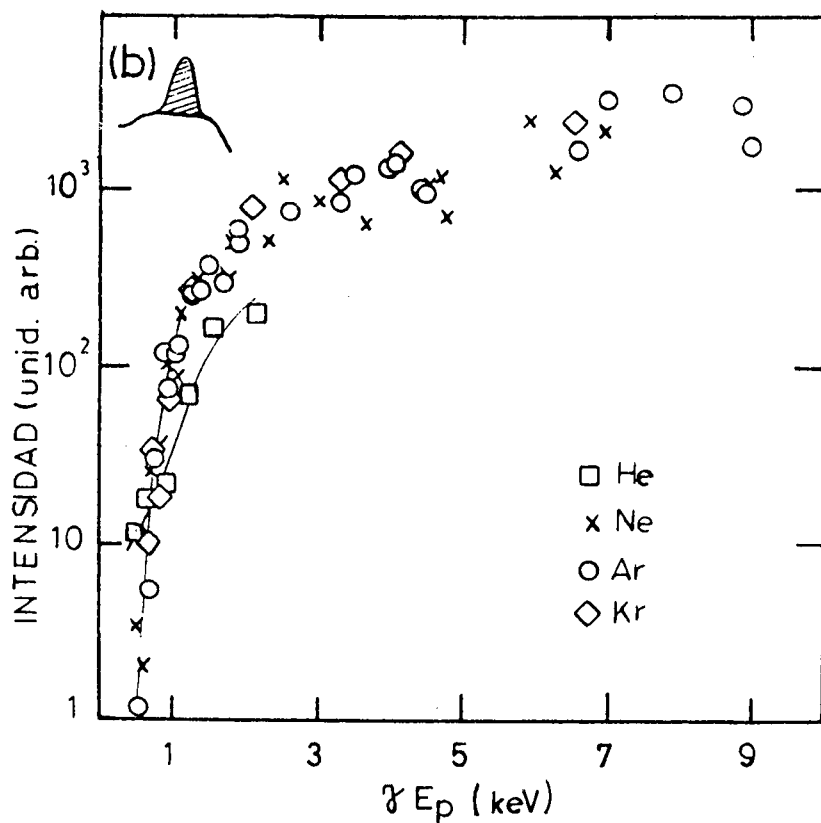
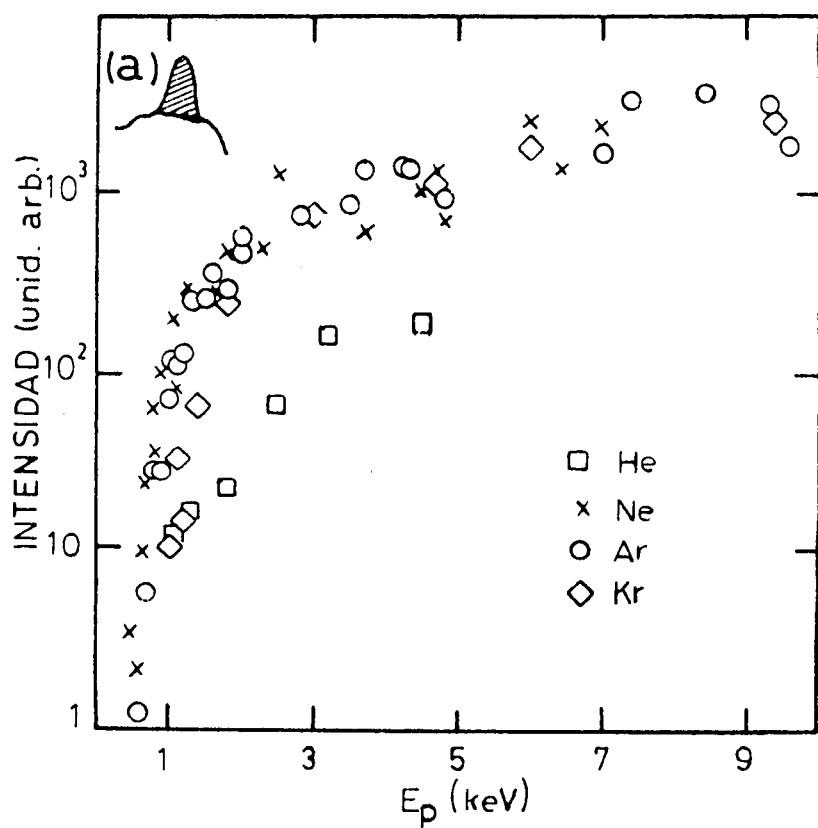


Fig.4-13: Intensidades Auger de la línea principal del Mg en función a) de la energía del proyectil, E_p , y b) de la máxima energía transferida en la colisión proyectil-Mg, γE_p .

4-2-2 Discusión

Las energías umbrales medidas para los proyectiles más pesados en Mg y Al corresponden a distancias críticas de 1.3 y 1.1 u.a. respectivamente. Esto está en buen acuerdo con la suposición que a bajas energías las excitaciones se producen por promoción del $om\ 4f\sigma$ en las colisiones simétricas (fig.4-10). En el caso del Mg no hay cálculos para las energías de ligadura de la molécula Mg-Mg en función de la distancia internuclear. Sin embargo, por estar compuesta por átomos ligeramente más livianos que la molécula Al-Al, los om están menos ligados y es de esperarse que la distancia crítica $R_c(Mg)$ sea algo mayor que para Al.

El caso de los proyectiles más livianos es diferente, tanto el He como el Ne a $E_p < \sim 1.1\ keV$ originan intensidades Auger del Al mayores que los proyectiles más pesados. Esto parecería indicar que en ese rango de energías las colisiones p-b juegan un papel importante en los procesos de excitación. Es difícil determinar cual es el umbral de energía para estos proyectiles porque a energías menores que 600 eV la corriente del haz de iones es muy pequeña y la relación señal-ruido en los espectros se vuelve muy pobre. Este efecto es particularmente importante en el caso del Mg porque tiene una energía umbral de excitación menor que el Al. Creemos que la baja corriente del cañón de iones no nos permitió acercarnos suficientemente al umbral de excitación del Mg como para observar el apartamiento de las curvas de intensidades Auger vs E_p , tal como se observa para Ne-Al. Nótese que el apartamiento en Ne-Al comienza a observarse para intensidades

tres órdenes de magnitud por debajo de las intensidades máximas, mientras que en Ne-Mg hemos medido en total solo tres órdenes de magnitud (ver figs.4-12 y 4-13).

Veamos ahora cuales podrían ser los mecanismos de excitación en colisiones Ne-Al o Ne-Mg. En el diagrama de energías de la fig.4-14 se ve que el proceso de excitación más importante en una colisión Ne-Mg ocurre en el $2p$ del Ne por promoción del $om\ 4f\sigma$. Esta promoción del $4f\sigma$ da origen a la emisión de electrones Auger del Ne^{4+} . El sistema Ne-Al tiene las mismas correlaciones que el de Ne-Mg y se espera que ocurran los mismos procesos de excitación.

Una de las formas de excitación del $2p$ del Al o del Mg sería mediante acoplamiento rotacional $3d\sigma-3d\pi-3d\delta$ si se alcanzan distancias de acercamiento suficientemente pequeñas, < 0.2 u.a. (ver fig.4-14). Como para alcanzar estas distancias se requieren energías mucho mayores que las que usamos en nuestros experimentos, debe descartarse este mecanismo. Los mecanismos posibles de excitación a energías más bajas son procesos de dos pasos: 1) en la primera parte de la colisión se promocionan uno o dos electrones del $4f\sigma$ y 2) durante la separación de los núcleos y a distancias relativamente grandes, > 2 u.a., se produce un acoplamiento de distribución de vacancias L entre los $om\ 3d\sigma$ y $4f\sigma$. Estos mecanismos han sido estudiados⁴⁻²⁰ en colisiones en fase gaseosa para el sistema Na^+-Ne . En este caso se encontraron valores de 0.2 a 0.4 para las probabilidades de que una de las vacancias originadas en el $4f\sigma$ pase al $3d\sigma$ para $E_p=6$ keV.

Para estudiar estos procesos donde se transfiere más de un electrón los diagramas de correlación dejan de ser apropiados.

Por ejemplo, uno de los efectos que estos diagramas no tiene en cuenta es que la energía de ligadura del $om\ 4f\sigma$ será distinta si se promocionan dos electrones en lugar de uno, con lo cual también será distinta la probabilidad que se produzca un acoplamiento por distribución de vacancias L. Un estudio detallado de estos acoplamientos requiere el conocimiento de las curvas de energías totales de la molécula en las distintas configuraciones y en función de la distancia internuclear.⁴⁻²⁹ Este cálculo está fuera del alcance de nuestro análisis.

El caso He-Mg o He-Al es similar al de Ne-Mg o Ne-Al. En la fig.4-15 se muestra un esquema de las correlaciones He-Mg, construido siguiendo las reglas de Barat-Lichten.⁴⁻⁶ Se ve que la excitación del 2p del Ne podría ocurrir mediante un proceso de distribución de vacancias L, siempre y cuando se produzca previamente una vacancia en el $3d\sigma$.

Volviendo al caso de los proyectiles más pesados, Ar, Kr y Xe, habíamos visto que cerca del umbral de excitación las vacancias se producen preferentemente en las colisiones simétricas. Cabe hacerse la pregunta si es posible que se produzcan excitaciones en las colisiones p-b y en caso afirmativo a qué energía comienzan a producir una cantidad significativa de excitaciones. Responderemos a esta pregunta para el caso de colisiones Ar-Al. Para ello compararemos los resultados experimentales con los obtenidos con el programa de Monte Carlo.

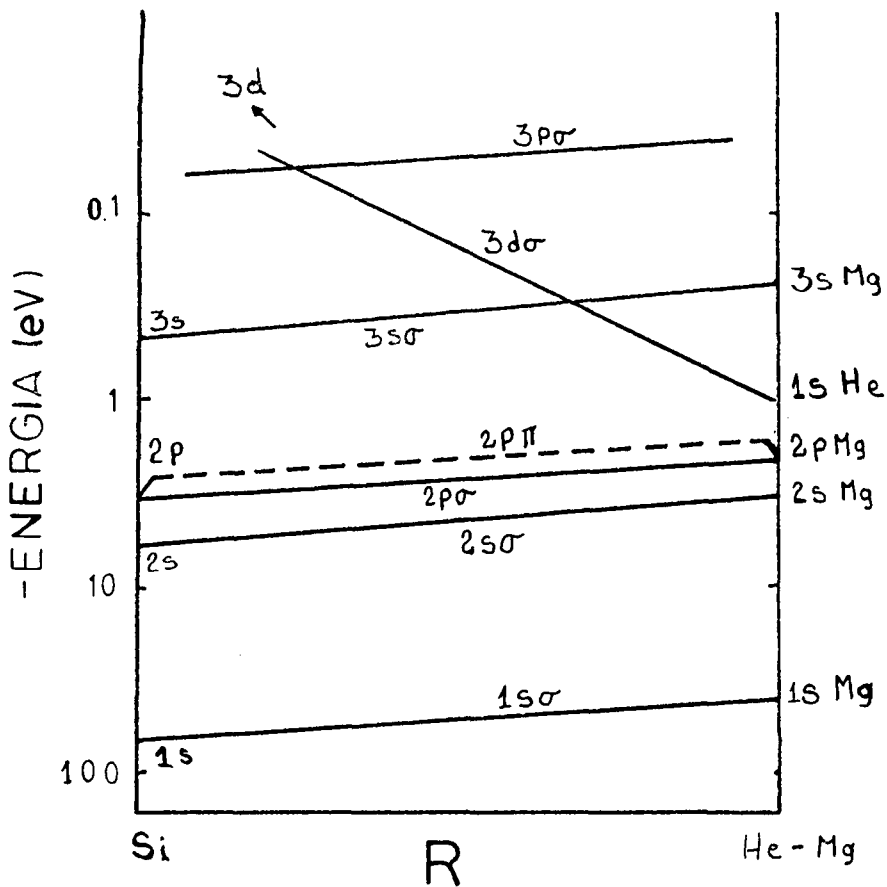


Fig.4-15: Diagrama de correlaciones diabáticas para el sistema He-Mg, construido siguiendo las reglas de Barat-Lichten (Ref.4.6).

a) Simulación por Monte Carlo

Los datos experimentales que poseemos son las intensidades Auger atómicas, en unidades arbitrarias y en función de la energía del proyectil. Como los picos atómicos están formados por electrones que provienen de decaimientos Auger fuera del sólido, la intensidad Auger atómica debe ser proporcional al número de átomos que escapa del sólido conservando un agujero en la capa L. Estos números se pueden calcular con la simulación de Monte

Carlo. Mostraremos con cierto detalle este cálculo porque servirá también para caracterizar algunos parámetros del programa, los cuales serán utilizados en las secciones siguientes.

El primer paso es determinar, tal como hicimos para el estudio de la excitación de la capa K, dónde ocurren las excitaciones. Observando los diagramas de correlaciones para los sistemas Al-Al y Ar-Al (figs. 4-10 y 4-16) se ve que la promoción del $4f\sigma$, que en ambos sistemas da lugar a las excitaciones del $2p$ del Al, ocurre a distancias internucleares diferentes. Por lo tanto en la simulación habrá que usar diferentes distancias críticas (R_c).

El modelo utilizado para calcular la probabilidad de excitación, tanto en las colisiones p-b como en las b-b, es mucho más sencillo que en el caso de excitaciones de la capa K. Si la distancia de acercamiento máximo en una dada colisión es menor que la distancia crítica correspondiente se considera que se produce la excitación en el átomo de Al⁴⁻²²⁻²³ (ver apéndice). En el caso de colisiones simétricas se considera que sólo uno de los átomos colisionantes se excita, siendo iguales las probabilidades de excitación de cada uno. Como distancia crítica para las colisiones simétricas se usó⁴⁻⁷ $R_c(\text{Al-Al})=0.53 \text{ \AA}$, mientras que para las colisiones asimétricas se usó $R_c(\text{Ar-Al})=0.38 \text{ \AA}$. Este último fue elegido en base al trabajo de Schneider y col.⁴⁻²⁴, quienes estudiaron las excitaciones de la capa L del Si en colisiones en fase gaseosa Si⁺-Ar. Estos autores analizaron en detalle los procesos de excitación y utilizaron una $R_c(\text{Si-Ar})=0.35\text{\AA}$. Comparando los diagramas de correlaciones Si-Ar

y Al-Ar encontramos que un valor adecuado para describir las excitaciones en el Al es $R_c(\text{Al-Ar})=0.38 \text{ \AA}$.

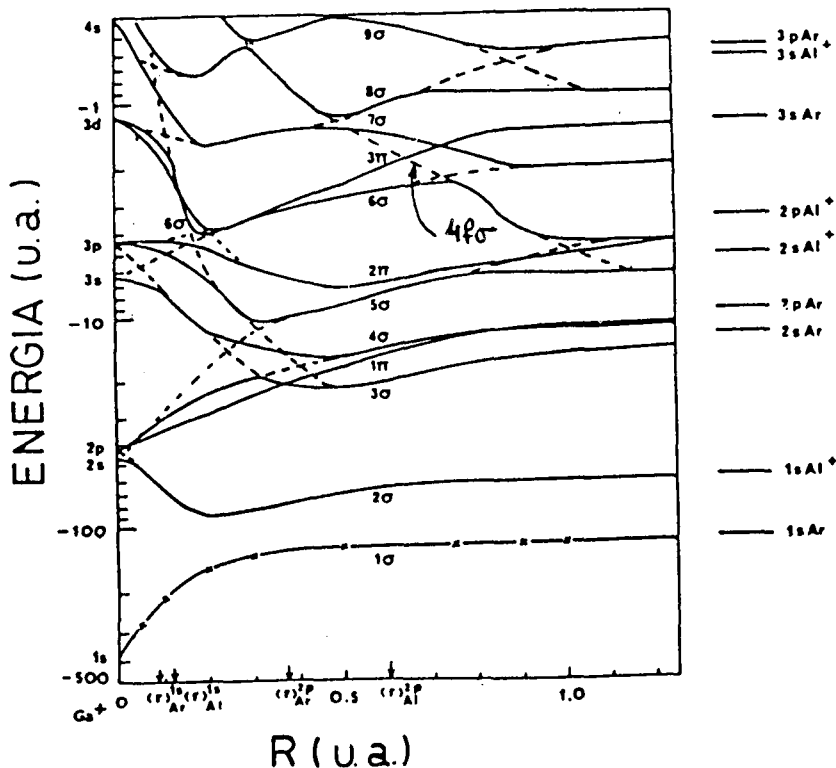


Fig.4-16: Diagrama de energía de om adiabáticos (diabáticos en línea de trazos) para el sistema Al-Ar (Ref.4.29).

Hay trabajos recientes de simulación por Monte Carlo^{4.30-31} en los cuales se estudiaron las intensidades Auger absolutas para Ar-Al a energías mayores que 10 keV. En estos trabajos se utilizó un mismo valor de R_c para las colisiones b-b y p-b. Este valor de R_c , 0.4 \AA , es cercano al que utilizamos nosotros para las colisiones

siones p-b y fue obtenido como parámetro de ajuste en la comparación de intensidades experimentales y calculadas. El uso de $R_c=0.4$ Å también para las colisiones b-b disminuye la influencia de estas colisiones. Si bien esto no afecta mayormente a los resultados para energías mayores que 10 keV (rango en que dichos autores trabajaron) impediría determinar correctamente los roles relativos de ambos tipos de colisión.

Una vez que se ha detectado una excitación, ya sea en una colisión p-b o b-b, se sigue al átomo excitado hasta que decae o bien hasta que escapa del sólido, tal como se describió en el capítulo 3. La distancia recorrida por los átomos excitados y la probabilidad de escapar del sólido sin decaer dependen fuertemente del valor usado para la vida media de la vacancia L dentro del sólido (T_{sol}).

En la fig.4-17 se muestran las distribuciones de las posiciones de excitación del Al para proyectiles de Ar a 2 keV y 45° de incidencia. A estas energías solo las colisiones b-b son efectivas. La distribución presenta una forma asimétrica y la mayoría de las excitaciones ocurren entre 2 y 16 Å, con un máximo a ~ 7 Å de profundidad. Se ve también que hay excitaciones hasta profundidades mayores que 20 Å. En la fig.4-17 se muestra, junto con las excitaciones, las distribuciones de las posiciones de los decaimientos para tres valores diferentes de la vida media: 2×10^{-13} , 10^{-14} y 10^{-15} . El primer valor corresponde al cálculo de la vida media para transiciones en el vacío,⁴⁻³² el segundo es el valor observado en blancos sólidos⁴⁻³³ y el tercero 1/10 de este último. Estas distribuciones son similares a las obtenidas previamente por Andreadis y col.⁴⁻²³ Los símbolos en el eje vertical

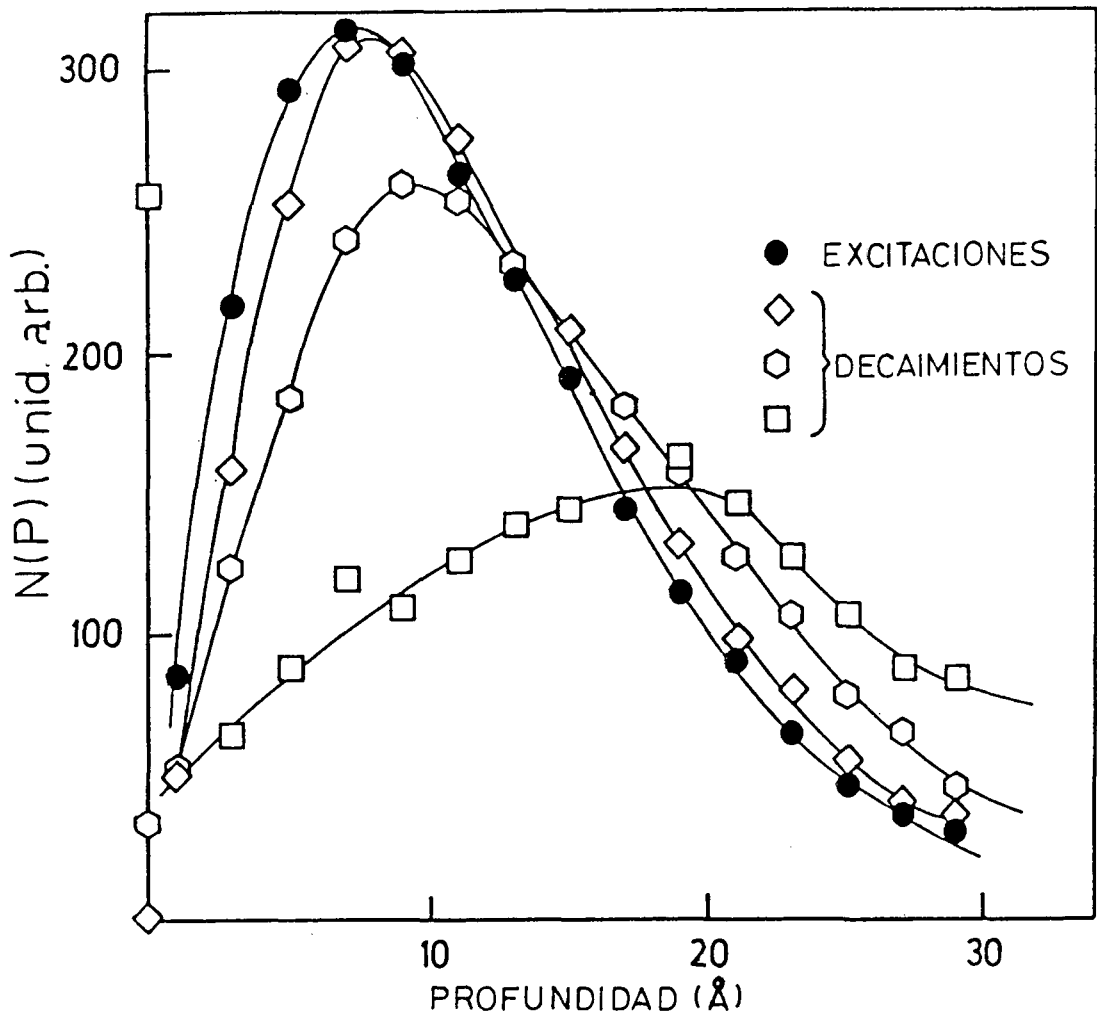


Fig.4-17: Distribución de las posiciones de excitación y decaimiento Auger obtenidas por simulación de Monte Carlo. ●-Excitaciones de la capa L del Al en colisiones blanco-blanco para proyectiles de Ar a 2 keV y 45° de incidencia. Distribución de las posiciones de decaimiento para tres valores diferentes de vida media de la vacancia L dentro del sólido: ◇- $T_{sol}=10^{-15}$ seg, ○- $T_{sol}=10^{-14}$ seg, y □- $T_{sol}=2 \times 10^{-13}$ seg. Los símbolos sobre el eje vertical son proporcionales al número de átomos excitados emitidos del sólido.

son proporcionales al número de átomos excitados eyectados. Vemos que para una vida media de 10^{-15} seg los átomos excitados decaerían casi en la misma posición en la cual fueron excitados y la probabilidad que escapen del sólido manteniendo el estado de excitación sería muy baja. Para $T_{sol}=2*10^{-13}$ seg los átomos excitados decaerían lejos de donde fueron excitados y muchos de ellos podrían escapar sin decaer.

Para seguir con los cálculos necesitamos elegir un valor apropiado para el parámetro T_{sol} . Una forma de hacerlo⁴⁻²³ es comparar los valores experimentales con los calculados de los cocientes entre las intensidades Auger debidas a decaimientos dentro y fuera del sólido (cocientes, C, entre las áreas de los picos atómicos y las estructuras anchas del espectro Auger). Estos cocientes pueden poseer errores debido a 1) la incerteza en los valores de la profundidad de escape de los electrones Auger en sólidos y 2) la dificultad de obtener el área de las estructuras anchas. En la fig.4-18 se muestra un espectro Auger del Al y la distribución de los electrones Auger generados en el interior del sólido, que supuestamente pudieron escapar sin pérdida apreciable de energía. Esta última fue obtenida del trabajo de Powell.⁴⁻³⁴ En la tabla 4-1 se muestran los valores experimentales de los cocientes C para energías de 2 y 10 keV. En esta tabla se muestran también los valores calculados de los cocientes C. Para este cálculo se utilizó una probabilidad de escape de los electrones Auger del tipo $\exp(-x/C_1)$ con $C_1=4.7 \text{ \AA}$ el camino libre medio de los electrones Auger del Al y x la posición de los decaimientos medida desde la superficie. Se puede ver que el

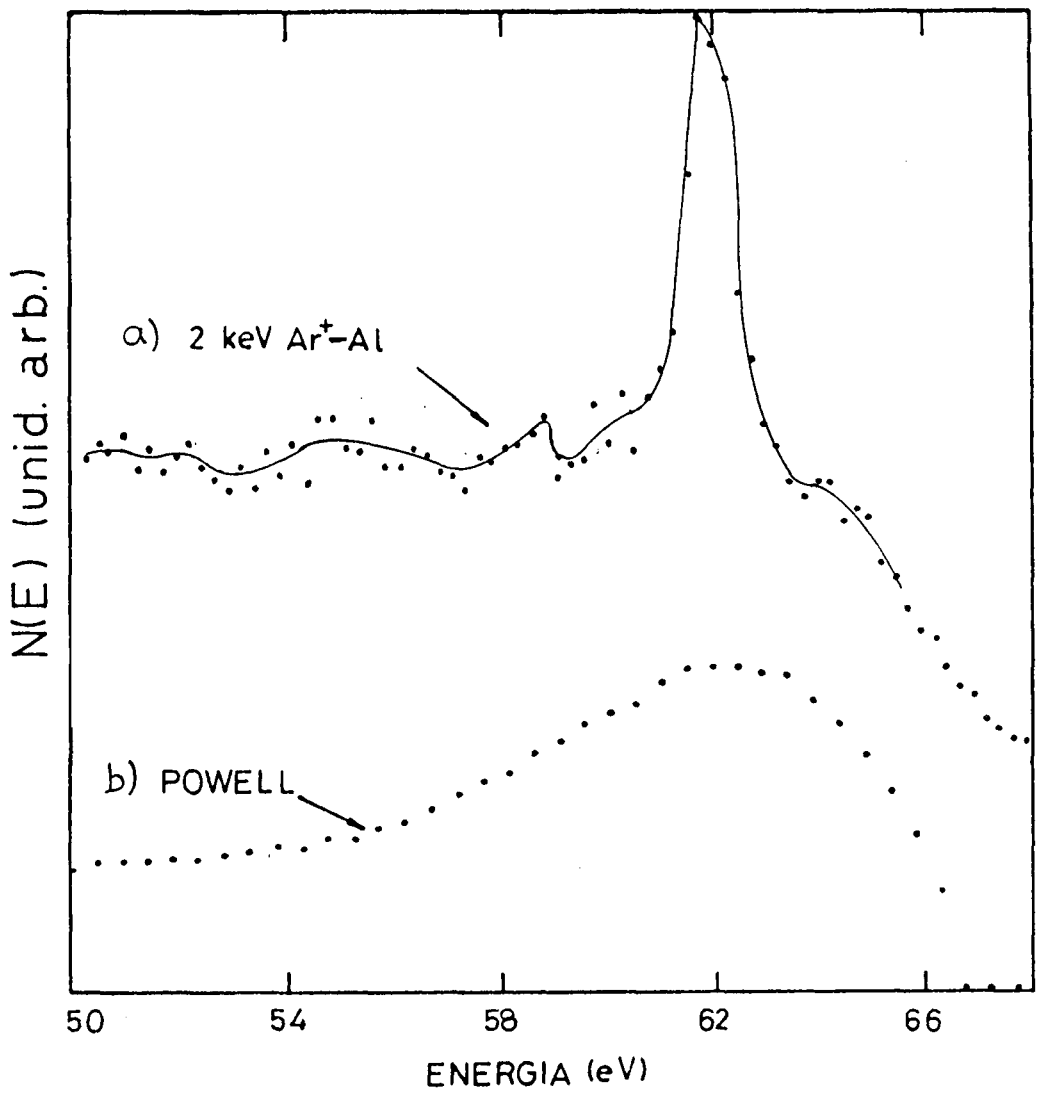


Fig.4-18: a) Espectro Auger del Al inducido por bombardeo con iones de Ar a 2 keV, adquirido con el equipo de superficies. b) Distribución de los electrones Auger que escapan del sólido sin pérdida apreciable de energía (obtenida de Ref.4.34).

mejor acuerdo ocurre para $T_{sol} \sim 10^{-14}$ seg, lo cual es un resultado interesante ya que concuerda con los valores de la vida media en sólidos medidos por otros métodos.^{4.33}

Tabla 4-1. Valores calculados y experimentales entre las intensidades Auger correspondientes a decaimientos dentro y fuera del sólido

Ep (keV) \ T _{sol} (seg)	T _{sol} (seg)			Exp.
	10 ⁻¹⁵	10 ⁻¹⁴	2 · 10 ⁻¹⁵	
2	0.006	0.1	1.4	0.14
10	0.02	0.25	2	0.20

En la fig.4-19 comparamos las intensidades Auger experimentales con los valores calculados de las cantidades de átomos excitados que escaparon del sólido, en función de la energía de los proyectiles. Se muestran por separado las contribuciones provenientes de colisiones p-b y b-b. Los datos de la simulación fueron normalizados para una energía de los proyectiles de 2 keV (sólo para las colisiones b-b). Se ve que la suma de ambas contribuciones está en buen acuerdo con los resultados experimentales y con la suposición previa^{4.8-9,4.22-23} que a $E_p < 5$ keV dominan las colisiones b-b. Las colisiones p-b comienzan a producir una cantidad significativa de excitaciones a energías mayores que ~4. keV. Es importante mencionar que cambiando ligeramente el valor de la distancia crítica para excitaciones en colisiones Ar-

Al, cambia fuertemente el umbral de excitación, por ejemplo si usamos $R_c(\text{Ar-Al})=0.4$ A en lugar de 0.38 A el umbral se corre aproximadamente 400 eV hacia energías más bajas.

4.2.3 Conclusiones

Podemos resumir los resultados de esta sección en la siguiente forma:

1) Hemos adquirido espectros de electrones Auger del Mg inducidos por bombardeo con iones de He, Ne, Ar y Kr a energías menores que 10 keV. Encontramos que las intensidades Auger graficadas en función de la máxima energía que un proyectil puede transferir a un átomo del blanco tienden, a una misma energía umbral $\gamma_{Ep} \sim 0.5$ keV, excluyendo el caso del He. Esta energía umbral está en buen acuerdo con la suposición que a bajas energías las excitaciones se producen preferentemente en las colisiones simétricas. En el caso de los proyectiles más livianos, He y Ne, habría que analizar más profundamente la posibilidad de que se produzcan excitaciones en colisiones p-b mediante acoplamientos de distribución de vacancias.

2) Comparamos los valores experimentales y los calculados de los cocientes entre las intensidades Auger correspondientes a decaimientos dentro y fuera del sólido. Encontramos que la vida media de la vacancia L del Al es $\sim 10^{-14}$ seg, en buen acuerdo con resultados previos obtenidos por diferentes métodos experimentales.⁴⁻³³ Esto parecería indicar que la cascada de colisiones practicamente no afecta el valor de la vida media.

3) A energías menores que ~ 5 keV las intensidades Auger del Al se reproducen bien con la simulación de Monte Carlo, conside-

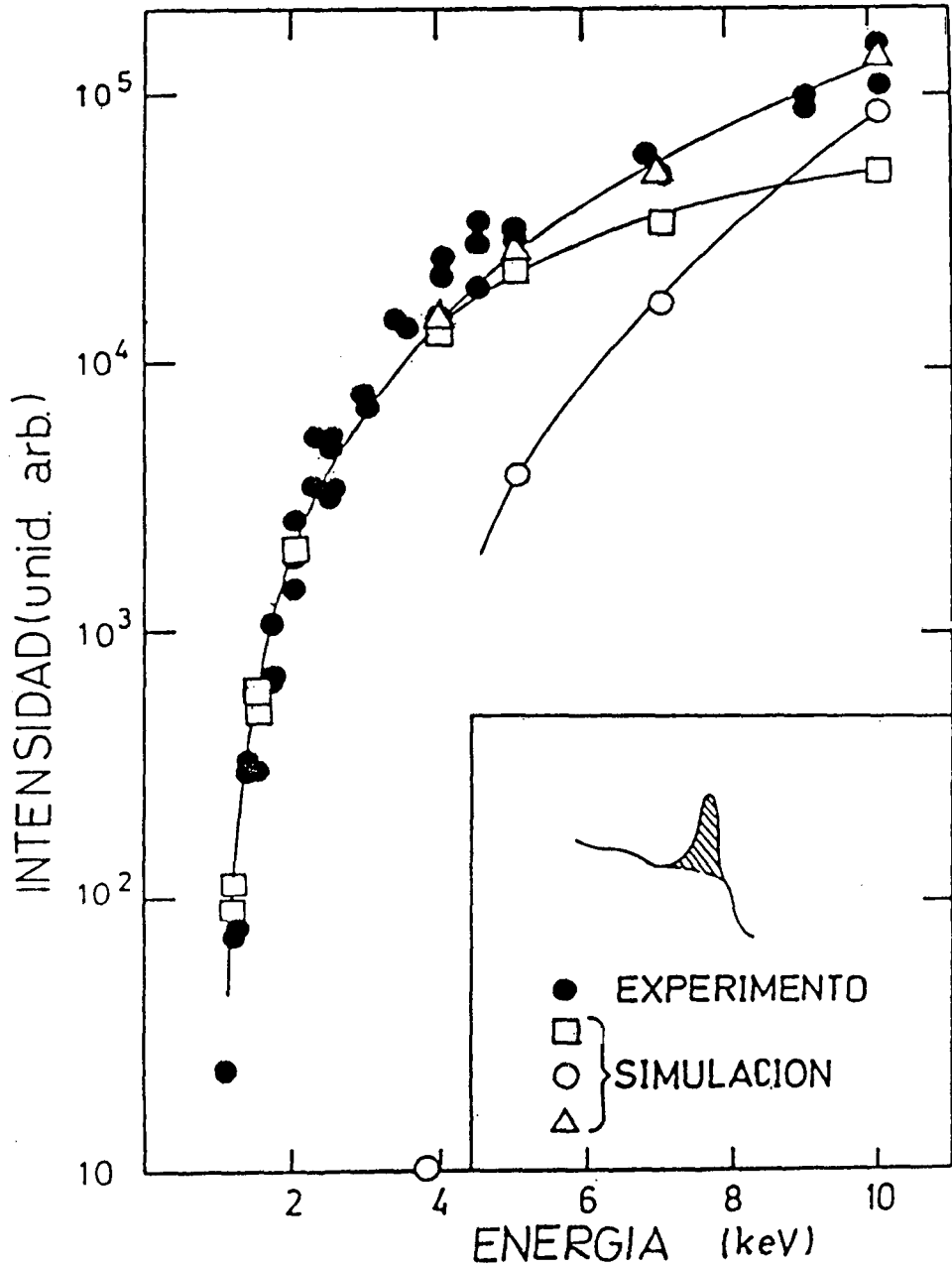


Fig.4-19: Intensidad Auger experimental del pico atómico principal del Al y número de átomos de Al excitados eyectados, calculados por la simulación Monte Carlo, en función de la energía del proyectil. ●-intensidad experimental, □-contribución de las colisiones blanco-blanco, ○-contribución de las colisiones proyectil-blanco, y △-suma de ambas contribuciones. Los resultados de la simulación están normalizados al experimento a $E_p=2$ keV.

rando que las excitaciones ocurren en las colisiones simétricas. A energías mayores que ~ 4 keV las colisiones p-b comienzan a producir una cantidad significativa de excitaciones, pasando a ser las colisiones dominantes a partir de ~ 9 keV.

REFERENCIAS

- 4.1 G. Zampieri, tesis presentada en el Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, 1985.
G. Zampieri y R.A. Baragiola, Phys. Rev. B29 (1984) 1480 y
G. Zampieri y R.A. Baragiola, Surface Sci. Lett. 114 (1982) L15.
- 4.2 M. Terasawa, T. Tamura, y H. Kamada, J. Phys. Soc. Jpn. 33 (1972) 1420.
- 4.3 R.D. Piacentini, y A. Salin, J. Phys. B9 (1976) 959.
- 4.4 N. Benazeth, J. Agusti, C. Benazeth, J. Mischler, y L. Viel, Nucl. Inst. & Methods 132 (1976) 477.
- 4.5 T. Scharnagl, y W. Hink, J. Phys. B13 (1980) 4021.
- 4.6 M. Barat, y W. Lichten, Phys. Rev. A6 (1972) 212.
- 4.7 K. Taulbjerg, y J.S. Briggs, J. Phys. B8 (1975) 1895,
J.S. Briggs, y K. Taulbjerg, J. Phys. B8 (1975) 1909,
K. Taulbjerg, J.S. Briggs, y J. Vaaben, J. Phys. B9 (1976) 1351.
- 4.8 K. Taulbjerg, y P. Sigmund, Phys. Rev. A5 (1972) 1285,
K. Taulbjerg, B. Fastrup, y E. Laegsgaard, Phys. Rev. A8 (1973) 1814, y
K. Wittmaak, Surf. Sci. 85 (1979) 69.
- 4.9 R.A. Baragiola, E.V. Alonso, y H.J.L. Raiti, Phys. Rev. A25

(1982) 1969.

- 4.10 W.D. Wilson, L.G. Haggmark, y J.F. Biersack, Phys. Rev. B15 (1977) 2458.
- 4.11 C.J. Powell, R.J. Stein, P.B. Needham, Jr., y T.J. Driscoll, Phys. Rev. B16 (1977) 1370.
- 4.12 K.B. Winterbon, P Sigmund, y J.B. Sanders, Mat. Fys. Medd. 37 (1970) 14.
- 4.13 N. Stolterfoht, D. Schneider, D. Burch, B. Aagaard, E. Bóving, y B. Fastrup, Phys. Rev. A12 (1975) 1313.
- 4.14 N. Luz, S. Sackmann, y H.O. Lutz, J. Phys. B12 (1979) 1973.
- 4.15 Th. P. Hoogkamer, F.H. Woerlee, R.J. Fortner, y F.H. Saris, J. Phys. B10 (1977) 3245.
- 4.16 J.H. Macek, y J.S. Briggs, J. Phys. B6 (1973) 841.
- 4.17 D. Schneider, y N. Stolterfoht, Phys. Rev. A19 (1979) 55.
- 4.18 C.E. Dick, y A.C. Lucas, Phys. Rev. A2 (1970) 580.
- 4.19 J.A.D. Matthew, Phys. Scripta T6 (1983) 79.
- 4.20 E.W. Thomas, Vacuum 34,12 (1984) 1031.
- 4.21 N.H. Sabelli, R. Benedek, y T.L. Gilbert, Phys. Rev. A20 (1979) 677.
- 4.22 J.J. Vrakking y A. Kroes, Surface Sci. 84 (1979) 153.
- 4.23 T.D. Andreadis, J. Fine, y J.A.D. Matthew, Nucl. Instr. & Methods, 209/210 (1983) 495.
- 4.24 R. Whaley, y E.W. Thomas, J. Appl. Phys. 56,5 (1984) 1505.
- 4.25 C. Benazeth, N. Benazeth, y L. Viel, Surface Sci. 78 (1978) 625.
- 4.26 D. Schneider, G. Nolte, U. Wille, y N. Stolterfoht, Phys. Rev. A28 (1983) 161.

- 4.27 D. Schneider, U. Wille, N. Stolterfoht, y G. Nolte, Phys. Rev. A33 (1986) 2099.
- 4.28 J. Østgaard Olsen, T. Andersen, M. Barat, Ch. Courbin-Gaussorgues, V. Sidis, J. Pommier, J. Agusti, N. Andersen, y A. Russek, Phys. Rev. A19, 4 (1979) 1457.
- 4.29 F.P. Larkins, en Proceedings of the International Conference on Inner Shell Ionization Phenomena and Future Applications, ed. R.W. Fink, S.T. Manson, J.M. Palms, y F. Venugopala Rao, (Oak Ridge, 1972) p. 1543.
- 4.30 C. Benazeth, N. Benazeth, y M. Hou, Surface Sci. Lett. 151 (1985) L137.
- 4.31 M. Hou, C. Benazeth, N. Benazeth, y C. Mayoral, Nucl. Instr. & Methods B13 (1986) 645.
- 4.32 D.L. Walters, y C.P. Bhalla, Phys. Rev. A4,6 (1971) 2164.
- 4.33 P.M. Citrin, G.K. Wertheim, y M. Schluter, Phys. Rev. B20 (1979) 3067.
- 4.34 C.J. Powell, Phys. Rev. Lett.30 (1973) 1179.

CAPITULO 5 - IDENTIFICACION DE ESTRUCTURAS AUGER

Los sólidos que hemos estudiado (Be, Na, Mg, Al y Si) se caracterizan por poseer picos Auger compuestos por una estructura ancha y superpuesta a ésta uno o más picos angostos. Hay amplio acuerdo en identificar las estructuras anchas como provenientes de transiciones Auger dentro del sólido, donde intervienen dos electrones de la banda de valencia. Estas transiciones son del tipo KVV en Be y $L_{2,3}VV$ en Mg, Al y Si.

Las estructuras angostas han sido atribuidas a decaimientos Auger fuera del sólido, en átomos que escapan con una vacancia interna. La identificación de los picos angostos (o atómicos) no resulta tan clara como la de las estructuras anchas. Aquí los procesos de neutralización e ionización, que tienen lugar en el átomo eyectado mientras atraviesa la superficie, determinan los estados iniciales de la transición fuera del sólido. Estos procesos pueden depender de la energía y de la dirección con que escapan los átomos excitados.

Hay varios trabajos anteriores^{5, 17-20} en los cuales se ha discutido la identificación de los picos atómicos en los espectros de Mg, Al y Si. Aparentemente existe buen acuerdo en asignar el pico principal del Mg y Al a las transiciones: $Mg^{*0} K2s^2p^63s^23p \rightarrow Mg^+ K2s^2p^63s$ y $Al^{*0} K2s^2p^63s^23p^2 \rightarrow Al^+ K2s^2p^63s3p$ respectivamente. En cambio no resulta tan evidente la identificación del pico atómico principal del Si^{5, 5, 5, 20} y de los picos atómicos menores que aparecen en los diferentes espectros estudiados. Tampoco se entiende bien la relación que se observa entre las intensidades de los picos de un mismo espectro.

Cuando se comparan los espectros Auger obtenidos en fase gaseosa, por ejemplo $\text{Na}^+ \rightarrow \text{Ne}$, con los picos atómicos de los espectros Auger de sólidos se observa que generalmente hay más picos en los espectros de fase gaseosa. Tal efecto ha sido discutido previamente por Zampieri y col.⁵⁻¹⁰⁻¹¹ para el caso Ne-Mg. Esta discusión se basa en el análisis de los procesos de ionización resonante que pueden ocurrir mientras el átomo escapa del sólido (sección 1-3). Siguiendo esta idea, en las secciones siguientes identificaremos los picos atómicos del Na y del Be. Posteriormente presentaremos evidencias de la existencia de un pico atómico menor del espectro Auger del Si, el cual no había sido observado antes porque está ubicado justo en el borde de alta energía de la estructura Auger ancha.

5-1 IDENTIFICACION DEL PICO AUGER DEL SODIO

Empezaremos discutiendo el caso del Na porque es el más sencillo. En el estado fundamental tiene una configuración $K2s^2 2p^6 3s$ y por lo tanto, cuando se origina una vacancia 2p puede haber transiciones Auger sólo desde un estado inicial neutro.

En la fig.5-1a mostramos el espectro del Na obtenido por bombardeo con Ne a 4 keV. Como el tipo de muestra utilizada tiene incidencia en la discusión de los resultados, comentaremos brevemente su preparación. Se limpió una muestra de Mg mediante bombardeo con Ar, tal como se describió en la sección 2-1 y luego se depositó una capa de Na con el cañon de álcalis, controlando que no haya contaminación apreciable de oxígeno.

En la fig.5-1 se muestra también el espectro del sustrato de

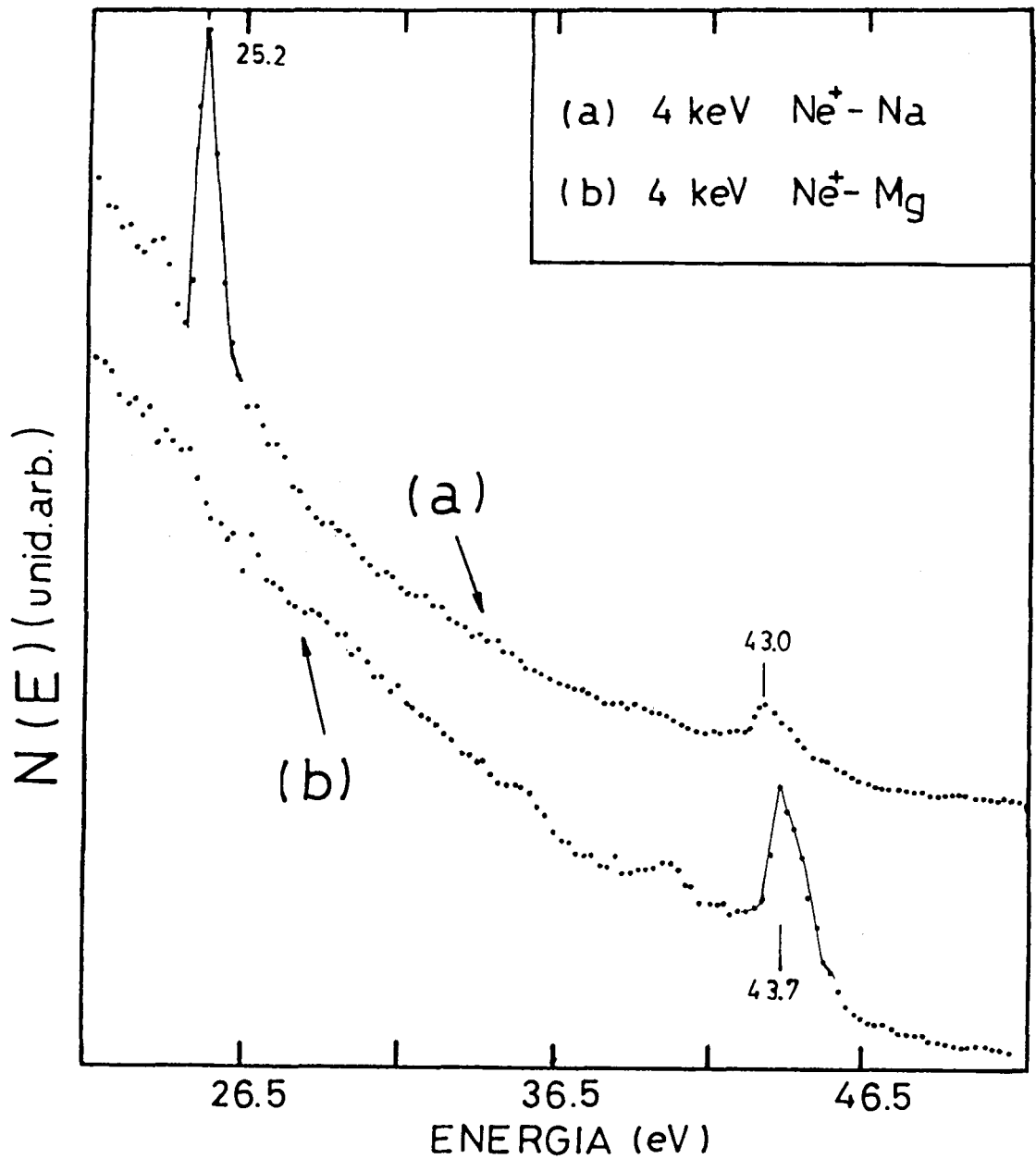


Fig.5-1: Distribución de energía de electrones de una muestra de Na implantado sobre un sustrato de Mg limpio (a), y del sustrato de Mg (b), inducida por bombardeo con iones de Ne a 4 keV. Los espectros fueron adquiridos con el equipo de análisis de superficies, la energía de los electrones está referida al nivel de vacío del Mg limpio.

Mg limpio (antes de la evaporación). Comparando ambos espectros de la fig.5-1 se observa que en el (a) aparece el pico de Na a 25.2 eV y el pico atómico del Mg se ha desplazado en 0.7 eV hacia energías más bajas. Este desplazamiento en la señal de Mg indica un corrimiento en la función trabajo de la muestra (ϕ_m) debido a la deposición del álcali. La función trabajo para la muestra de Mg con Na evaporado está dada por⁵⁻¹¹ $\phi_m = \phi_{Mg\text{limpio}} - 0.7 \text{ eV} = 3 \text{ eV}$. Esto indica que la capa de Na es muy delgada, menor que una monocapa, porque si fuese gruesa la función trabajo sería 2.7 eV, la del Na puro.⁵⁻¹²

En la fig.5-2 se muestra el espectro de electrones que

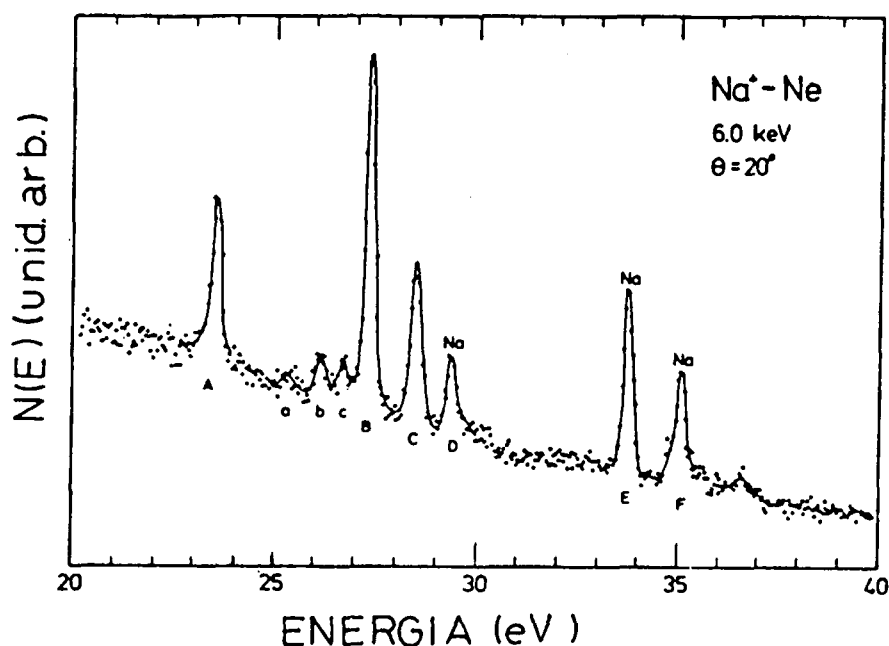


Fig.5-2: Distribución de energía de electrones obtenidos por bombardeo de un blanco gaseoso de Ne con iones de Na a 6 keV (de Ref.5.9)

resulta de bombardear un blanco gaseoso de Ne con Na^+ a 6 keV.⁵⁻⁷ En esta figura aparecen los picos que provienen tanto del Ne (A, B, C, a, b y c) como los del Na (D, E y F). Las transiciones y las correspondientes energías Auger, corregidas por efecto Doppler son:⁵⁻⁷

(D)	$\text{K}2s^22p^63s^2 \rightarrow \text{K}2s^22p^6$	25.7 eV
(E)	$\text{K}2s^22p^63s3p \rightarrow \text{K}2s^22p^63s^2$	29.8 eV
(F)	$\text{K}2s^22p^63s3d \rightarrow \text{K}2s^22p^63p^2$	31.1 eV

La pregunta que surge de la observación de ambos espectros (fig.5-1 y 5-2) es ¿por qué en el espectro del sólido aparece sólo una de las líneas del Na?. Para responderla debemos analizar el diagrama de energías de la fig.5-3. Vemos allí que las configuraciones iniciales para el átomo de Na correspondiente a las transiciones E y F tienen energías de ionización menores o similares a la función trabajo de la muestra. Si los átomos excitados que escapan del sólido tuviesen esas configuraciones se ionizarían en forma resonante (sección 1-3) ya que estos procesos tiene probabilidades de transición mayores que la de los procesos Auger. De esto se concluye que la transición más probable es la D.

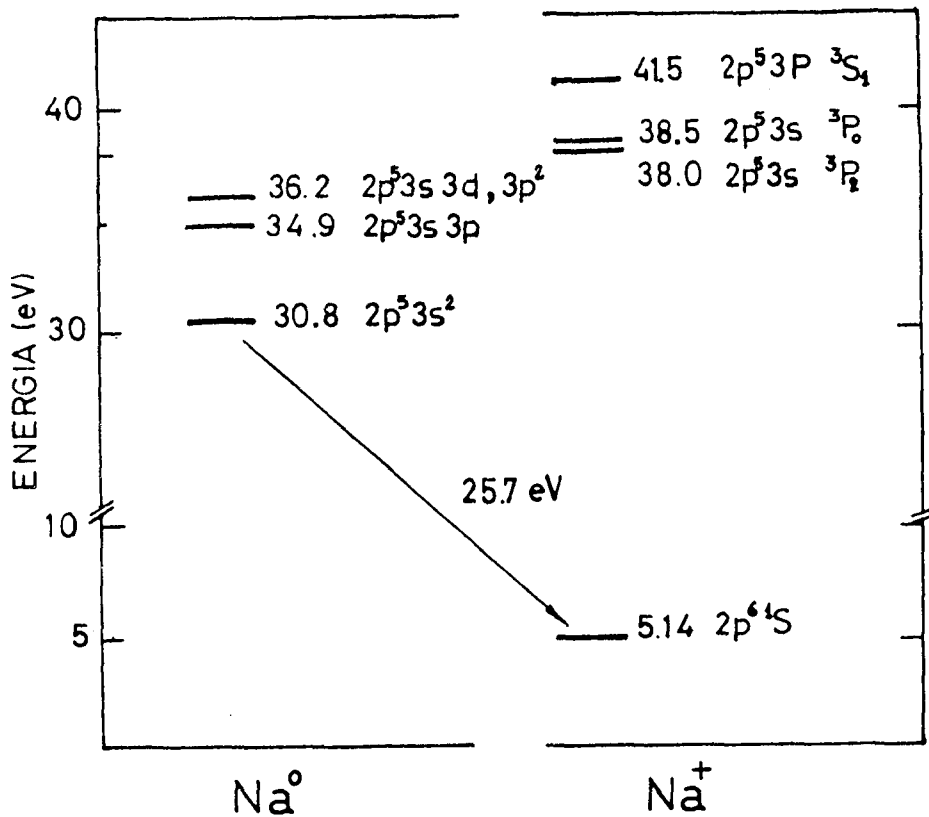


Fig.5-3: Diagrama de energía para los estados autoionizantes del Na, obtenidos de la tabla de Moore (Ref.5.13) y de Ref.5.9.

5-2 IDENTIFICACION DEL PICO ATOMICO DEL BERILIO

Comparando los espectros Auger del Be inducidos por iones y por electrones (fig.5-4) se ve que son muy parecidos. Esto indica que en el espectro inducido por iones la mayoría de los decaimientos Auger ocurren en el sólido. Algunas de las peculiaridades del espectro inducido por iones son: 1) Aparece un pico angosto a 102 eV que no se observa en el inducido por electrones y 2) la estruc-

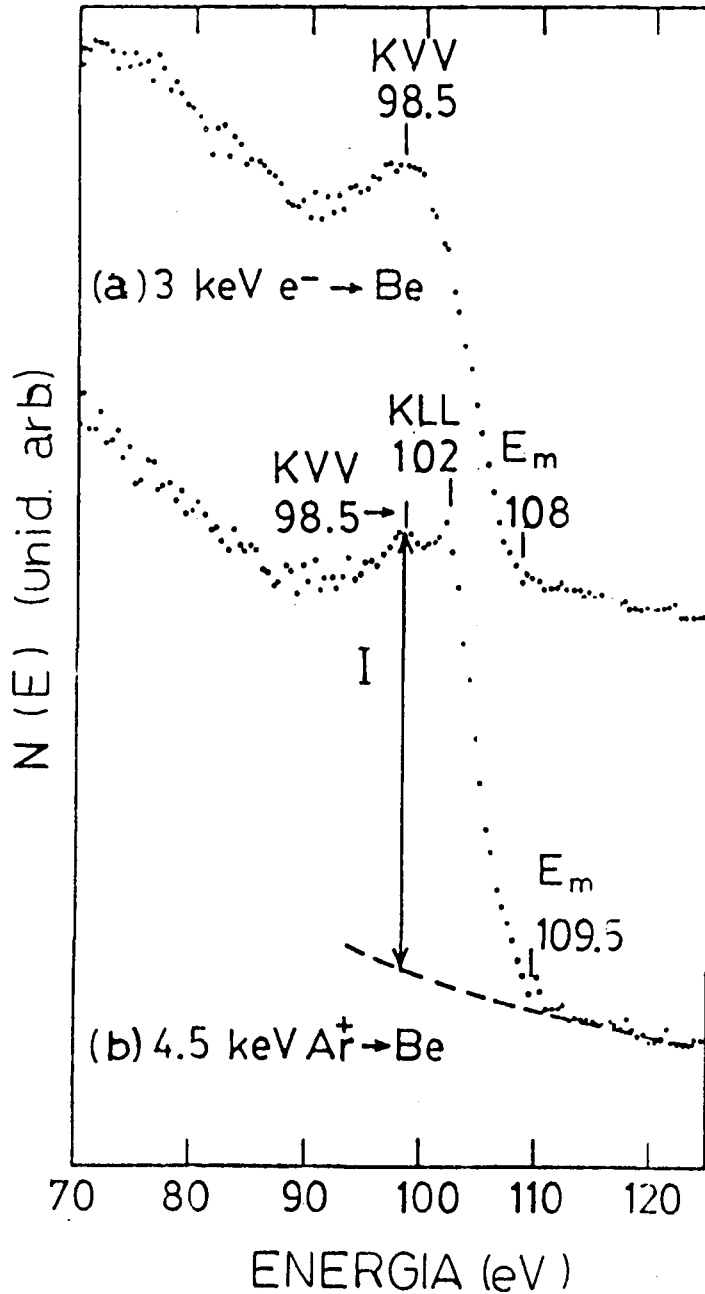


Fig.5-4: Distribución de energía de electrones emitidos por una muestra de Be bombardeada con: a) electrones a 3 keV y b) Ar a 4.5 keV. Los espectros fueron adquiridos con el equipo de análisis de superficies, la escala de energía está referida al nivel de vacío del Be limpio.

tura KVV se extiende hacia energías un poco más altas. El borde de altas energías aparece a 109.5 eV, mientras que en el inducido por electrones está a 108 eV.

Para identificar el pico atómico que aparece a 102 eV utilizamos el diagrama de niveles de energías de la fig.5-5, construido a partir de las tablas de Moore⁵⁻¹³ y de espectros Auger en fase gaseosa.⁵⁻¹⁴ Si el átomo de Be escapa en un estado inicial de ión $\text{Be}^+ 1s2s^2 \ ^2S$, al atravesar la superficie puede neutralizarse por captura resonante de un electrón de valencia⁵⁻¹⁵ a los estados $\text{Be}^0 1s2s^2 2p \ ^1P, \ ^3P$. Captura a configuraciones $\text{Be}^0 1s2s^2 nl$ con $n > 3$ no es resonante porque la energía necesaria para ionizarlos a $\text{Be}^+ 1s2s^2$ es menor que la función trabajo del Be, 3.9 eV.⁵⁻¹² Los estados excitados $1s2s^2 2p \ ^1P, \ ^3P$ pueden decaer a estados finales $1s^2 2s \ ^2S$ y $1s^2 2p^2 P$ con energías Auger:

- (1) $\ ^3P \text{----} 1s^2 2p \ ^2P \text{----} 101.0 \text{ eV}$
- (2) $\ ^1P \text{----} 1s^2 2p \ ^2P \text{----} 102.1 \text{ eV}$
- (3) $\ ^3P \text{----} 1s^2 2s \ ^2S \text{----} 104.9 \text{ eV}$
- (4) $\ ^1P \text{----} 1s^2 2s \ ^2S \text{----} 106.8 \text{ eV}$

Nosotros creemos que el pico atómico observado corresponde principalmente a las transiciones (1) y (2), no resueltas por nuestro equipo experimental. Las transiciones (3) y (4) caen justo sobre el borde de alta energía y por lo tanto podrían dar cuenta, junto con (2), de la pequeña diferencia entre los bordes de alta energías en los espectros inducidos por electrones y por iones.

Si el átomo excitado eyectado, $\text{Be}^+ 1s2s^2 \ ^2S$, no se neutraliza

al atravesar la superficie decaería a $\text{Be}^{2+} 1s^2 \ ^1S$ emitiendo un electrón Auger de 96.1 eV. El hecho que este pico no se observe indica que los procesos de neutralización resonante son más rápidos que el efecto Auger.⁵⁻¹⁵ Con este argumento podemos suponer que otras transiciones de Be^+ a Be^{2+} tales como $\text{Be}^+ 1s(2s2p \ ^1P) \ ^2P \ \longrightarrow \ \text{Be}^{2+} 1s^2 \ ^1S$ y otras con energías Auger entre 100 y 103 eV deben contribuir débilmente al pico atómico.

Finalmente deberíamos considerar transiciones desde estados iniciales $\text{Be}^0 1s2s2p^2$ a $\text{Be}^+ 1s^2 2s \ ^2S$ o $\text{Be}^+ 1s^2 2p \ ^2P$, las cuales dan electrones Auger con energías mayores o iguales que 108 eV, y por lo tanto podrían contribuir también al corrimiento observado en el borde de alta energía.

La existencia de picos atómicos en el borde de alta energía se puede analizar experimentalmente cambiando el ángulo de incidencia de los proyectiles y el ángulo de observación de los electrones emitidos.⁵⁻¹⁶ Como el pico atómico del Be es muy pequeño y difícil de observar, a menos que los espectros tengan una relación señal-ruido muy buena, discutiremos la existencia de un pico atómico del Si ubicado justo en el borde de alta energía del espectro Auger. La existencia y posición de este pico fue predicha anteriormente por Whaley y col.⁵⁻⁷

5-3 IDENTIFICACION DE UN PICO ATOMICO EN EL ESPECTRO AUGER DEL SILICIO

En la fig.5-6 se muestran dos espectros Auger del Si producidos por bombardeo de Ar a 20 keV y un ángulo de incidencia de los proyectiles de 47.7° respecto a la normal a la muestra. El espectro

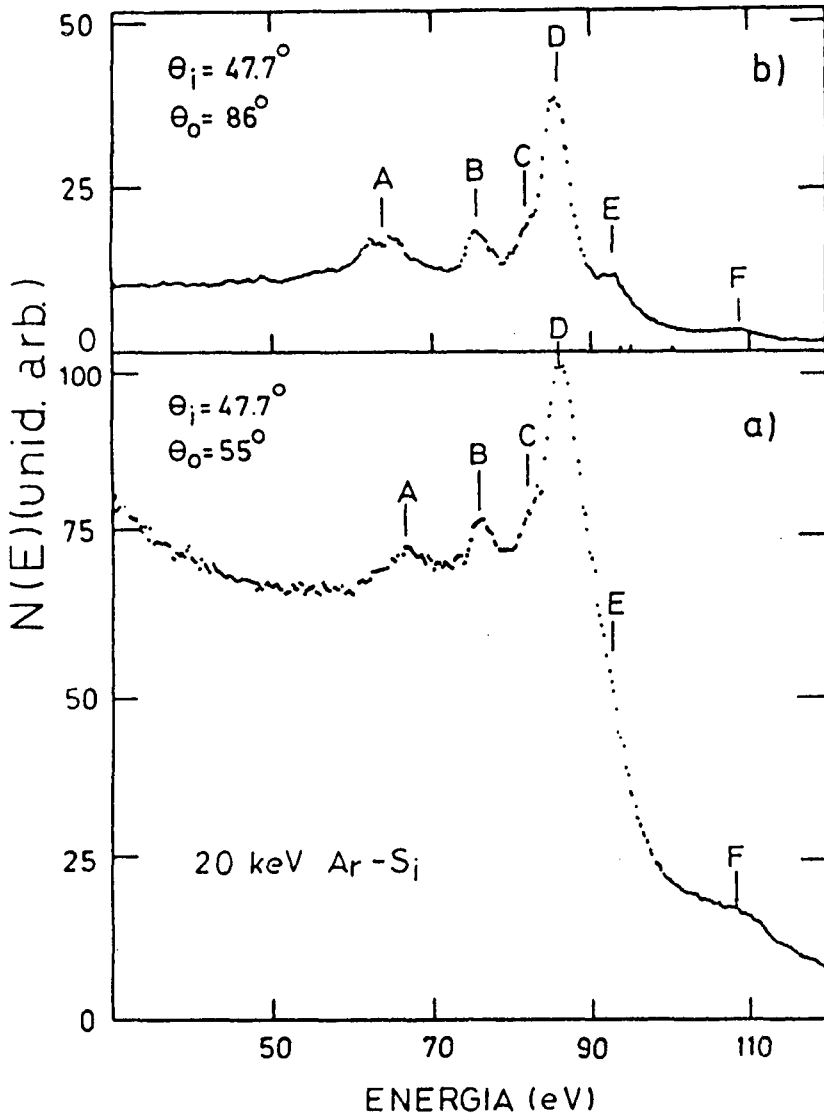


Fig.5-6: Distribuciones de energía de electrones emitidos durante el bombardeo de una muestra de Si con iones de Ar a 20 keV, 47.7° de incidencia, y a) 55° , b) 86° de ángulo de observación (los ángulos están medidos respecto de la normal a la muestra). Nótese que en el espectro (b) ha disminuido notablemente la contribución del interior del sólido (estructura Auger ancha), mientras que la intensidad de los picos atómicos prácticamente no ha cambiado. En la zona del borde de alta energía del espectro Auger ha aparecido un hombro cuyo comportamiento se asemeja al de un pico atómico. Los espectros fueron adquiridos con el Kevatrilo.

(a) fue adquirido con un ángulo de observación de los electrones θ_e de 55° y el (b) con $\theta_e=86^\circ$, éste último corresponde a observación casi rasante. En el espectro (a) se observa la estructura ancha correspondiente a la transición Auger $L_{2,3}VV$ y varios picos atómicos. Whaley y Thomas⁵⁻³ propusieron un modelo detallado que da cuenta de las principales características del espectro. Según ese modelo, además de los picos atómicos indicados como A, B, C, D y F, debería existir otro pico atómico, E, ubicado en el borde de alta energía de la estructura ancha. Los autores consideraron que este pico podría ser la causa del ensanchamiento que se observa en el espectro inducido por iones, cuando es comparado con el inducido por electrones. Este efecto es similar al observado en la sección anterior para el espectro del Be.

Otros autores⁵⁻¹⁷ también observaron el corrimiento del borde de alta energía y lo atribuyeron a efectos que tienen lugar dentro del sólido durante la cascada de colisiones.

Nosotros tratamos de ubicar la presencia de un pico atómico en la zona del borde de alta energía variando el ángulo de observación de los electrones emitidos. En la fig.5-6b se muestra un espectro Auger del Si para observación rasante. En esta figura se ve una gran variación de la intensidad en las estructuras anchas, mientras que los picos atómicos cambian poco. La disminución en la contribución de los decaimientos dentro del sólido se debe a la pequeña longitud de atenuación de los electrones Auger. Los electrones que escapan del sólido a ángulos casi rasantes deberían sufrir, en promedio, una mayor cantidad de colisiones inelásticas que aquellos que escapan a ángulos más cercanos a la normal a la muestra. Además, los electrones son reflejados en la superficie hacia el inte-

rior del sólido cuando su velocidad en la dirección normal a la superficie no es suficiente para atravesar la barrera superficial. Estos resultados están de acuerdo con la hipótesis que los picos atómicos se originan en átomos excitados eyectados del sólido. Vemos también en la fig.5-6b que en la zona del borde de alta energía ha aparecido un hombro, que en contraste con el comportamiento de la estructura ancha su comportamiento se asemeja al de los picos atómicos.

Con este resultado alentador, bombardeamos la muestra a ángulos de incidencia casi rasantes y mantuvimos las condiciones de observación rasante (fig.5-7). En estas condiciones los picos atómicos se vuelven más angostos y se puede observar mejor la presencia del pico atómico E. El cambio de la forma de los picos atómicos con los ángulos de incidencia y observación y con la energía del proyectil será analizado con cierto detalle en el capítulo siguiente. Por ahora solo pretendemos confirmar la existencia del pico atómico E, ubicado en el borde de alta energía.

REFERENCIAS

- 5.1 R.A. Baragiola, en Inelastic Particle-Surface Collisions, Vol.17, de Springer in Chemical Physics, ed. E. Taglauer y W. Heiland (Springer, Berlin, 1981) p. 38.
R.A. Baragiola, E.V. Alonso, y H.J.L. Raiti, Phys. Rev. 25 (1982) 1969.

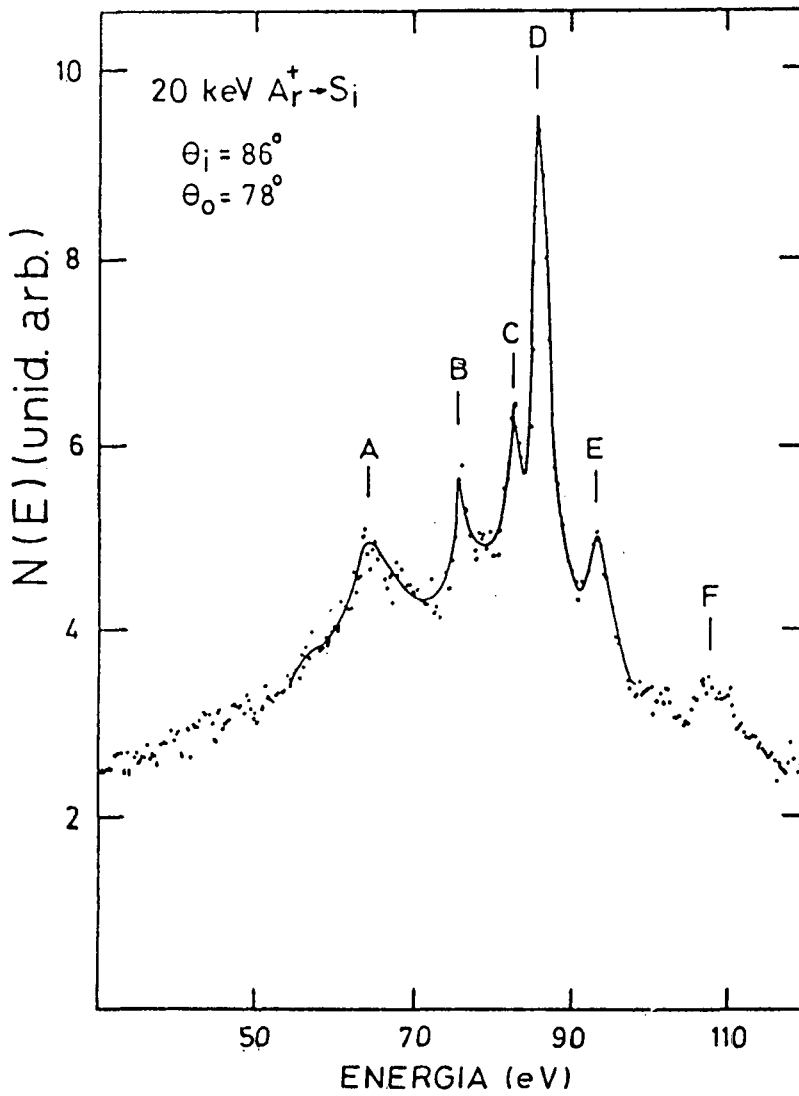


Fig.5-7: Distribución de energía de electrones emitidos durante el bombardeo de una muestra de Si con iones de Ar a 20 keV. Los ángulos de incidencia y observación son casi rasantes, 86° y 78° , respectivamente (medidos respecto de la normal a la muestra). Nótese que en esta disposición experimental los picos atómicos son más angostos que los de la fig.5-6 y el hombro E aparece claramente como un pico atómico. Este espectro fue adquirido con el Kevatrilo.

- 5.2 W.A. Metz, K.O. Legg, y E.W. Thomas, J. Appl. Phys. 51 (1980) 2888.
- 5.3 R. Whaley, y E.W. Thomas, J. Appl. Phys. 56,5 (1984) 1505.
- 5.4 C. Benazeth, N. Benazeth, y L. Viel, Surface Sci. 78 (1978) 625.
- 5.5 J.A.D. Matthew, Phys. Scripta T6 (1983) 79.
- 5.6 N. Benazeth, Nucl. Inst. & Methods, 194 (1982) 405.
- 5.7 K.O. Legg, W.A. Metz, y E.W. Thomas, Nucl. Inst. & Methods 170 (1980) 170.
- 5.8 K. Wittmaack, Nucl. Inst. & Methods, 170 (1980) 565
- 5.9 J. Østgaard Olsen, T. Andersen, M. Barat, Ch. Courbin-Gaussorgues, V. Sidis, J. Fommier, J. Agusti, N. Andersen, y A. Russek, Phys. Rev. A19, 4 (1979) 1457.
- 5.10 G. Zampieri y R.A. Baragiola, Surface Sci. Lett. 114 (1982) L15.
- 5.11 G. Zampieri y R.A. Baragiola, Phys. Rev. B29 (1984) 1480.
- 5.12 V.S. Fomenko, Handbook of Thermoionic Properties, ed. G.V. Sansonov (Plenum, New York, 1966).
- 5.13 C.E. Moore, Atomic Energy Levels Natl. Bur. Stand., Ref. Data Ser., Nat'l Bur. Stand. (U.S.) Circ. No.35 (U.S., GPO, Washington, D.C., 1971).
- 5.14 M. Rødbro, R. Bruch, y P. Bisgaard, J. Phys. B12 (1979) 2431.
- 5.15 H.D. Hagstrum, en Inelastic Ion-Surface Collisions, ed. N.H. Tolk, J.C. Tully, W. Heiland, y C.W. White, (Academic, New York, 1977), p. 1, y R.A. Baragiola, Radiat. Eff. 61 (1982) 47.
- 5.16 L. De Ferrariis, O. Grizzi, G. Zampieri, E.V. Alonso, y R.A.

Baragiola, Surface Sci. Lett. 167 (1986) L175.

5.17 K. Saiki, y S. Tanaka, Nucl. Inst. & Methods in Phys. Res.
B2 (1984) 512.

CAPITULO 6 - FORMA DE LAS ESTRUCTURAS AUGER

Uno de los factores que determinan la forma de los espectros Auger es la posición donde se producen los decaimientos. Se pueden distinguir básicamente tres zonas donde los decaimientos Auger producen electrones que contribuyen a los espectros de manera diferente. Estas zonas son: 1) en el interior de sólido, 2) en la superficie o muy cerca de ella y 3) fuera del sólido.

La fracción más importante de los decaimientos ocurre en el interior del sólido. Los decaimientos que se producen a profundidades menores que la longitud de escape de los electrones Auger generan electrones con una alta probabilidad de ser emitidos. En cambio, aquellos que ocurren en zonas más profundas producen electrones que difícilmente lleguen a la superficie, y si llegan, estarán degradados en energía por las interacciones inelásticas con los electrones del sólido. Todos estos electrones Auger, los que escapan con o sin pérdida apreciable de energía pasan a constituir las estructuras anchas de los espectros Auger.

Las formas de las estructuras anchas de los espectros Auger inducidos por iones son similares a las que se obtienen por bombardeo con electrones (ver por ejemplo la fig.5-4). Estas últimas han sido reproducidas con buena aproximación para sólidos de Be, Al y Si mediante el cálculo de la autoconvolución de la densidad de estados de la banda de valencia. En estos cálculos se incluyeron también efectos debidos a la dependencia de la probabilidad de transición Auger con el impulso angular a lo largo de la banda y con el apantallamiento del agujero inicial por parte

de los electrones de la banda.^{4.1-5} Una comparación mejor entre las formas de las estructuras anchas obtenidas por bombardeo con iones y con electrones (o con cálculos teóricos) es difícil de hacer, hasta tanto no se conozcan con suficiente precisión los algoritmos que permitan restar el fondo de electrones secundarios en todo el rango de energías que abarca el espectro Auger.

En algunos espectros inducidos por iones se ha observado que el borde de alta energía está desplazado hacia energías más altas que en los espectros inducidos por electrones. Vimos que una causa probable era la presencia de algunos picos atómicos ubicados justo en el borde de alta energía; pero haría falta un análisis más detallado para determinar si es ésta la única causa del ensanchamiento del espectro.

Una segunda fracción de los decaimientos puede ocurrir muy cerca de la superficie.^{4.6-7} La proporción de estos decaimientos depende de la dinámica de las colisiones, de la vida media de la vacancia dentro del sólido y de la topografía de la superficie.^{4.8-9} Las transiciones Auger que se producen en esta zona ocurren en átomos cuyos niveles de energía están ensanchados por el solapamiento de las nubes electrónicas del átomo y del sólido. Por lo tanto se espera que esta contribución al espectro sea una estructura más ancha que los picos atómicos y más angosta que la correspondiente a decaimientos dentro del sólido. Estos decaimientos cerca de la superficie podrían ser la causa del fondo continuo observado debajo de los picos atómicos del Si en condiciones de incidencia rasante (fig.5-7).

Finalmente una tercera fracción del total de átomos excitados decae fuera del sólido, relativamente lejos de la superficie,

dando lugar a los picos angostos de los espectros Auger. La proporción de estos decaimientos varía mucho de un sólido a otro (ver por ejemplo los espectros del Be y del Mg, figs.4.1 y 4.11) y depende de la dinámica de las colisiones, de la vida media de la vacancia dentro del sólido y de la vida media fuera del mismo. Si bien estas transiciones ocurren en el vacío, los picos atómicos observados son más anchos que los medidos en colisiones en fase gaseosa. Tres factores determinantes del ensanchamiento son: 1) La distribución de corrimientos Doppler en las energías Auger debidas a la distribución de velocidades de los átomos excitados eyectados, 2) La interacción entre estos átomos y la superficie del sólido y 3) La posible superposición de dos o más picos atómicos con energías Auger muy próximas. Uno de los propósitos de este capítulo es discutir estos efectos desde un punto de vista cuantitativo.

Hay varios trabajos previos^{6-6, 10-13} donde se han estudiado diversos aspectos de la forma de los picos atómicos para sólidos de Mg, Al y Si. En el modelo utilizado por Whaley y Thomas⁶⁻⁶ para describir los espectros Auger de estos sólidos, los picos atómicos están representados por Gaussianas cuyo ancho y altura son parámetros ajustables para reproducir el experimento. Algunos autores⁶⁻¹⁰ encontraron que los picos atómicos se ensanchan en forma asimétrica y hacia energías más altas con el aumento de las energías de los proyectiles. Este efecto se muestra en la fig.6-1. Mientras que Saiki y Tanaka⁶⁻¹², con una disposición experimental diferente a la utilizada por nosotros y en el mismo rango de energías y sistemas colisionantes, encontraron picos atómicos más

angostos y cuyos anchos a mitad de altura se mantienen prácticamente constante con la energía del proyectil. Recientemente Pepper y Aron⁶⁻¹³ encontraron variaciones en la forma del pico atómico principal del Al al variar el ángulo de incidencia de los proyectiles y el ángulo de observación de los electrones emitidos. Esta dependencia con la disposición experimental podría explicar los diferentes comportamientos observados en los picos atómicos. 6-10.6.12

En lo que sigue de este capítulo estudiaremos la forma de los picos atómicos del Al. En la primera parte estudiaremos, para una disposición experimental fija, como varía la forma del pico atómico principal del Al con la energía del proyectil. Compararemos resultados experimentales con los calculados por la simulación de Monte Carlo. En la segunda parte discutiremos algunos aspectos de la dependencia de la forma de los picos Auger con los ángulos de incidencia de los proyectiles y el ángulo de observación de los electrones.

6-1 DEPENDENCIA DE LA FORMA DE LOS PICOS ATOMICOS CON LA ENERGIA DEL PROYECTIL

Estudiaremos la dependencia de la forma del pico atómico principal del Al con la energía del proyectil para el sistema Ar-Al. Este es un caso particular y en otros sistemas pueden aparecer comportamientos diferentes. Sin embargo, si se conocen los mecanismos de excitación y se cambian correspondientemente los parámetros de la simulación, el método que discutiremos seguirá siendo válido.

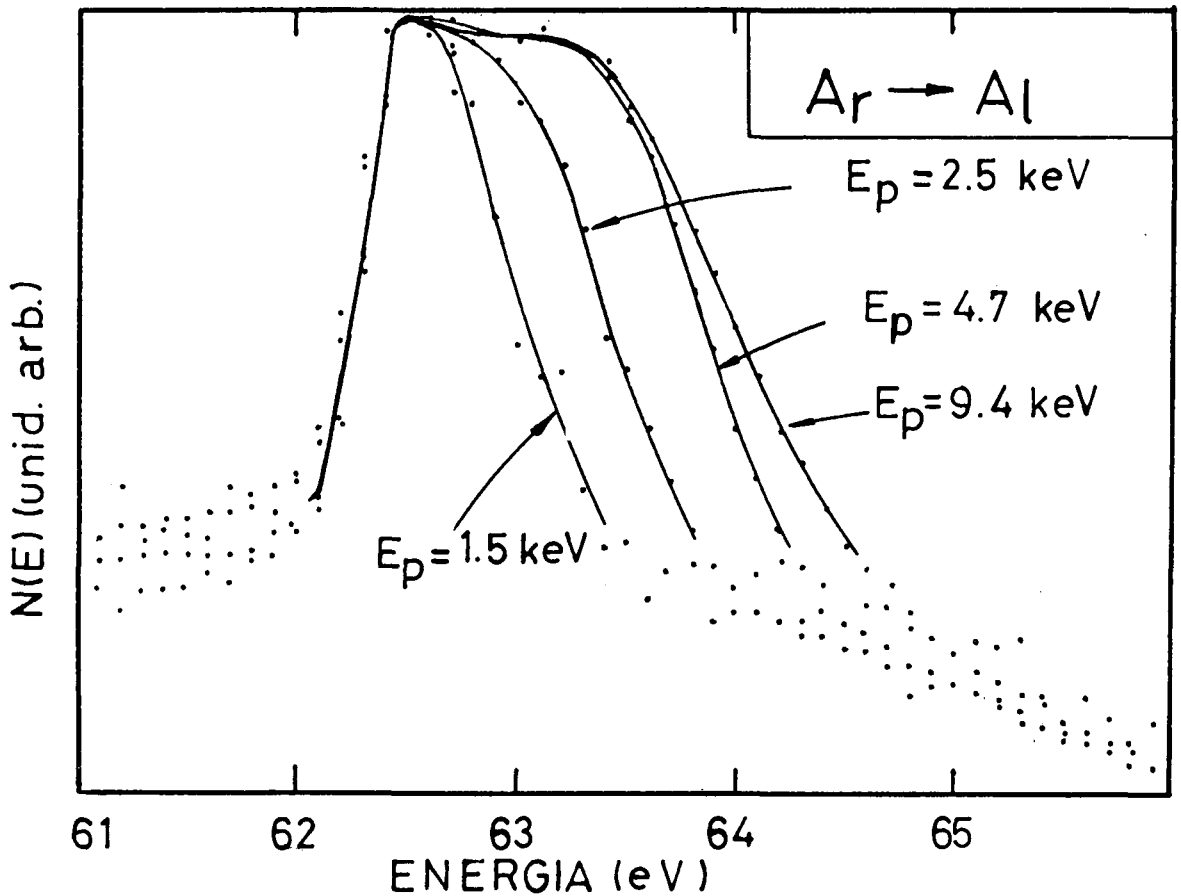


Fig.6-1: Pico atómico principal del espectro Auger del Al para varios valores de energía del proyectil. Los espectros fueron obtenidos por bombardeo de Ar a 45° de incidencia, la dirección de observación está a 15° respecto de la normal a la superficie de la muestra. Los espectros fueron adquiridos con el equipo de análisis de superficies, con una resolución en energía mejor que 0.2 eV. La energía de los electrones está referida al nivel de vacío de la muestra.

6-1-1 Resultados experimentales

En la fig.6-1 mostramos un detalle de los espectros Auger del Al, allí aparecen los picos atómicos principales para energías de los proyectiles de 1.5, 2.5, 4.7 y 9.4 keV y un ángulo de incidencia de 45° (la disposición experimental se puede ver en la fig.2-1). Estos espectros están normalizados en altura y fueron adquiridos con el equipo de análisis de superficies trabajando con una resolución en energía mejor que 0.2 eV.

Vemos en la fig.6-1 que: 1) Los picos se ensanchan en forma asimétrica, se corre el borde de alta energía mientras que el de baja energía coincide para todos los picos. 2) Este ensanchamiento es importante en el rango de 1 a ~ 5 keV; a partir de ~ 5 keV la forma de los picos varía poco con E_p .

6-1-2 Discusión

Para hacer una estimación analítica de la forma de los picos atómicos y su dependencia con la energía del proyectil deberemos tener en cuenta las tres causas mencionadas arriba: efecto Doppler, interacción con la superficie y la posibilidad que se superpongan dos o más picos con energías Auger muy próximas. El ensanchamiento natural de las líneas atómicas y el ensanchamiento debido a la resolución del espectrómetro son despreciables frente a los anchos observados.

a) Corrimientos Doppler:

Consideraremos primero la distribución de corrimientos en

las energías Auger, debida a la distribución de energías cinéticas de los átomos excitados eyectados. El corrimiento Doppler para los electrones Auger del Al está dado por:

$$E_{Dop} = 0.07 \text{ eV} \sqrt{E(\text{eV})} \cos \theta,$$

donde E es la energía cinética del átomo y θ el ángulo formado por las direcciones de movimiento del átomo y del electrón Auger. La dirección que tienen los electrones Auger que llegan al analizador es cercana a la normal a la muestra, ver fig.2-1. Las distribuciones de ángulo y de energía de los átomos eyectados se calcula con el programa de Monte Carlo. En realidad, como dijimos en el capítulo 3, el programa de Monte Carlo no determina completamente la dirección con que escapa el átomo, sólo determina el coseno del ángulo formado por la dirección de movimiento y la normal a la muestra. Con nuestra disposición experimental, éste coseno es precisamente el que interviene en la fórmula del corrimiento Doppler.

En la sección 4-2 determinamos que el parámetro de la simulación que representa a la vida media de la vacancia L dentro del sólido es $T_{sol} \sim 10^{-14}$ seg. Sin embargo, resulta interesante estudiar el efecto de variar este parámetro en el modelo, ya que dará idea de lo que habría que esperar en otros sistemas de diferentes vidas medias.

En la fig.6-2 se muestran las distribuciones de corrimientos Doppler para una energía de 2 keV en los proyectiles y dos valores diferentes de T_{sol} : 10^{-14} seg y 2×10^{-13} seg. Vemos en esta figura que el número total de átomos excitados eyectados aumenta considerablemente con el aumento de T_{sol} y la distribu-

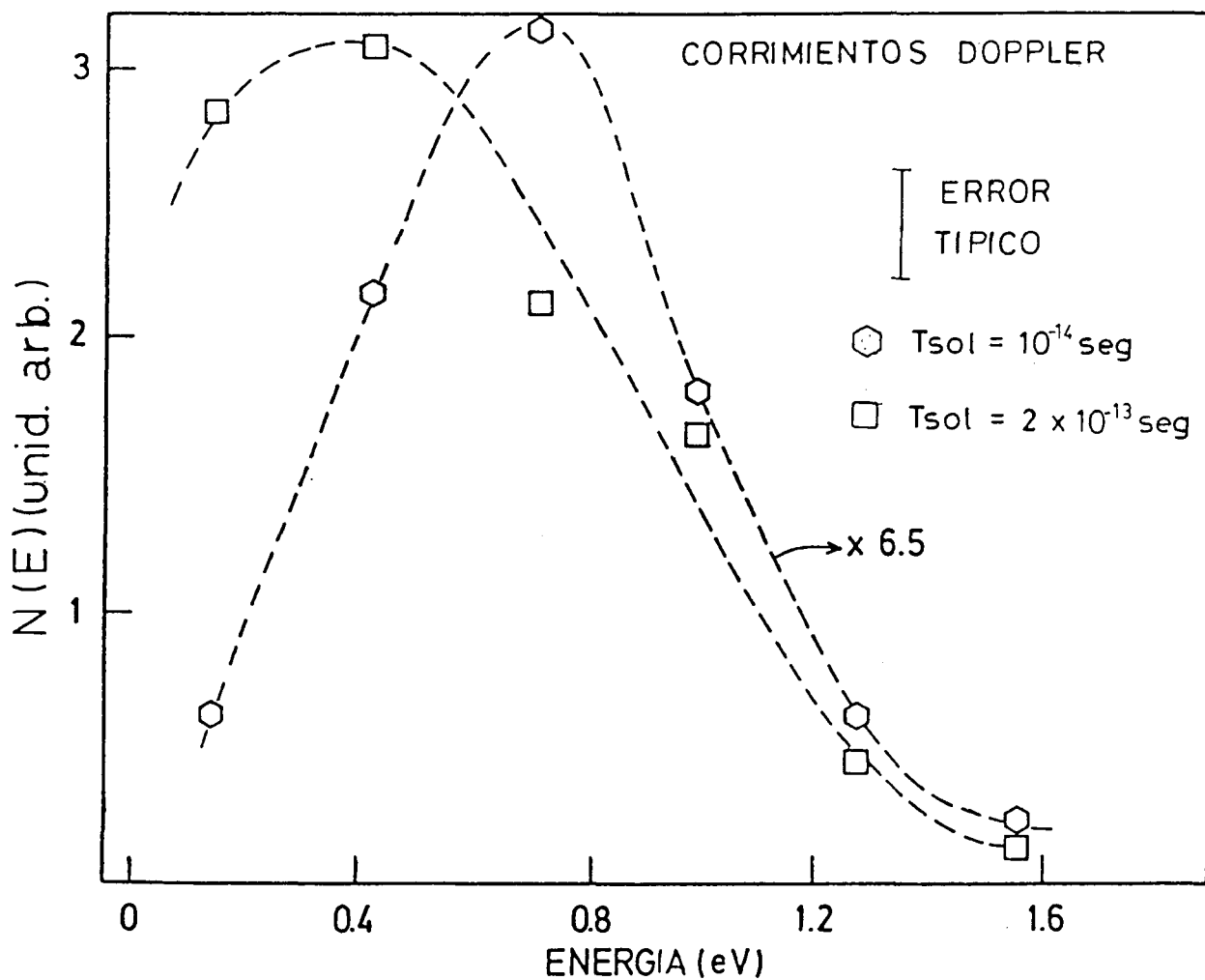


Fig. 6-2: Distribución de corrimientos Doppler en la energías Auger para proyectiles de Ar a 2 keV, y dos valores de la vida media de la vacancia L dentro del sólido: □ — $T_{sol} = 2 \times 10^{-13}$ seg y ○ — $T_{sol} = 10^{-14}$ seg.

ción de corrimientos Doppler se desplaza hacia energías más bajas. La energía cinética media de los átomos excitados eyectados disminuye desde ~ 360 eV para $T_{sol}=10^{-14}$ seg a ~ 220 eV para $T_{sol}=2 \times 10^{-13}$ seg. Una vida media más grande implica que los átomos excitados recorren distancias más largas antes de decaer y por lo tanto pueden escapar más átomos excitados con energías cinéticas bajas, produciendo los efectos mostrados en la fig.6-2.

Para energías de los proyectiles mayores que ~ 5 keV deberemos considerar dos contribuciones a la distribución de corrimientos Doppler: una proveniente de colisiones de excitación entre átomos del blanco (b-b) y la otra de colisiones de excitación proyectil-blanco (p-b). En la fig.6-3 se muestran estas distribuciones para $E_p=10$ keV. Se ve que la contribución proveniente de las colisiones b-b tiene un comportamiento similar a la discutida para $E_p=2$ keV; es algo más ancha, el máximo está desplazado en ~ 0.4 eV hacia energías más altas y la energía media de los átomos excitados eyectados es ~ 800 eV.

La distribución que proviene de las colisiones de excitación p-b es bastante diferente: es más angosta, con su máximo ubicado alrededor de 0.15 eV y una energía media de los átomos excitados de ~ 1100 eV (fig.6-3). Esto significa que la mayoría de los átomos son eyectados a ángulos casi rasantes (en una dirección perpendicular a la de observación). Por lo tanto los electrones que provienen de esta parte del flujo de átomos eyectados casi no deberían tener corrimiento Doppler. Sin embargo, los átomos que tratan de escapar a ángulos rasantes sufren desviaciones por

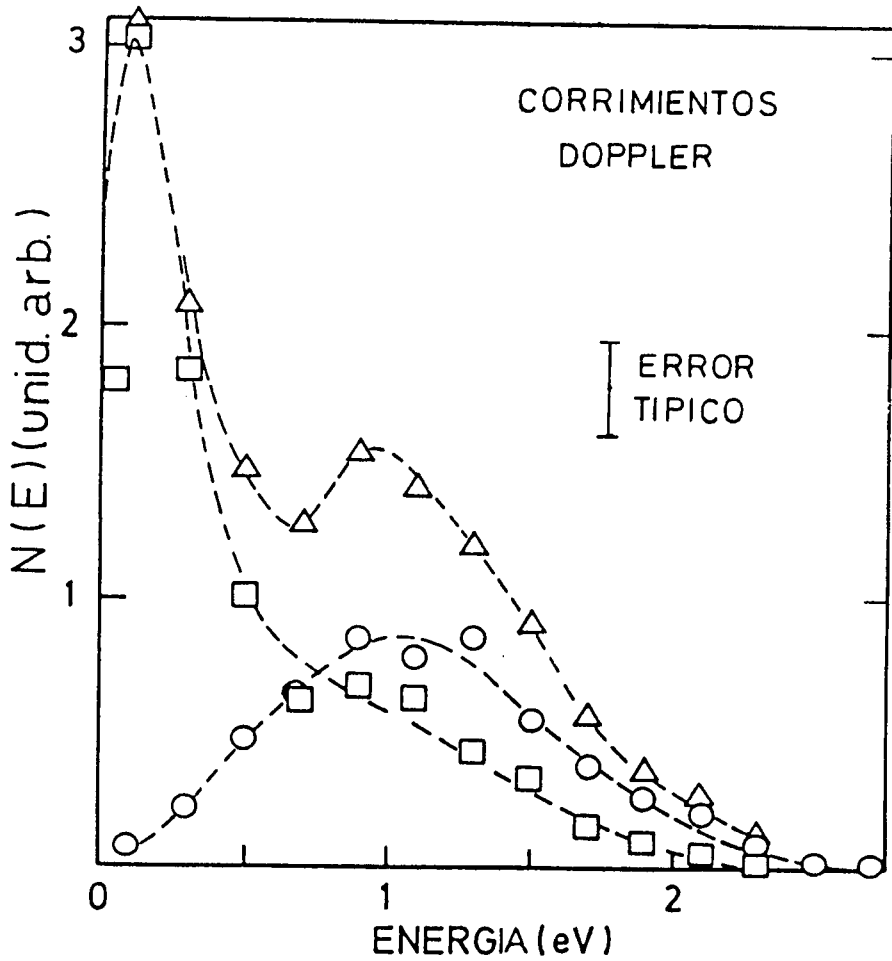


Fig.6-3: Distribución de corrimientos Doppler en las energías Auger para proyectiles de Ar a 10 keV y $T_{sol}=10^{-14}$ seg; ○-contribución de las colisiones de excitación blanco-blanco, □-contribución de las colisiones de excitación proyectil-blanco y △-suma de ambas contribuciones.

interacciones con los átomos de la superficie. Este efecto puede alterar apreciablemente las formas de las distribuciones y no se tienen en cuenta en nuestro programa. Por tal motivo los resultados para energías de los proyectiles tales que las colisiones p-b juegan un papel importante, deben ser considerados en forma cualitativa.

b) Interacción del átomo excitado con la superficie:

La forma de los picos atómicos también es afectada por la interacción entre el átomo excitado que escapa del sólido y la superficie del mismo (interacción a-s, sección 1-3). Para estimar esta interacción se necesita conocer las posiciones de decaimiento fuera del sólido. Estas posiciones se pueden obtener de las distribuciones de ángulo y de energía de los átomos eyectados sólo si se conoce la vida media de la vacancia L fuera del sólido (T_{vac}).

Desafortunadamente la vida media de átomos neutros no ha sido medida ni calculada, aún más, su valor dependerá de la distancia a la superficie. Sin embargo, se puede esperar que el valor de T_{vac} esté acotado por un límite superior igual a 2×10^{-13} seg, que corresponde⁶⁻¹⁴ aproximadamente al átomo aislado y por un límite inferior de 10^{-14} seg, que corresponde⁶⁻¹⁵ al interior del sólido. Nosotros usamos un valor constante e igual a 10^{-13} seg. Este valor es cercano al calculado para el átomo de Si en la configuración de vacancias finales $3s3p$.⁶⁻¹⁴ Creemos que es aplicable esta aproximación porque, para la línea principal, el átomo de Al^e excitado escapa^{6-6,6-10,6-16-17} con una configuración elec-

trónica externa similar a la usada en el cálculo de la vida media de la vacancia L del Si.

En la fig.6-4 mostramos la distribución de las posiciones de decaimiento fuera del sólido para una energía de los proyectiles de 2 keV, $T_{sol}=10^{-14}$ seg y $T_{vac}=10^{-13}$ seg. Vemos que sólo una fracción relativamente pequeña (~13%) decae en los primeros 3Å, el resto de los átomos excitados decae más lejos. Esto nos permite utilizar un modelo simple para describir la interacción a-s.

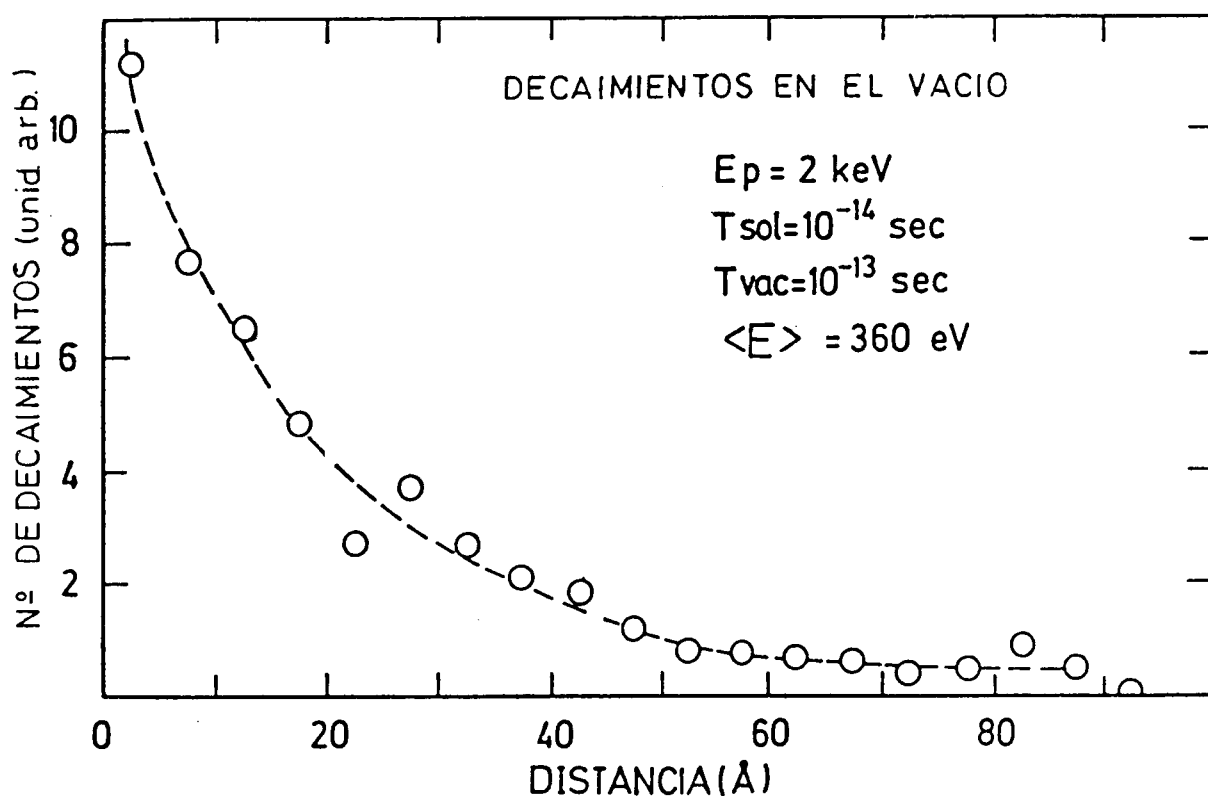


Fig.6-4: Distribución de las posiciones de decaimiento Auger fuera del sólido. La vida media de la vacancia L en el vacío fue considerada constante e independiente de la distancia a la superficie. Nótese que sólo una pequeña fracción de los átomos emitidos decae dentro de los primeros 3 Å.

Para mayores energías de los proyectiles hay una fracción

importante de átomos que provienen de colisiones de excitación p-b, los cuales escapan del sólido a ángulos cercanos a la superficie. Estos átomos decaerán más cerca de la superficie y el modelo que utilizaremos es menos confiable.

Como se describió en la sección 1-3, los niveles de energías de los átomos evolucionan, a medida que se alejan los átomos de la superficie, pasando de los correspondientes al interior del sólido a los del átomo aislado; se corren y se vuelven más angostos. Este corrimiento de energía es consecuencia de la acción combinada de tres potenciales: 1) El potencial repulsivo que proviene del solapamiento de las nubes electrónicas del átomo y sólido, 2) La atracción imagen entre el ión y el metal, y 3) La atracción de van der Waals debida a la polarizabilidad del átomo.

Despreciaremos el efecto del potencial repulsivo porque sólo es importante cerca de la superficie (típicamente para distancias menores que 3 ó 4 Å)⁶⁻¹⁰ y vimos arriba que la mayoría de los átomos decaen lejos de esa zona.

Algo similar ocurre con el ensanchamiento de los niveles por la proximidad de la superficie. Este ensanchamiento varía en forma aproximadamente exponencial⁶⁻¹⁹ con la distancia a la superficie $\Delta = \Delta_0 \exp(\gamma x S)$. Si bien no tenemos valores para los parámetros Δ_0 y γ , valores típicos de los mismos⁶⁻¹⁹⁻²⁰ producen pequeños efectos en la distribución de energía de los electrones Auger.

Los efectos más importantes sobre la línea principal del Al, asignada⁶⁻⁶⁻¹⁰⁻⁶⁻¹⁶⁻¹⁷ a la transición $Al^{0*} K2s^2 2p^5 3s^2 3p^2 \rightarrow Al^+ K2s^2 2p^4 3s 3p$, están dados por la interacción imagen que afecta

al estado inicial de la transición y la interacción de van der Waals que afecta a ambos estados, inicial y final.

En la sección 1-3 presentamos las ecuaciones que describen estas interacciones para un átomo de Al que se aleja del metal. Con ellas se pueden calcular los corrimientos de energía de los estados inicial y final de la transición Auger en función de la distancia a la superficie. Estos corrimientos se muestran en la fig.6-5, conjuntamente con el efecto que producen en la energía de los electrones Auger emitidos en dicha transición. Nótese que los corrimientos son mayores para los electrones que provienen de transiciones que ocurrieron cerca de la superficie. En otras palabras, los átomos con velocidades pequeñas en la dirección de la normal a la superficie son los que producen corrimientos mayores. Este comportamiento de la interacción a-s es justo el opuesto del que presenta el efecto Doppler.

En la fig.6-6 se muestra la distribución de corrimientos de energía en los electrones debido al efecto Doppler y a la interacción átomo superficie. Los parámetros utilizados son: $E_p=2\text{keV}$, $T_{\text{sol}}=10^{-14}$ seg y $T_{\text{vac}}=10^{-13}$ seg. El principal efecto de la interacción a-s sobre las líneas atómicas es producir un desplazamiento adicional de ~ 0.4 eV hacia energías mayores.

Cuando los átomos decaen más cerca de la superficie la forma de las distribuciones es más afectada por la interacción a-s. Como ejemplo de esto último mostramos en la fig.6-7 la distribución de corrimientos de energía para $E_p=2$ keV, $T_{\text{sol}}=2 \times 10^{-13}$ seg y $T_{\text{vac}}=10^{-13}$ seg. Como se dijo anteriormente, con valores más grandes de T_{sol} una mayor cantidad de átomos lentos puede escapar del sólido conservando su estado de excitación. Consecuentemente

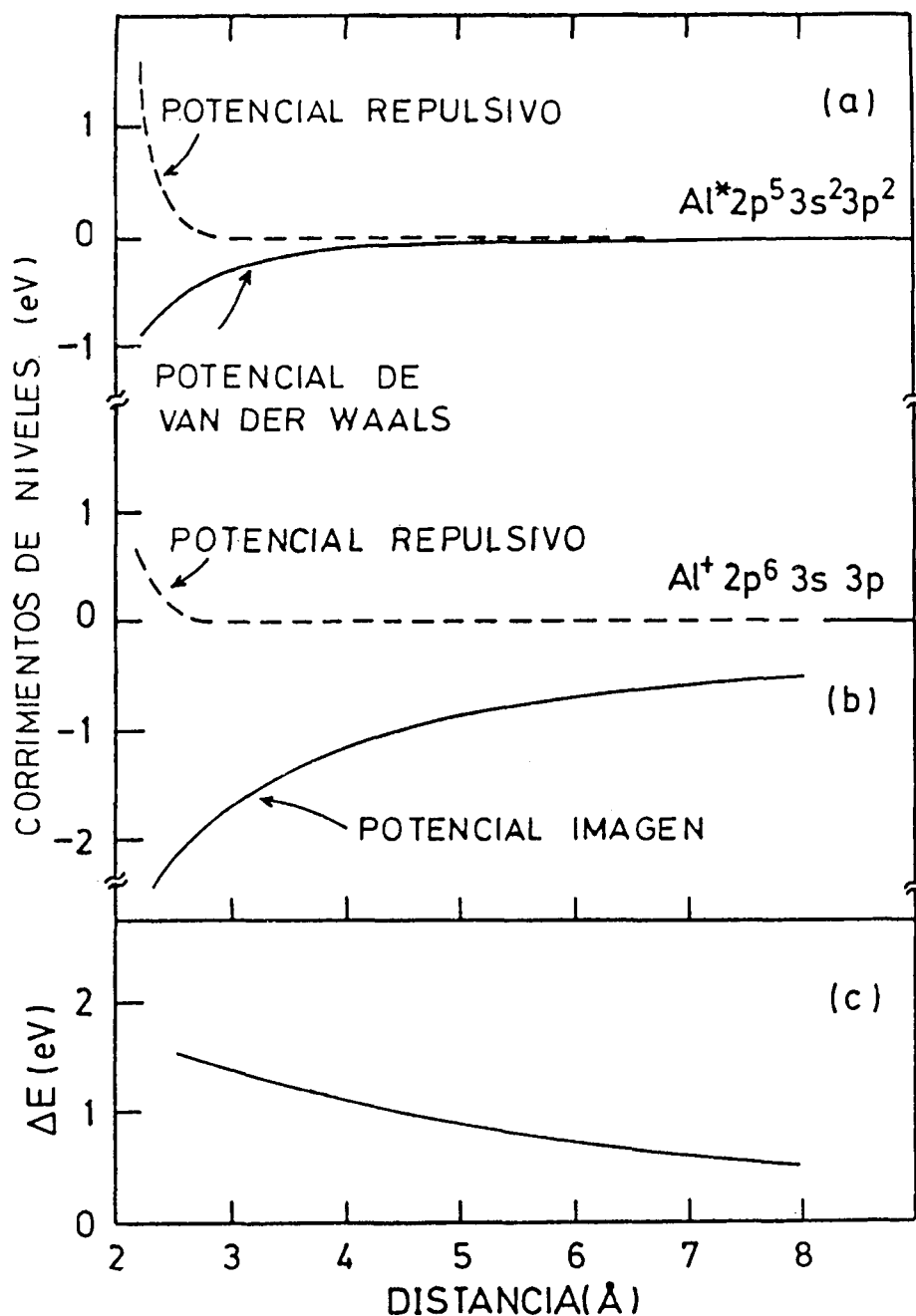


Fig.6-5: Diagrama de los corrimientos de energía en los niveles del átomo emitido por la interacción con la superficie. a) Estado inicial, b) Estado final de la transición Auger correspondiente a la línea atómica principal del Al, c) Efecto de estos corrimientos sobre la energía de los electrones Auger (ΔE).

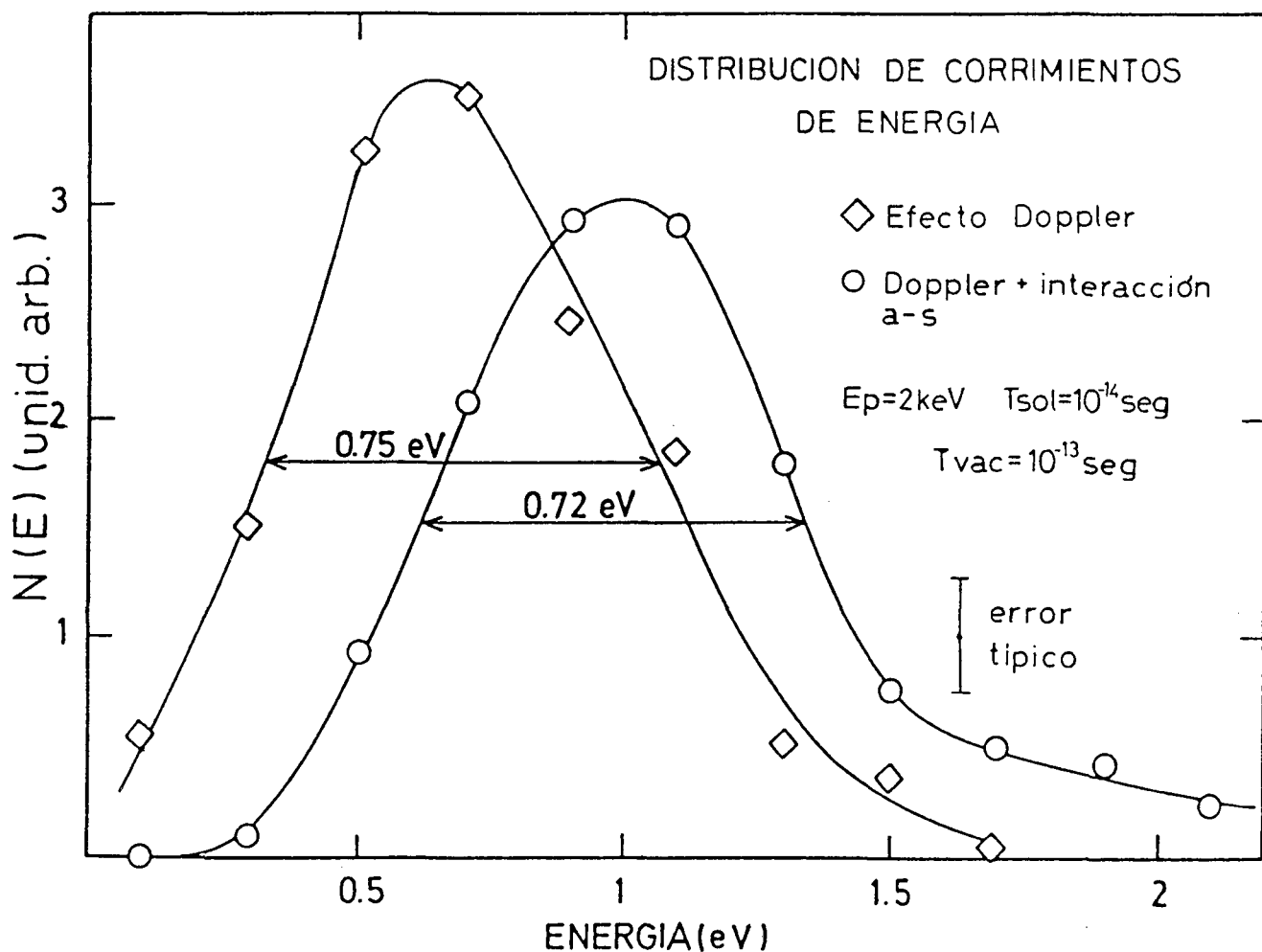


Fig.6-6: Distribución de los corrimientos de energía de los electrones Auger debidos al efecto Doppler y a la interacción átomo-superficie. Los parámetros usados son: $E_p=2\text{ keV}$, $T_{\text{sol}}=10^{-14}\text{seg}$ y $T_{\text{vac}}=10^{-13}\text{seg}$.

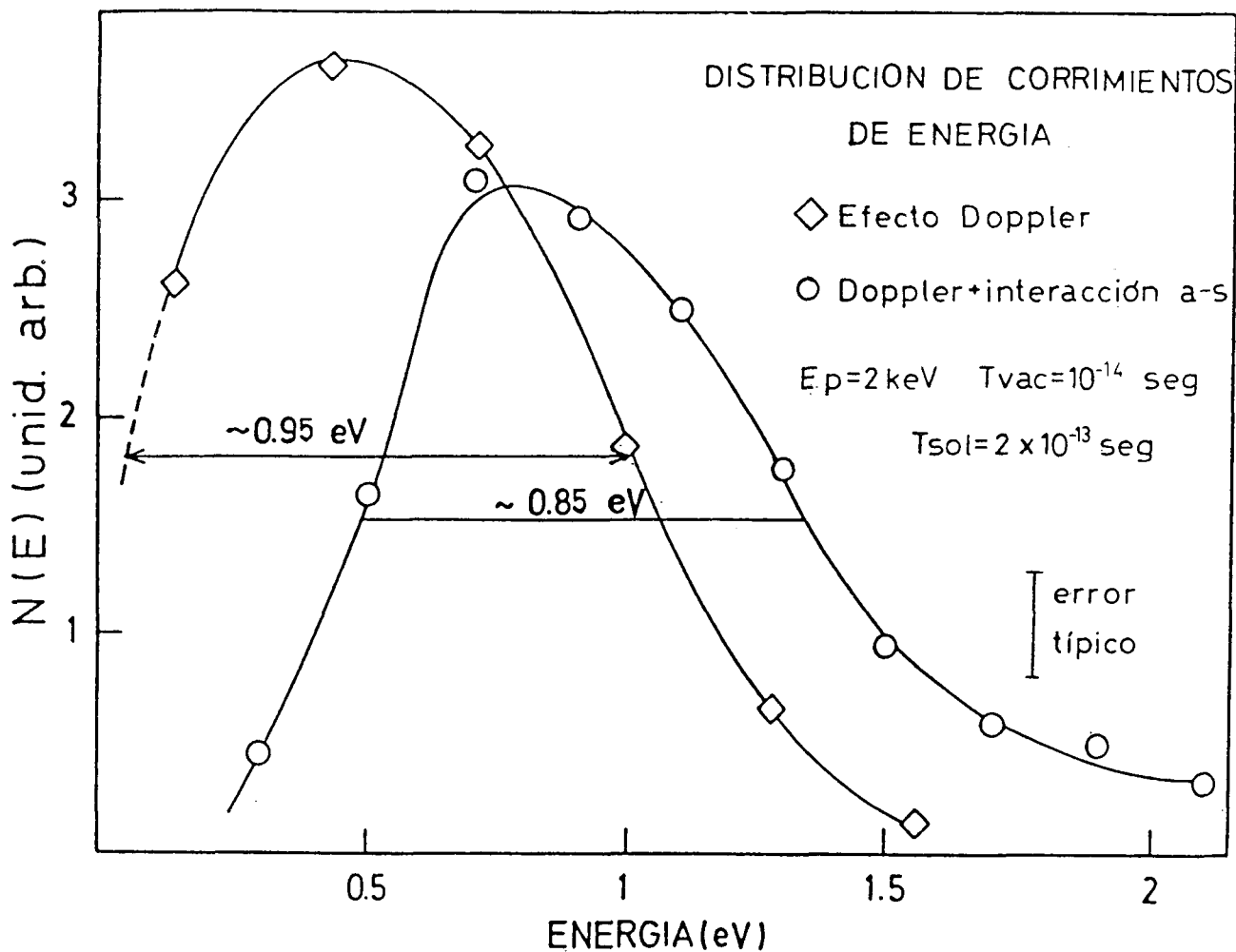


Fig.6-7: Distribución de los corrimientos de energía de los electrones Auger debido al efecto Doppler y a la interacción átomo-superficie. Los parámetros usados son: $E_p=2 \text{ keV}$, $T_{sol}=2 \times 10^{-13} \text{ seg}$ y $T_{vac}=10^{-14} \text{ seg}$.

se producen más decaimientos cerca de la superficie con pequeños corrimientos Doppler y grandes corrimientos debido a la interacción a-s. El efecto total es una distribución más angosta desplazada hacia energías mayores. Este efecto es todavía más importante para los átomos que provienen de colisiones de excitación p-b, porque escapan a ángulos más cercanos a la superficie y por lo tanto decaen más cerca de ella.

c) Comparación con los experimentos:

Para reproducir la forma de las líneas atómicas a partir de las distribuciones calculadas arriba, hemos supuesto una fuente inicial de electrones de 61.7 eV (energía Auger correspondiente a la transición en el átomo libre).⁶⁻⁶ La distribución inicial, tipo función delta (indicada en las figs. 6-9 y 6-10) por una flecha vertical), resulta corrida y ensanchada por: 1) Efecto Doppler, 2) Interacción átomo-superficie y 3) Superposición de dos picos atómicos debido al desdoblamiento del estado inicial de la vacancia L, $2p_{1/2}$ y $2p_{3/2}$.

Los dos primeros ya fueron descritos, el desdoblamiento se tuvo en cuenta superponiendo dos picos atómicos desplazados en 0.4 eV⁶⁻¹⁰ y cuyas intensidades están en la misma relación que las multiplicidades del agujero inicial.

La línea de base para los picos simulados fue obtenida por comparación de los espectros inducidos por iones y por electrones, normalizados a 66 eV (ver fig. 6-8).

En la fig. 6-9 se compara la línea atómica principal del Al,

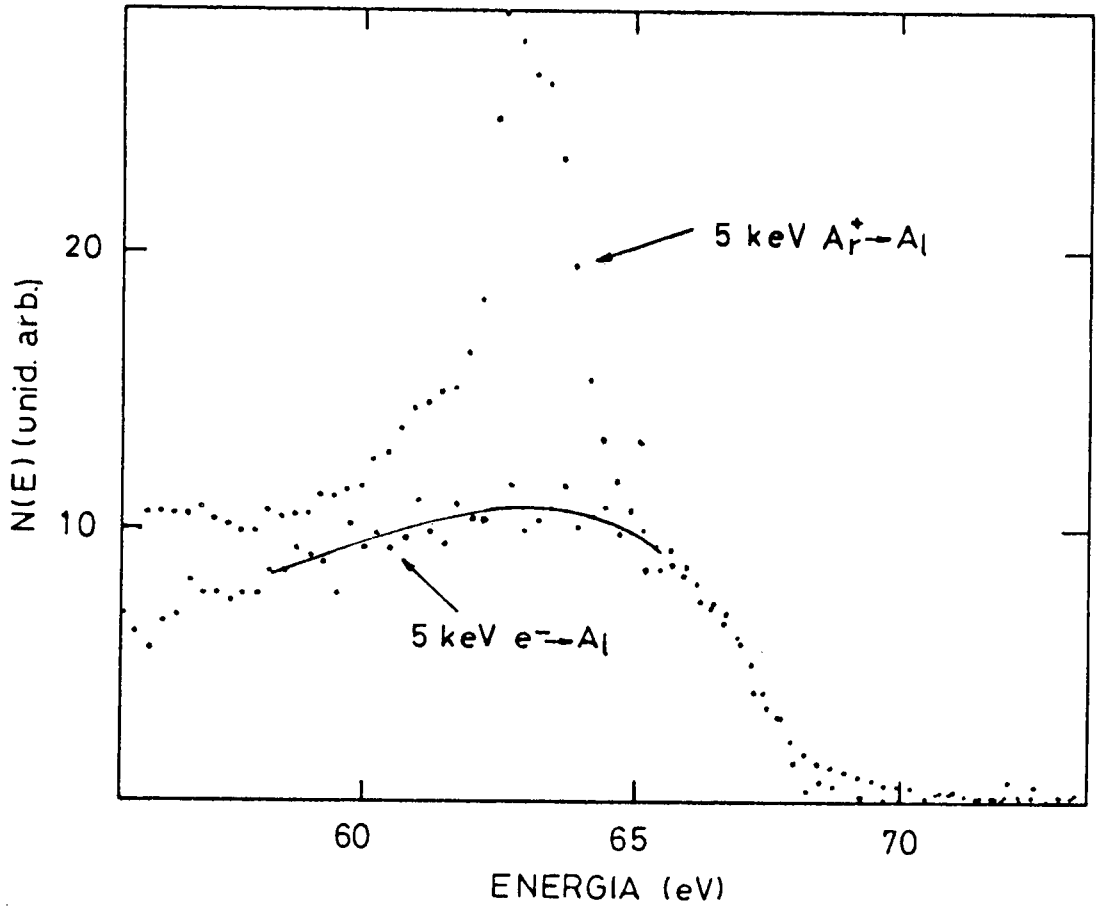


Fig.6-8: Comparación de los espectros Auger del Al inducidos por bombardeo con iones de Ar y con electrones, a 5 keV. Los espectros fueron adquiridos con el equipo de análisis de superficies y están normalizados a 66 keV.

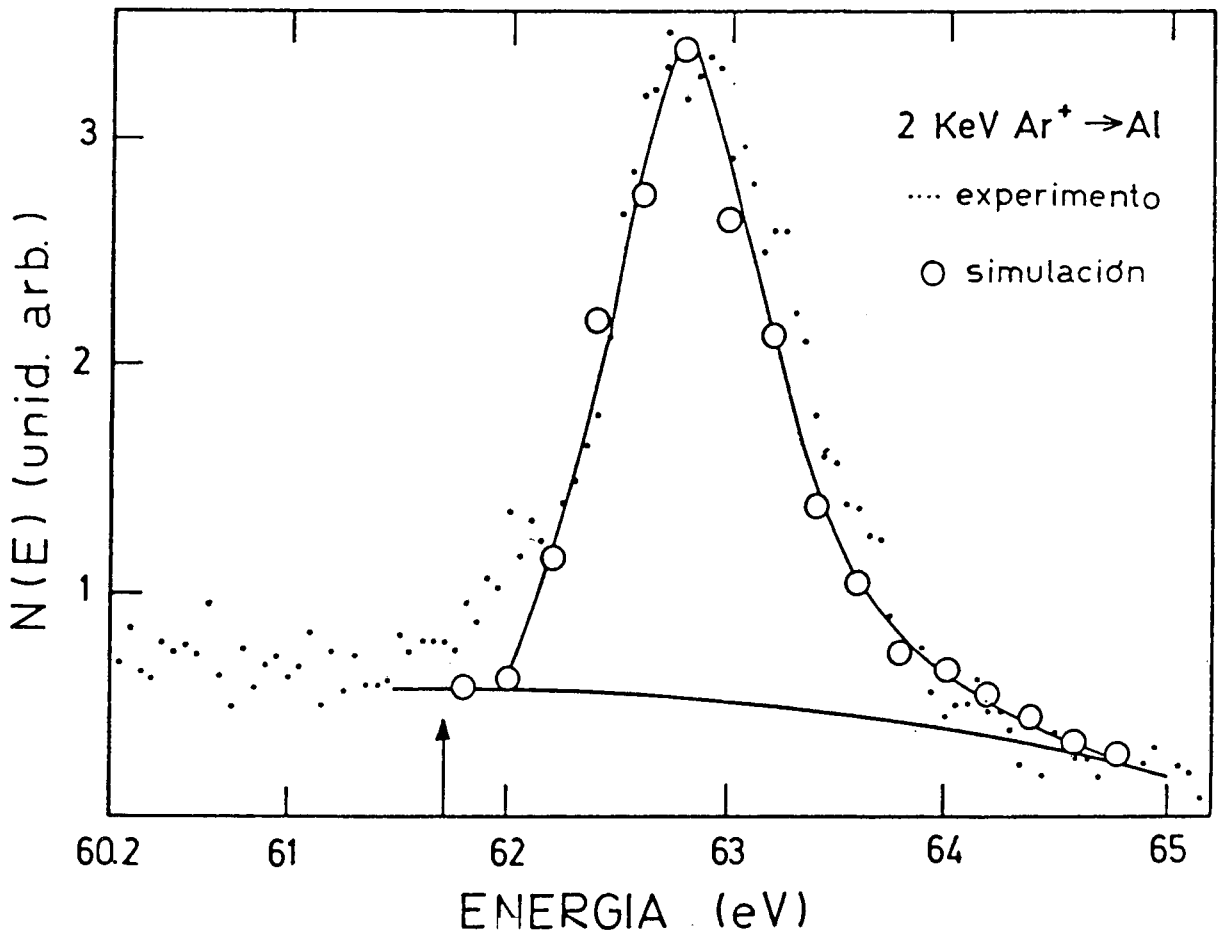


Fig.6-9: Comparación de la forma del pico atómico principal del Al obtenido experimentalmente (...) con el calculado con la simulación de Monte Carlo (O). El espectro experimental fue obtenido por bombardeo con iones de Ar a 2 keV, con el equipo de análisis de superficies, y está normalizado con la simulación a 62.8 eV. En la simulación se consideró el efecto Doppler, la interacción átomo-superficie y el desdoblamiento del estado inicial de la vacancia L.

obtenida por bombardeo con iones de Ar a 2 keV, con la calculada mediante la simulación de Monte Carlo. El acuerdo obtenido es muy alentador y sugiere que las aproximaciones y los parámetros utilizados para describir los procesos de colisión son buenos, en este rango de energías de los proyectiles.

En la fig.6-10 se comparan los picos atómicos experimental y calculado para una energía de los proyectiles de 10 keV. Hemos graficado también la distribución que se obtiene de considerar el efecto Doppler y el desdoblamiento de la vacancia inicial, sin tener en cuenta la interacción a-s. Vemos que en esta última aparece una estructura a 62 eV, que desaparece al incluir la interacción a-s. Esta estructura proviene de los átomos excitados en colisiones p-b que escapan a ángulos cercanos a la superficie y por lo tanto producen electrones Auger con corrimientos Doppler pequeños. Si miramos con detenimiento el pico atómico experimental (ver también la fig.6-1) vemos que para energías mayores que ~4 keV aparece, aunque menos pronunciada, una estructura similar. Creemos que dicha estructura desaparece al incluir en el cálculo la interacción a-s, porque el modelo no describe bien las trayectorias ni el corrimiento en los niveles de energía de los átomos que escapan a ángulos cercanos a la superficie.

Hemos calculado la forma del pico atómico del Al para otras energías de los proyectiles comprendidas entre 2 y 10 keV y hemos obtenido resultados similares a los mostrados en las figs.6-9 y 6-10. El mayor apartamiento entre resultados calculados y experimentales se obtuvo para $E_p \sim 5$ keV. En la fig. 6-11 mostramos tales resultados. Una causa probable del mayor ensanchamiento de la línea experimental es que las colisiones p-b comiencen a producir excitaciones a energías un poco más bajas que la estima-

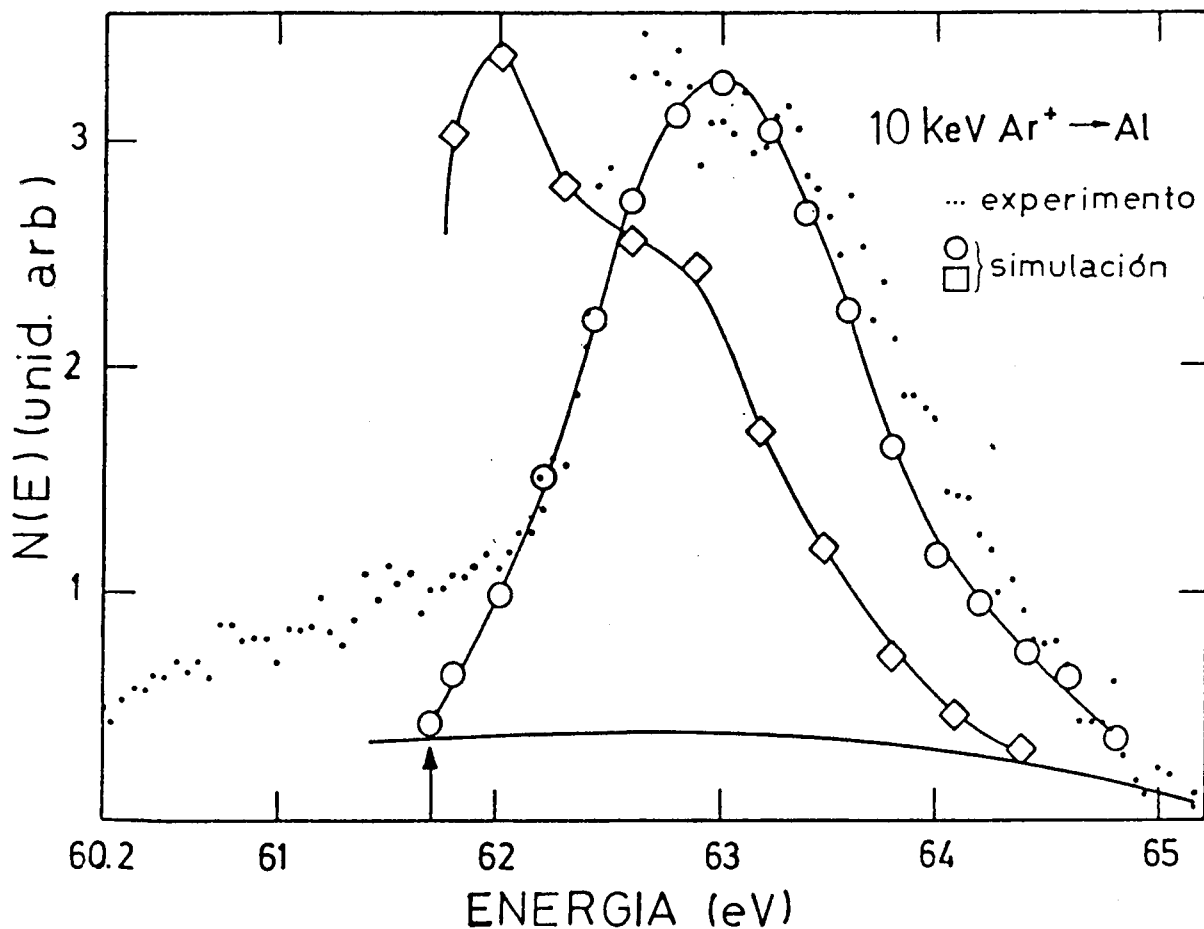


Fig.6-10: Comparación de la forma del pico atómico principal del Al obtenido experimentalmente por bombardeo con Ar a 10 keV (...), con el calculado por la simulación de Monte Carlo.◇ Distribución de corrimientos de energías debidos al efecto Doppler y desdoblamiento del estado inicial de la vacancia L.○ La misma contribución incluyendo la interacción átomo-superficie.

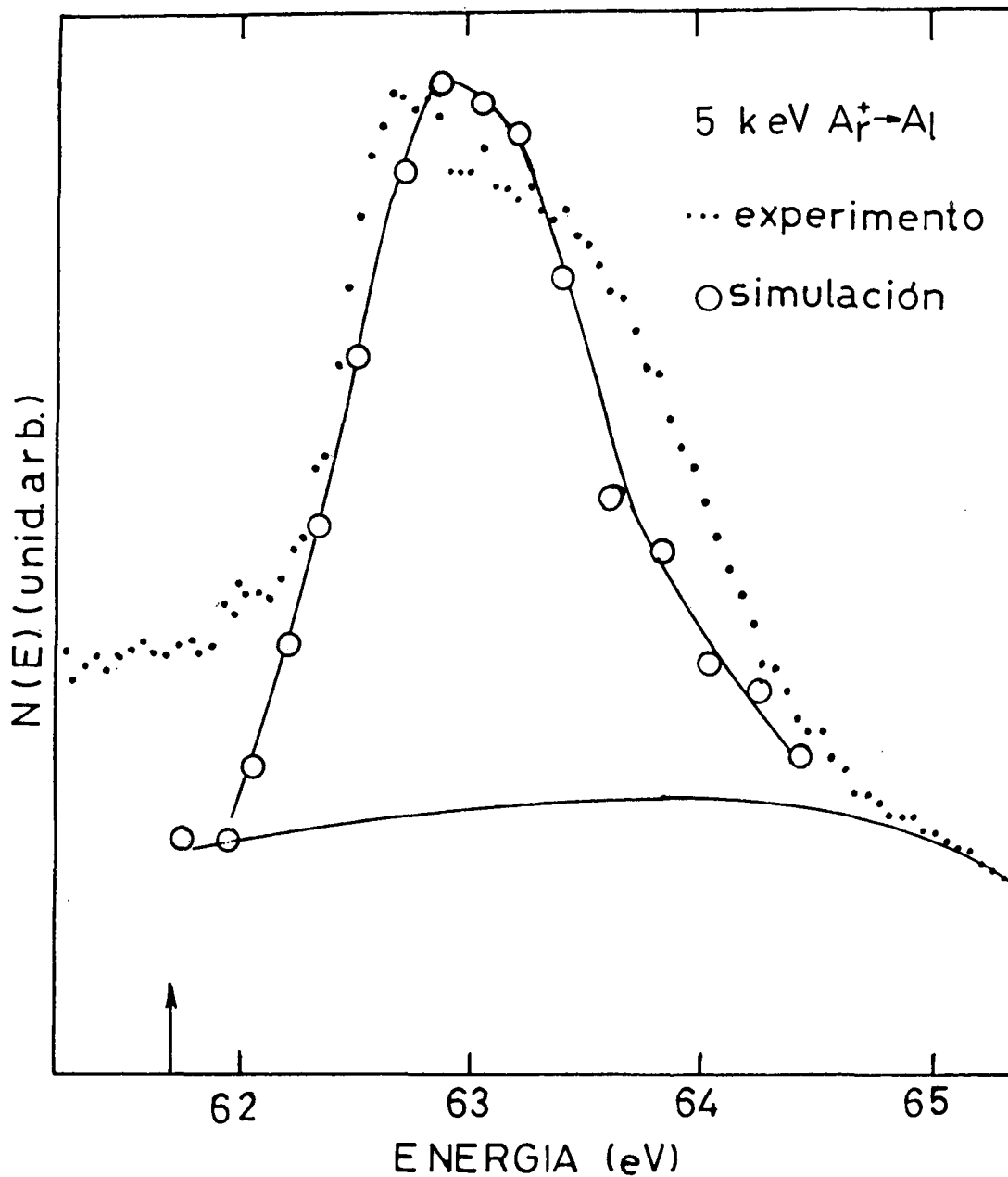


Fig.6-11: Comparación de la forma del pico atómico principal del Al, obtenido experimentalmente por bombardeo con Ar a 5 keV (..), con el calculado por la simulación de Monte Carlo (O).

da en el capítulo 4. Recordemos que un cambio pequeño en la estimación de la distancia crítica de excitación implica un cambio apreciable en la contribución de las colisiones p-b cerca del umbral de excitación. Si aumenta la contribución p-b también aumenta el ancho de la línea Auger.

6-1-3 Conclusiones

Lo expuesto en esta sección nos permite establecer las siguientes conclusiones:

1) El corrimiento Doppler en las energías de los electrones Auger es la causa principal del ensanchamiento de los picos atómicos. Estos corrimientos fueron calculados a partir de las distribuciones en energía y ángulo de los átomos excitados emitidos del sólido.

2) Las distribuciones angulares de los átomos eyectados que provienen de colisiones de excitación b-b son diferentes de aquellas que provienen de colisiones p-b. Con la disposición experimental utilizada los átomos que provienen de colisiones de excitación p-b se mueven en trayectorias cercanas a la superficie. Estas trayectorias pueden ser afectadas por la interacción con los átomos de la superficie.

3) Incluyendo los corrimientos en las energías de los electrones Auger por efecto Doppler, interacción átomo-superficie y desdoblamiento del estado inicial de la vacancia L, se puede reproducir satisfactoriamente la forma de los picos atómicos.

6-2 DEPENDENCIA DE LA FORMA DEL PICO ATOMICO CON LOS ANGULOS DE INCIDENCIA Y DE OBSERVACION

En la sección anterior discutimos la dependencia de la forma del pico atómico principal del Al con la energía del proyectil. Para ello utilizamos una disposición experimental fija en la cual se bombardea la muestra con un ángulo de incidencia de 45° y se observan los electrones emitidos cerca de la normal a la muestra (fig.2-2). En esta sección estudiaremos la dependencia de la forma del pico atómico del Al con el ángulo de incidencia de los proyectiles y el ángulo de observación de los electrones.

Si se cambia el ángulo de incidencia se modifica la intensidad y la forma de las estructuras Auger. Si aumenta el ángulo de incidencia respecto de la normal a la muestra la cascada de colisiones se desarrolla más cerca de la superficie. Esto por un lado favorece la emisión de átomos excitados, con lo cual aumenta la intensidad de las líneas Auger y por otro lado una mayor fracción de los decaimientos en el interior del sólido ocurre más cerca de la superficie, con lo cual también aumenta la intensidad de la estructura ancha.^{4-7,4-21}

Las distribuciones en ángulo y energía de los átomos excitados eyectados varía con el ángulo de incidencia. A incidencia casi rasante puede ocurrir que átomos del blanco que se excitan en la primera capa atómica escapen directamente del sólido, mientras que a ángulos de incidencia normales a la muestra esto no puede suceder, los átomos que escapan sufren más de una colisión. Las diferentes distribuciones de energía y de ángulo de los átomos excitados eyectados determina diferentes distribuciones de

corrimientos de energía en las energías Auger. Por lo tanto, al variar el ángulo de incidencia se modifica también la forma de los picos atómicos.

Si se cambia el ángulo de observación, dejando fijo el ángulo de incidencia, nuevamente se producen cambios en la intensidad y en la forma de las estructuras Auger. Vimos en el capítulo 5 que como consecuencia del pequeño camino libre medio de los electrones Auger dentro del sólido, la intensidad de la estructura Auger ancha disminuye fuertemente para observaciones a ángulos cercanos a la superficie (rasantes). Esta disminución sigue una ley aproximadamente cosenoidal con el ángulo de observación.^{4-12,4-22} La intensidad de los picos atómicos se modifica poco con el ángulo de observación, aquí la modificación en la intensidad fue atribuida a efectos de la topografía de la superficie.⁴⁻⁹⁻⁷

La distribución de los átomos excitados eyectados no es isotrópica, por lo tanto la distribución de corrimientos Doppler, que determina la forma del pico atómico, dependerá de la posición de observación. En particular, en observaciones rasantes los picos atómicos estarán afectados por el hecho que no puede haber átomos que escapen a ángulos rasantes. Esto se debe a los efectos de bloqueo por las irregularidades de la superficie y las interacciones suaves con los átomos de la misma.

En esta sección discutiremos algunos aspectos de la dependencia de la forma del pico atómico principal del Al con los ángulos de incidencia y observación. En esta discusión la ayuda que nos puede brindar el programa de Monte Carlo es pobre por dos

motivos: 1) no tiene en cuenta los posibles cambios en las trayectorias de los átomos fuera del sólido y 2) el cálculo de los corrimientos Doppler para direcciones de observación que no estén cerca de la normal a la muestra requeriría conocer completamente la distribución angular de los átomos emitidos. Con el programa de Monte Carlo es relativamente fácil seguir a los átomos respecto de la dirección dada por la normal a la muestra, en cambio resulta más difícil determinar completamente su distribución angular.

Recientemente Pepper y Aron⁶⁻¹³ estudiaron la forma del pico atómico del Al para varios ángulos de incidencia y observación. En este trabajo los espectros fueron adquiridos por bombardeo de iones de Ne a energías de 1 a 5 keV. Nosotros hemos extendido este análisis a otro rango de energías y disposición experimental con la finalidad de obtener más información sobre la distribución angular de los átomos excitados eyectados y su dependencia con los ángulos de incidencia y observación.

6-2-1 Resultados experimentales

Utilizando el Kevatrilo bombardeamos una muestra de Al, evaporado sobre un sustrato de Si, con iones de Ar y Ne en el rango de energías de 5 a 20 keV. Adquirimos los espectros Auger del Al para ángulos de incidencia comprendidos entre 47° y 86° y ángulos de observación entre 47° y 88°. Siempre utilizaremos la normal a la muestra como dirección de referencia para la medición de ángulos. En la fig.6-12 se muestran dos distribuciones típicas

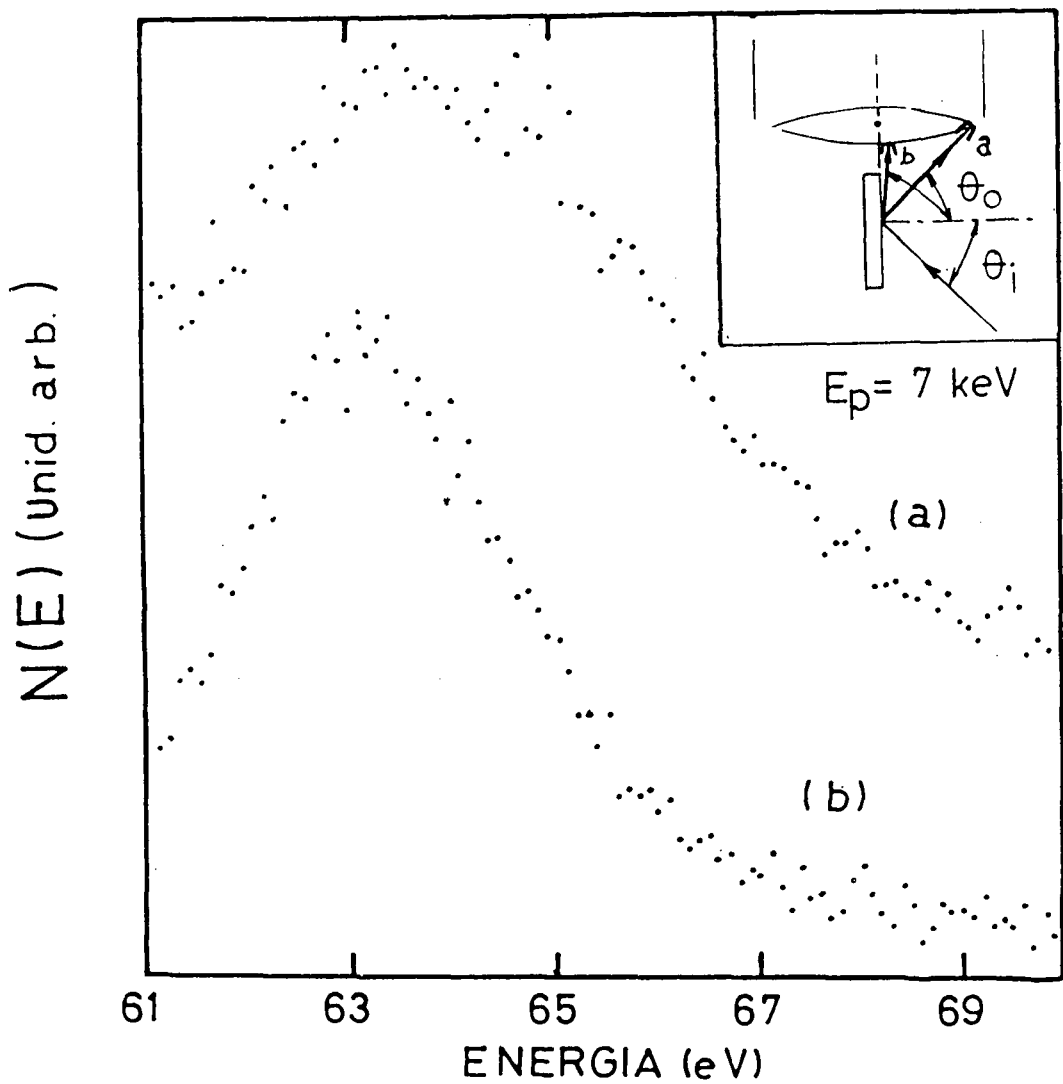


Fig.6-12: Pico atómico principal del espectro Auger del Al inducido por bombardeo con iones de Ar a 7 keV, a un ángulo de incidencia (θ_i) de 47° y un ángulo de observación (θ_o) de: a) 47° , b) 88° , medidos respecto a la normal a la muestra. Los espectros fueron adquiridos con el Kevatrilo.

de electrones Auger correspondientes al pico atómico principal del Al. Las mismas fueron inducidas por Ar a 7 keV incidiendo a un ángulo de 47° . El espectro (a) fue adquirido en una dirección de observación de 47° , que pertenece al plano formado por las direcciones de incidencia y el eje del analizador (ver detalle en la fig.6-12). En esta figura se muestra otro espectro, (b), adquirido en una dirección de observación rasante que no pertenece al plano indicado arriba.

En la fig.6-13 se muestran otros espectros tomados en las mismas condiciones angulares que los de la fig.6-12, y una energía de 20 keV. Las principales características que podemos observar en estos espectros son:

1) Los picos observados a ángulos rasantes poseen un ancho a mitad de altura de ~ 2.5 eV, son más angostos que los observados a 47° , cuyo ancho es 3.5 eV, y están desplazados hacia energías más bajas en ~ 0.5 eV.

2) Manteniendo fijos los ángulos de observación y de incidencia no se observan cambios en la posición ni en la forma de los picos atómicos al variar la energía de los proyectiles de 7 a 20 keV.

Hemos adquirido también varios espectros inducidos por bombardeo con Ne a 10 y 20 keV y encontramos resultados similares a los indicados en 1) y 2) para proyectiles de Ar.

Para mostrar el efecto que produce la variación del ángulo de incidencia presentamos en la fig.6-14 otro espectro del pico atómico del Al, inducido por iones de Ar a 10 keV e incidencia rasante (86°). El ángulo de observación también es rasante, 88°

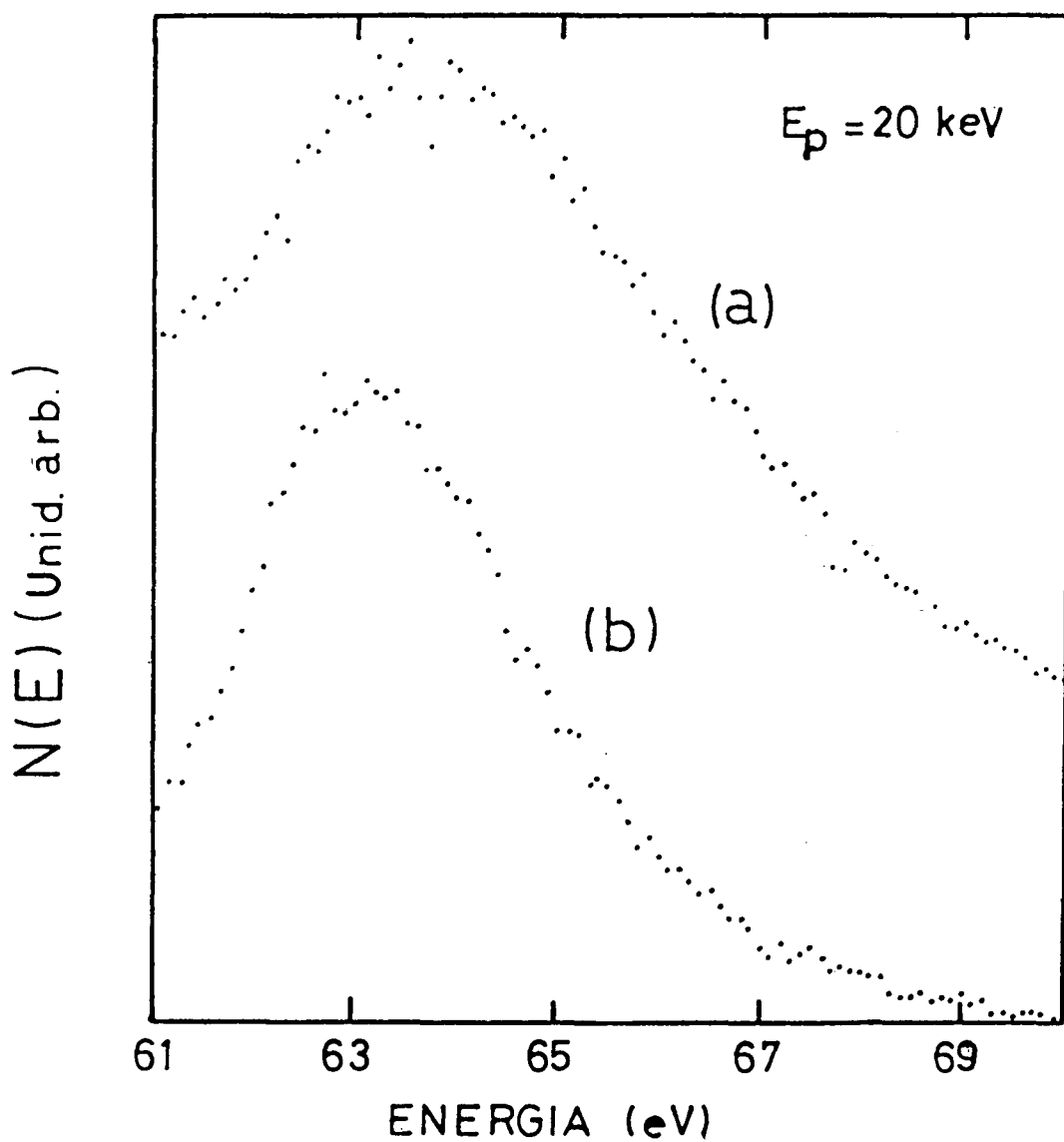


Fig.6-13: Pico atómico principal del espectro Auger del Al adquirido en las mismas condiciones angulares que los espectros de la fig.6-12, y una energía de los proyectiles de 20 keV.

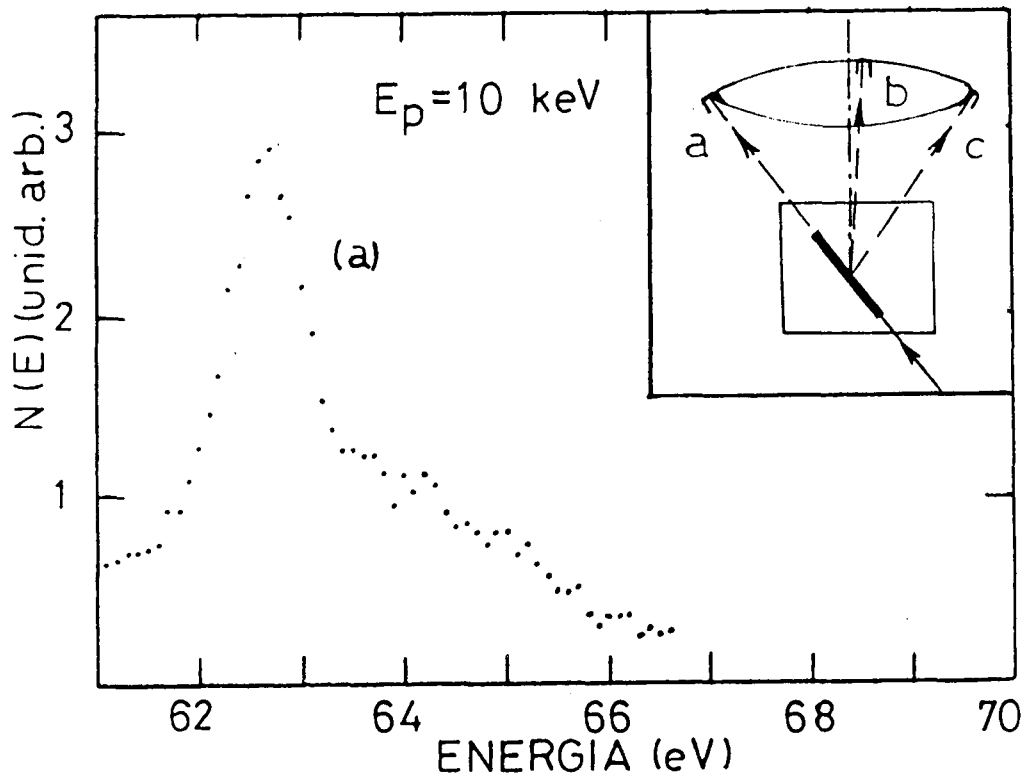


Fig.6-14: Pico atómico principal del espectro Auger del Al inducido por bombardeo con iones de Ar a 10 keV, a ángulos de incidencia y observación rasantes, 86° y 88° , respectivamente. El espectro fue adquirido con el Kevaltrito en la posición a.

(posición a en el detalle de la fig.6-14) En este caso se observa lo siguiente:

a) La intensidad del pico atómico es menor que para otros ángulos de incidencia. Si bien los espectros están dados en unidades arbitrarias, se observa experimentalmente que disminuye notablemente el número de cuentas para la misma corriente incidente.

b) El ancho a mitad de altura es ~ 0.9 eV, menor que los observados para otros ángulos de incidencia.

Es importante mencionar que en estas condiciones de incidencia rasante, la zona irradiada de la muestra es grande (ver detalle en la fig.6-14). Para observaciones también rasantes, esto no produce ensanchamientos o problemas de desenfoques en el analizador porque éste ve una zona "puntual" (posición (a) en el detalle). Por tal motivo no hemos adquirido espectros en las otras posiciones (b) y (c).

Por último destacamos que en aquellas posiciones en las cuales las condiciones experimentales son similares a las utilizadas por Pepper y Aron,⁶⁻¹³ los picos observados están en buen acuerdo con los obtenidos por estos autores.

6-2-2 Discusión

Consideremos primero los espectros tomados a ángulos de incidencia de 47° (figs.6-12 y 6-13) y energías de los proyectiles entre 7 y 20 keV. En la sección 4-2 vimos con el programa de Monte Carlo que en este rango de energías las colisiones asimétricas p-b producen una cantidad importante de las excita-

ciones. A partir de ~ 9 keV pasan a ser las colisiones dominantes. La energía media de los átomos eyectados que provienen de colisiones de excitación p-b, $\langle E \rangle_{pb}$, aumenta aproximadamente de 800 a 1100 eV para E_p de 5 a 12 keV. Cerca del umbral de excitación $\langle E \rangle_{pb}$ aumenta rápidamente y luego se mantienen prácticamente constante. Los átomos eyectados excitados en colisiones b-b tienen energías cinéticas medias que varían más fuertemente con E_p , aumentan desde ~ 250 a 800 eV para aumentos de E_p de 2 a 10 keV, siendo también más fuerte la dependencia con E_p cerca del umbral de excitación. Por encima de ~ 5 keV, $\langle E \rangle_{bb}$ aumenta muy lentamente con E_p . Estos resultados del programa están en buen acuerdo con el comportamiento de los espectros con la energía de los proyectiles (figs.6-1, 6-12 y 6-13), dejando fija la disposición experimental.

Otro resultado del programa que utilizaremos es la distribución de las posiciones de excitación dentro del sólido. Vimos que estas distribuciones, en el caso de excitaciones en colisiones b-b a 2 keV (fig.4-17), tienen un máximo a algunos Armstrongs de profundidad, mientras que la distribución de las posiciones de excitación en colisiones p-b es una función monótonamente decreciente con la profundidad. En la fig.6-15 se muestra esta última para un ángulo de incidencia de 47° y $E_p=10$ keV. De todos los átomos eyectados que provienen de colisiones de excitación p-b, un porcentaje grande, $\sim 59\%$, proviene de colisiones en la primera capa del sólido. Es razonable esperar un porcentaje alto porque todos los átomos que se excitan en la primera capa y se mueven hacia fuera del sólido, decaerán necesariamente en el

vacío. En cambio, aquellos que se excitan en capas más internas tienen una alta probabilidad de decaer dentro del sólido.

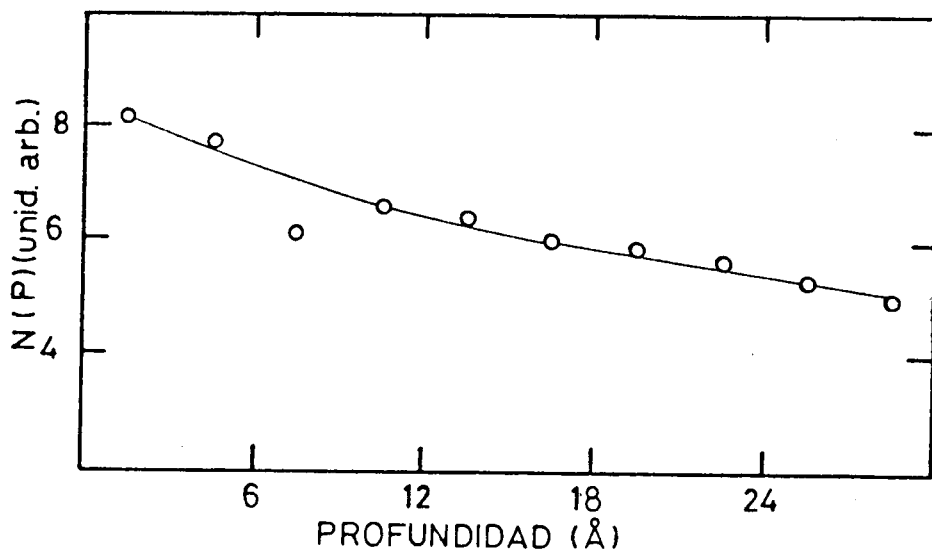


Fig.6.15: Distribución de las posiciones de excitación de la capa L del Al en colisiones primarias Ar-Al. El cálculo se realizó para proyectiles de Ar a 10 keV y un ángulo de incidencia de 47°.

Usando las tablas de Robinson⁶⁻²³ para dispersión clásica y un potencial interatómico de Moliere se puede determinar con qué ángulo y energía escapan los átomos que fueron excitados en la primera capa, para una dada energía de los proyectiles y distancia de máxima aproximación igual a la distancia crítica para que se produzca la excitación (R_c). Las colisiones con distancias de acercamiento menores que R_c también producirán excitaciones, pero, serán menos probables. En la tabla 6-1 mostramos, para $E_p=20$ keV, los datos de energías transferidas al átomo blanco,

los ángulos de eyección medidos desde la dirección inicial del proyectil y las secciones eficaces de colisión. La colisión de mayor sección eficaz corresponde a una distancia de acercamiento máximo igual a R_c . Para cada parámetro de impacto los átomos excitados escapan en una porción de cono como la que se muestra en la fig.6.16. Este cono está afectado en los bordes por las interacciones con los átomos de la superficie que desvían a los átomos eyectados, alejándolos de la superficie.

σ	T (eV)	E_{Dop} (eV)	Ψ
470	500	1.6	80.5
213	900	2.1	77.5
55	2100	3.3	70.3
20.4	4200	4.6	62.

Tabla 6.1: σ -sección eficaz de dispersión, T-energía transferida al átomo excitado, E_{Dop} -corrimiento Doppler correspondiente a una dirección de observación igual a la dirección con que escapa el átomo excitado y Ψ -ángulo de eyección de átomo, medido desde la dirección inicial del proyectil.

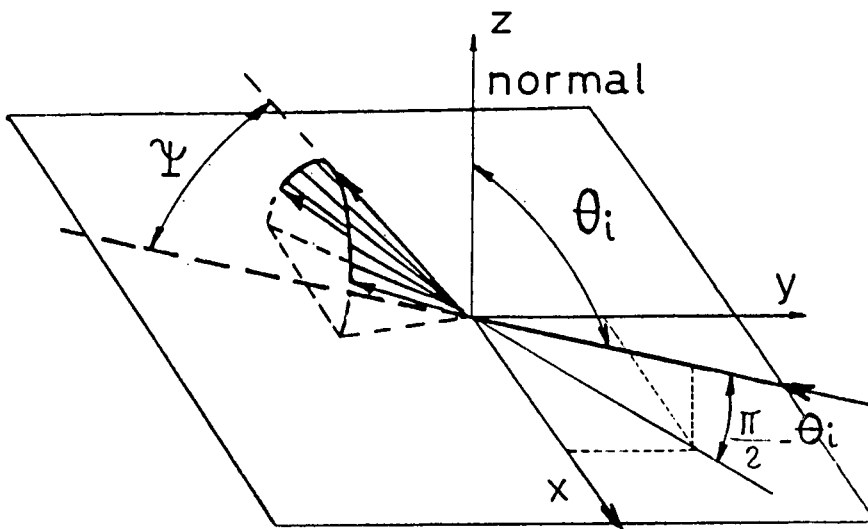


Fig.6-16: Esquema de las posibles direcciones de emisión de los átomos de Al, excitados en colisiones con el proyectil en la primera capa del sólido. Para un dado parámetro de impacto, los átomos excitados escapan en direcciones que están sobre un cono de semiapertura ψ , medida desde la dirección inicial del proyectil. Debido a la irregularidades de la superficie, no puede haber átomos que escapen a ángulos rasantes.

Al disminuir la energía de los proyectiles, el "cono de emisión" tiende a acercarse más a la superficie y resulta entonces más afectado por ella (en particular por la rugosidad). Es importante recordar que el modelo de emisión de átomos excitados que estamos presentando es válido solamente para la porción del flujo eyectado que proviene de colisiones en la primera capa. Para aquellos átomos que provienen de colisiones de excitación p-b en el interior del sólido, o de colisiones b-b, es de esperarse una distribución más isotrópica.

Con estas ideas se puede entender porque los picos atómicos observados a ángulos de 47° están desplazados hacia energías más altas y son más anchos que los observados en otras direcciones. Muchos de los átomos excitados escapan aproximadamente en esta dirección y por lo tanto los corrimientos Doppler (también mostrados en la tabla 6-1) son grandes cuando se observa en esta dirección. Para observaciones rasantes (figs.6-12b y 6-13b) y para observaciones a ángulos cercanos a la normal de la muestra

(fig.6-1) los picos atómicos deben ser más angostos y los máximos deben estar corridos hacia energías más bajas, tal como se observa en los resultados experimentales. No se puede obtener conclusiones de las posiciones relativas de los picos atómicos medidos con diferentes equipos, porque las respectivas calibraciones de las escalas absolutas de energía pueden introducir errores del orden de los corrimientos observados.

Analícemos ahora los espectros obtenidos para ángulos de incidencia casi rasantes (fig.6-14). En estas condiciones la mayoría de los proyectiles son reflejados en colisiones de parámetro de impacto grande con los átomos de la superficie. En el caso ideal de una superficie atómicamente plana, todos los proyectiles serían reflejados y no habría excitación de capas internas. En una superficie real, creemos que se observan los picos atómicos por los escalones y otras irregularidades de la superficie, que posibilitan la ocurrencia de algunas colisiones de excitación (colisiones violentas). En la misma forma que hicimos arriba para incidencia a 47° , se puede ver que los átomos así excitados escapan en una porción de cono como la indicada en la fig.6-17 (ángulos grandes respecto de la dirección de observación). Para una observación rasante como la que corresponde a las figs.6-14 y 5-7 los corrimientos Doppler son pequeños y los picos atómicos resultan muy angostos. No podemos decir exactamente cual es el ancho de los picos atómicos debido al efecto Doppler y la interacción con la superficie porque en estas condiciones los picos pueden estar ensanchados por la resolución del espectrómetro ($\sim 1.5\%$).

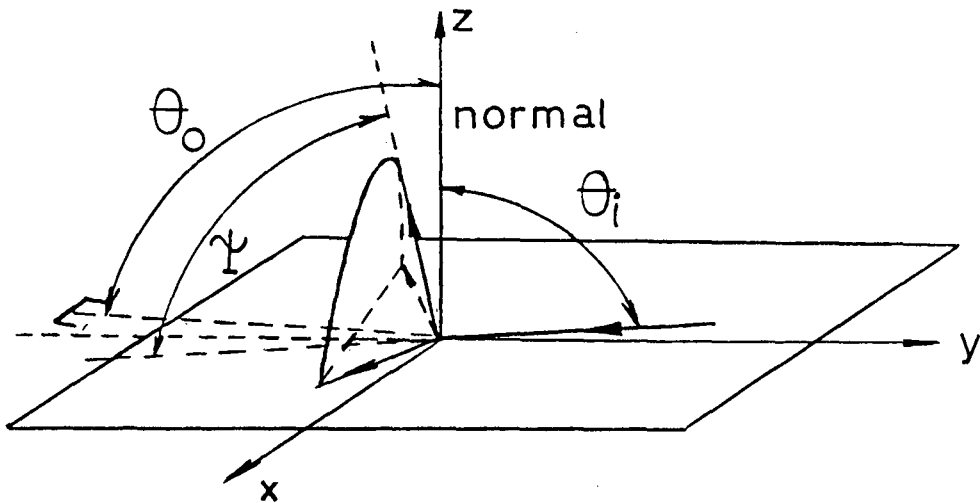


Fig.6.17: Esquema de las posibles direcciones de emisión de los átomos de Al, excitados en colisiones con el proyectil (Ar) en la primera capa del sólido, para ángulos de incidencia (θ_i) rasantes. Nótese que para observaciones rasantes la componente de la velocidad de los átomos excitados en la dirección de observación (θ_o) es pequeña.

6-2-3 Conclusiones

De la discusión precedente se puede concluir lo siguiente:

1) Para un ángulo de incidencia de 47° y energías de los proyectiles mayores que ~ 5 keV, hay dos contribuciones diferentes al flujo total de átomos excitados eyectados. Una de ellas es fuertemente anisotrópica y podría estar constituida por átomos que se excitan en colisiones p-b en la primera capa del sólido. La otra contribución es más isotrópica y proviene de átomos que se excitaron en el interior del sólido.

2) Para ángulos de incidencia y observación rasantes y energías de los proyectiles mayores que 5 keV (fig.6-14), los picos atómicos son más angostos que para otras disposiciones experimentales. Esto parece indicar que en estas condiciones la contribución dominante es la que proviene de colisiones de excitación en la superficie del sólido.

REFERENCIAS

- 6.1 C.J. Powell, Phys. Rev. Lett. 30 (1973) 1179.
- 6.2 P.J. Feibelman, E.J. McGuire, y K.C. Pandey, Phys. Rev. B15 (1977) 2202, B17 (1978) 690.
- 6.3 D.W. Jennison, Phys. Rev. Lett. 40 (1978) 807.
- 6.4 D.E. Ramaker, Phys. Rev. B25,12 (1982) 7341.
- 6.5 D.R. Jennison, H.H. Madden, y D.M. Zehner, Phys. Rev. B21,2 (1980) 430
- 6.6 R. Whaley, y E.W. Thomas, J. Appl. Phys. 56,5 (1984) 1505.
- 6.7 M. Negre, J. Mischler, y N. Benazeth, Surface Sci. 157 (1985) 436.
- 6.8 M. Banouni, J. Mischler, M. Negre, y N. Benazeth, Surface Sci. Lett. 163 (1985) L720.
- 6.9 J. Mischler, M. Banouni, C. Benazeth, M. Negre, y N. Benazeth, Rad. Effects 91 (1986) 255.
- 6.10 R.A. Baragiola, E.V. Alonso, y H.J.L. Raiti, Phys. Rev. A25 (1982) 1969.
- 6.11 K. Wittmaak, Surf. Sci. 85 (1979) 69.
- 6.12 K. Saiki, y S. Tanaka, Nucl. Inst. & Methods in Phys. Res. B2 (1984) 512.
- 6.13 S.V. Pepper, y F.R. Aron, a publicarse en Surface Sci.
- 6.14 D.L. Walters, y C.P. Bhalla, Phys. Rev. A4,6 (1971) 2164.
- 6.15 P.M. Citrin, G.K. Wertheim, y M. Schluter, Phys. Rev. B20 (1979) 3067.
- 6.16 W.A. Metz, K.O. Legg, y E.W. Thomas, J. Appl. Phys. 51 (1980) 2888.
- 6.17 J.A.D. Matthew, Phys. Scripta T6 (1983) 79.

- 6.18 H.D. Hagstrum, en Inelastic Ion-Surface Collisions, ed. N.H. Tolk, J.C. Tully, W. Heiland, y C.W. White, (Academic, New York, 1977), p. 1.
- 6.19 N.D. Lang, Phys. Rev. B27,4 (1983) 2019.
- 6.20 N.D. Lang, y A.R. Williams, Phys. Rev. B18 (1978) 616.
- 6.21 M. Hou, C. Benazeth, N. Benazeth, y C. Mayoral, Nucl. Instr. & Methods B13 (1986) 645.
- 6.22 C. Benazeth, N. Benazeth, y L. Viel, Surface Sci. 78 (1978) 625.
- 6.23 M.T. Robinson, en Tables of Classical Scattering Integrals, Rept. ORNL-4556 (Oak Ridge, 1970).

CONCLUSIONES GENERALES

El estudio de los espectros de electrones Auger de blancos sólidos, inducidos por bombardeo con proyectiles pesados, nos permitió establecer algunas conclusiones particulares acerca de los mecanismos de creación de vacancias internas en blancos de Be, Mg y Al, y de los procesos de desexcitación Auger. Estas conclusiones se encuentran al final de las secciones donde se ha tratado cada tema; aquí plantearemos sólo conclusiones generales y algunas propuestas para trabajos futuros.

Del análisis de los procesos de excitación de capas K y L se concluye que para comparar los resultados experimentales con los modelos teóricos de probabilidades y secciones eficaces de excitación, se debe evaluar primero el frenamiento de los proyectiles dentro del sólido y la contribución de la cascada de colisiones. Nuestro trabajo¹⁻², junto con otros previos,³⁻⁵ muestran que la simulación por Monte Carlo es una buena herramienta para efectuar dichas evaluaciones. En los sistemas colisionantes estudiados vimos que, con excepción de He y Ne sobre blancos de Al y Mg, cerca del umbral de excitación, las vacancias se producen preferentemente en la cascada de colisiones entre átomos del sólido. A medida que aumenta la energía de los proyectiles, también aumenta la proporción de vacancias producidas en las colisiones primarias entre el proyectil y los átomos del blanco.

Un aspecto de las colisiones ión-sólido que ha sido poco estudiado aún, y que interviene en la producción de vacancias internas, es la población de los orbitales moleculares externos,

justo antes de la colisión de excitación. Para estos estados empieza a fallar la aproximación de electrón independiente y con ella las reglas de correlación entre om . Creemos que la confrontación de modelos teóricos de excitación de capas internas con los experimentos, en forma similar a lo hecho en el caso del Be, puede dar alguna información sobre este tema.

La identificación de las estructuras Auger atómicas, provenientes de decaimientos fuera del sólido, es otro de los problemas aún no completamente resueltos. Hemos visto en el capítulo 5 que en algunos casos es posible identificar dichas estructuras en base a comparaciones con espectros de fase gaseosa y al análisis de las posibles transiciones electrónicas entre el sólido y el átomo eyectado^{C-1}. El bombardeo y la observación a ángulos rasantes produce espectros Auger donde la contribución de los decaimientos en el interior del sólido (estructura ancha) es pequeña, facilitándose de esta manera la observación de las estructuras atómicas. Esta disposición experimental nos ha permitido identificar un pico atómico del Si, el cual no había sido observado antes porque está justo en el borde de alta energía de la estructura Auger ancha^{C-6}. Pensamos que el estudio en condiciones de incidencia rasante de otros sistemas colisionantes, en particular del comportamiento relativo de las intensidades y la forma de los picos atómicos, puede dar más información sobre los decaimientos en la superficie y fuera de la misma, y también sobre la interacción entre el átomo eyectado y la superficie.

En el capítulo 6 vimos que la forma de las estructuras atómicas está determinada principalmente por el efecto Doppler en las energías Auger, debido a la distribución de velocidades de

los átomos excitados emitidos del sólido, y en menor medida por el corrimiento de los niveles de energía del átomo eyectado, debido a la interacción con la superficie. Las dos contribuciones fueron calculadas para el pico atómico principal del Al, mediante el programa de Monte Carlo. Incluyendo en este cálculo el desdoblamiento de la vacancia inicial $2p_{1/2}$ y $2p_{3/2}$ se obtuvo un buen acuerdo con los resultados experimentales.⁶⁻²

El análisis de la forma de las estructuras atómicas y su dependencia con la energía y disposición experimental da información sobre el desarrollo de la parte violenta de la cascada de colisiones, la emisión de átomos excitados y los efectos de la topografía de la superficie. Por otro lado, el conocimiento de las diferentes contribuciones al fondo de electrones secundarios permitirá aislar con más precisión, la estructura Auger ancha. Su estudio puede dar información sobre la densidad de estados de la banda de valencia perturbada por la cascada de colisiones y sobre los efectos de proximidad de otros átomos en el momento del decaimiento Auger.⁶⁻⁷

REFERENCIAS

- C.1 O. Grizzi, y R.A. Baragiola, Phys. Rev. A30,3 (1984) 2297.
- C.2 O. Grizzi, y R.A. Baragiola, a publicarse en Phys. Rev. A.
- C.3 J.J. Vrakking, y A. Kroes, Surface Sci. 84 (1979) 153.
- C.4 T.D. Andreadis, J. Fine, y J.A.D. Matthew, Nucl. Inst. & Methods 209/210 (1983) 495.

- C.5 C. Benazeth, N. Benazeth, y M. Hou, Surface Sci. Lett. 151 (1985) L137.
M.Hou, C. Benazeth, N. Benazeth, y C. Mayoral, Nucl. Inst. & Methods B13 (1986) 645.
- C.6 L. De Ferrariis, O. Grizzi, G. Zampieri, E.V. Alonso, y R.A. Baragiola, Surface Sci. Lett. 167 (1986) L175.
- C.7 V.V. Afrosimov, G.G. Meskhi, N.N. Tsarev, A.P. Shergin, Sov. Phys. JETP 57,2 (1983) 263.

APENDICE

En este apéndice presentamos un listado del programa de simulación por Monte Carlo, adaptado para estudiar las colisiones Ar-Al a 4 keV, un listado del archivo de salida de datos e información adicional que puede resultar útil para el empleo del programa.

El programa ha sido implementado en la computadora VAX Version V del Centro Atómico Bariloche. Para efectuar 160.000 historias y generar el archivo de salida mostrado en este apéndice se utilizaron aproximadamente 80 minutos de tiempo de CPU. El listado corresponde a una de las versiones más elaboradas del programa, en la cual se estudian las excitaciones en colisiones b-b y los decaimientos Auger. Otras versiones, utilizadas para estudiar sólo las excitaciones producidas en colisiones proyectil-blanco, o las distribuciones de las posiciones de excitación, sin considerar el decaimiento, insumieron tiempos de CPU menores, entre 15 y 60 minutos.

Las cantidades $\cos^2(\theta/2)$ y $\sin^2(\theta/2)$ (θ ángulo de dispersión), y la distancia de máximo acercamiento de los núcleos durante la colisión (R), se calculan mediante la subrutina MAGIC.¹ En el listado mostrado, esta subrutina aparece incorporada al programa principal. En cada colisión Al-Al se compara R con la distancia crítica de excitación (R_{TH2}), si $R < R_{TH2}$ se considera que se produjo la excitación de un electrón 2p de uno de los átomos de AL.

En el programa utilizado para estudiar la excitación de la capa K del Be hemos incluido una subrutina que calcula la proba-

bilidad de excitación (P) en función de la energía y el parámetro de impacto, EREC y B, respectivamente. Esta subrutina transforma EREC y B en la velocidad del proyectil y el parámetro de impacto, expresados en las unidades reducidas para acoplamiento rotacional $2p\sigma-2p\pi$, de Taulbjerg y col.^{A-2} Con estos datos, la subrutina calcula P, interpolando linealmente en la tabla de resultados que proveen los autores.^{A-2}

Los datos de entrada y las unidades en las cuales deben ser expresados están indicados en el listado del programa (ver también Ref.A.1). Todas las energías se expresan en eV y las longitudes en Armstrongs. El ángulo de incidencia de los proyectiles (ALPHA) está expresado en grados y se mide respecto de la normal a la superficie del blanco. Los corrimientos en las energías de los electrones Auger por efecto Doppler se calculan por $EDOP = DOPP \sqrt{ER(I)} * COSI(I)$, donde ER(I) es la energía del átomo I, COSI(I) el coseno del ángulo formado por las direcciones de movimiento del átomo y la normal a la superficie del sólido, y DOPP una constante que depende de las masas del electrón y del átomo, y de la energía Auger. Para el pico principal del Al resulta $DOPP = 0.07 \text{ eV}^{1/2}$.

El corrimiento en las energías Auger por la interacción entre el átomo excitado eyectado y la superficie se calcula por:

$$ESUP = CI1/(AISP-SI1)-CM1/((AISP-SMI)**3)+CI2/((AISP-SI2)**3)$$

donde el primer término corresponde a la interacción imagen y los otros dos a la interacción de van der Waals, debida a la polarización del átomo metaestable (estado inicial de la transición

Auger) y del ión (estado final). AISF es la posición donde ocurre el decaimiento Auger. El cálculo de las otras constantes fue descrito en la sección 1-3.

Las constantes DELTA Y BRO se utilizan para estimar el efecto del ensanchamiento de los niveles del átomo eyectado (debido a la interacción con la superficie), sobre la distribución de energías Auger. La dependencia de este ensanchamiento con la distancia a la superficie del sólido (S) se calcula por:

$$BROAD = DELTA * \exp(-BRO * S).$$

La salida del programa muestra primero los datos de entrada. Luego, el número de proyectiles retrodispersados, transmitidos, los átomos del blanco eyectados con energías mayores que la de corte, y los eyectados excitados; todos con sus correspondientes energías medias. Otros datos que provee el archivo de salida son:

1) Las distribuciones de corrimientos Doppler en función de la posición donde ocurren los decaimientos Auger. Estos corrimientos están expresados por $\sqrt{ER(I)} * COSI(I)$. La primera columna de la matriz da los valores de la profundidad en Armstrongs, la última columna da la suma de los átomos que decayeron en cada intervalo de profundidad. La primera fila (profundidad = 0 A) corresponde a los átomos excitados emitidos del sólido y la última fila da la suma de los átomos desexcitados en función del corrimiento Doppler.

2) Las distribuciones de las posiciones de excitación y decaimiento Auger dentro del sólido. Los últimos números de estas distribuciones dan la suma de las excitaciones y decaimientos ocurridos a profundidades mayores que 30 A. Cuando sólo interesan

las excitaciones y decaimientos que ocurren cerca de la superficie se puede incluir una profundidad de corte, a partir de la cual los átomos dejan de ser seguidos, acortando en forma apreciable el tiempo de cálculo.

3) Un número proporcional a la cantidad de electrones Auger que escaparon del sólido sin pérdida de energía.

4) La distribución de las posiciones de decaimiento Auger fuera del sólido.

5) La distribución de los corrimientos en las energías Auger debida al efecto Doppler y a la interacción del átomo eyectado con la superficie.

REFERENCIAS

- A.1 J.P. Biersack, y L.G. Haagmark, Nucl. Instr. & Methods, 174 (1980) 257; J.P. Biersack, y W. Eckstein, Appl. Phys. A34 (1984) 73.
- A.2 K. Taulbjerg, J.S. Briggs, y J. Vaaben, J. Phys. B9 (1976) 1351.

```

0001 C PROGRAM ISET. FOR (MAR-86)
0002 C THIS IS A MONTE CARLO TRIM PROGRAM ADAPTED FOR STUDY OF INNER-
0003 C SHELL EXCITATION AND AUGER EMISSION.
0004
0005 REAL MU, M1, M2, LS, LM, LF, LO, KL, KL2, K, KASIG, K2ASIG
0006 DATA PI/3, 1415925/
0007 DIMENSION COSI(200), XR(200), ER(200), BV(100), BV2(100)
0008 DIMENSION MEX(200), MEXPT(20,10), VCOS(40), NSURD(100), NEL(50)
0009 DIMENSION NEX(30), NDECA(30)
0010 OPEN(UNIT=4, FILE='D1. DAT', STATUS='NEW')
0011
0012 C INPUT DATA
0013
0014 C PROJECTILE ATOMIC NUMBER & MASS
0015 Z1=18.
0016 M1=40.
0017 C TARGET ATOMIC NUMBER & MASS
0018 Z2=13.
0019 M2=27.
0020 C TARGET DENSITY (GR/CM**3)
0021 RHD=2.7
0022 C PROJECTILE ENERGY (EV)
0023 E0=4000.
0024 C TARGET THICKNESS (ARMSTRONGS)
0025 TT=300.
0026 C INCIDENCE ANGLE (DEGREES)
0027 ALPHA=45.
0028 C FINAL ENERGY FOR ION (EV)
0029 EF=900.
0030 C FINAL ENERGY FOR EXCITED RECOIL
0031 EF2=10.0
0032 C CORRECTION TO STOPP. LINDHARD
0033 CK=1.36
0034 C MAX. NUMBER OF HISTORIES
0035 NH=500000
0036 C BINDING ENERGY
0037 BE=3.31
0038 C R-CRITICAL (TARGET-TARGET)(ARMSTRONGS)
0039 RTH2=0.538
0040 C CORE LIFETIME IN THE SOLID (*E-15 SEC)
0041 TAU=100.
0042 C CORE LIFETIME OUTSIDE THE SOLID (*E-15 SEC)
0043 TAU0=100.
0044 C RANDOM SEED
0045 IRI=9015
0046 C MEAN FREE PATH FOR AUGER ELECTRONS (ARMSTRONGS)
0047 ALAMBD=4.7
0048 C CONSTANT FOR DOPPLER SHIFTS (IN EV**1/2)
0049 DOPP=.071
0050 C CONSTANTS FOR RECOIL-SURFACE INTERACTION ([C]=EV, [S]=A)
0051 CI1=3.6
0052 SI1=0.85
0053 CI2=3.87
0054 SI2=0.52
0055 CM1=4.43
0056 SM1=0.63
0057 C CONSTANTS FOR LEVEL BROADENING
0058 BRO=0.4
0059 DELTA=1.
0060
0061 C INITIALIZE VECTOR FOR ELECTRON ENERGY DISTRIBUTIONS
0062 DO 6021 IEL=1,50
0063 6021 NEL(IEL)=0
0064 C INITIALIZE VECTOR FOR DISTANCE FROM THE SURFACE
0065 DO 3225 I=1,100
0066 3225 NSURD(I)=0
0067 C INITIALIZE MATRIX
0068 DO 59 J=2,10
0069 DO 59 I=2,20
0070 59 MEXPT(I,J)=0
0071 C LABELS FOR DEPTH INTERVALS & DOPPLER SHIFT
0072 DO 60 J=1,10
0073 60 MEXPT(1,J)=2*(J-2)
0074 DO 61 I=1,20
0075 61 MEXPT(I,1)=(I-10)*4-2
0076 C LOOK-UP VECTOR OF COSINE PHI
0077 DO 47 I=1,40
0078 47 VCOS(I)=COS(2.*PI*I/40)
0079 C INITIALIZE VECTOR FOR EXC. & DECAY POSITIONS
0080 DO 995 I=1,30
0081 995 NEX(I)=0

```

```

0082 995 NDECA(I)=0
0083 NDEC=0
0084 DATA IB, EB, IT, ET, IBSP, EBSP, IEBS, EXBSP/O, O., O, O., O, O., O, O. /
0085 CALFA=COS(ALPHA/57.295779)
0086 SALFA=SIN(ALPHA/57.295779)
0087 MU=M1/M2
0088 GAMMA=4*MU/(1.+MU)**2
0089 ARHO=RHO*0.6022/M2
0090 C FIRSOV SCREENING LENGTHS
0091 A=0.529*0.8853/(SQRT(Z1)+SQRT(Z2))**(2./3.)
0092 A2=0.529*0.8853/(2**(2./3.))*Z2**(1./3.)
0093 F=A*M2/(Z1*Z2**14.4*(M1+M2))
0094 F2=A2/(Z2**2*2B.B)
0095 C ENERGY IN REDUCED UNITS
0096 EPSO=E0*F
0097 C LINDHARD-SCHARFF STOPP. PARAMETERS
0098 KL2=1.212*Z2**(7./6.)/(2**1.5*SQRT(M2))
0099 KL=1/((Z1**(2./3.)+Z2**(2./3.))*1.5*SQRT(M1))
0100 K=KL*CK*1.212*Z2*Z1**(7./6.)
0101 LS=ARHO**(-1./3.)
0102 C 1/ASIG IS MEAN AREA OFFERED BY EACH TARGET ATOM
0103 ASIG=LS*ARHO
0104 KASIG=K*ASIG
0105 K2ASIG=KL2*ASIG
0106 C RMAX & RMAX2 ARE MAX. IMPACT PARAMETERS IN MODEL, IN UNITS OF A2 & A
0107 RU=SQRT(1/(PI*ASIG))
0108 RMAX=RU/A
0109 RMAX2=RU/A2
0110 C LOOK-UP VECTOR OF IMPACT PARAMETERS
0111 DO 41 I=1,100
0112 BV2(I)=RMAX2*SQRT(FLOAT(I)/100.)
0113 41 BV(I)=RMAX*SQRT(FLOAT(I)/100.)
0114 RTH2A=RTH2/A2
0115 C FINAL ENERGY FOR UNEXCITED RECOIL
0116 EF2N=EF*GAMMA
0117 C TAU IS CORE-HOLE LIFETIME IN E-15 SECONDS
0118 TAU=TAU*1.E-15
0119 TAUO=TAUO*1.E-15
0120 C CD IS DECAY CONSTANT IN THE SOLID (IN UNITS OF EV**1/2)
0121 CD=-LS*SQRT(M2)/TAU/1.4E14
0122 C AK1 IS DECAY CONSTANT OUTSIDE THE SOLID (EV**1/2)
0123 AK1=-SQRT(M2)/TAUO/1.4E14
0124
0125 C ION HISTORIES
0126
0127 DO 40 IH=1,NH
0128 E=E0
0129 X=0
0130 COSIN=CALFA
0131 SINE=SALFA
0132 1 R2=AN(IRI)
0133 EPS=E*F
0134 B=BV(INT(100.*R2)+1)
0135 C STRAIGHT-ON PATH IF B>15 SCREEN. LENGTHS
0136 IF(B.GT.15.)GOTO 2
0137 C ION-TARGET COLLISION
0138 BSG=B*B
0139 SQE=SQRT(EPS)
0140 C SUBROUTINE MAGIC
0141 R=B
0142 RR=3.333*ALOG(.35/(EPS*B))
0143 IF(RR.LT.B)GO TO 1001
0144 RR=3.333*ALOG(.35/(EPS*RR))
0145 IF(RR.LT.B)GOTO 1001
0146 R=RR
0147 1001 EX1=EXP(-.3*R)
0148 EX2=EX1*EX1*EX1*EX1
0149 EX3=EX2*EX2*EX2*EX2
0150 V=(.35*EX1+.55*EX2+.1*EX3)/R
0151 V1=-((V+.105*EX1+.66*EX2+.6*EX3)/R
0152 Q=(BSG/R+V*R/EPS-R)/(-BSG/(R*R)+(V+V1*R)/EPS-1.)
0153 R=R-Q
0154 IF(ABS(Q/R).GT.01)GOTO 1001
0155 ROC=-2.*(EPS-V)/V1
0156 AA=2.*EPS*(1.+(.6743/SQE))*B**((.009611+SQE)/(.005175+SQE))
0157 FF=(SQRT(AA*AA+1.))-AA*((6.31+EPS)/(10.+EPS))
0158 C=(B+(R-B)*AA*FF/(FF+1.))+ROC/(R+ROC)
0159 C2=C*C
0160 S2=1.-C2
0161 C END MAGIC
0162 C INDEX TO ACCOUNT EXCITATION

```

```

0163      IEX=0
0164      C      TRANSFERRED ENERGY
0165      DEN=E*GAMMA*G2
0166      C      NEW PROJECTILE ENERGY
0167      E=E-DEN-KASIG*SQRT(E)
0168      R3=РАН(1R1)
0169      CT=C2+C2-1.
0170      CT2=CT*CT
0171      IF(CT2.GT.1.) CT2=1.
0172      ST=SQRT(1.-CT2)
0173      CPS=V*СOS(INT(40.*R3)+1)
0174      C      ANGLE WITH RESPECT TO THE TARGET NORMAL
0175      TPSI=ST/(CT+MU)
0176      TPSIS=TPSI*TPSI
0177      COSIN=(COSIN/TPSI+SINE*CPS)*SQRT(TPSIS/(1.+TPSIS))
0178      COS2=COSIN*COSIN
0179      IF(COS2.GT.1.) COS2=1.
0180      SINE=SQRT(1.-COS2)
0181
0182      C      RECOILS
0183
0184      C      RECOIL ENERGY
0185      ER(1)=DEN-BE
0186      C      TEST IF UNEXCITED RECOIL MAY BECOME EXCITED IN A T-T COLL.
0187      IF(ER(1).LE.EF2N) GOTO 27
0188      TPS2=ST/(1.00001-CT)
0189      TPS2S=TPS2*TPS2
0190      COSI(1)=(COSIN/TPS2-SINE*CPS)*SQRT(TPS2S/(1.+TPS2S))
0191      I=1
0192      MEX(1)=0
0193      XR(1)=X
0194      C      NEW POSITION FOR THE RECOIL
0195      20      XR(I+1)=XR(I)+LS*COSI(I)
0196      C      TEST IF PRIMARY KNOCK ON IS DIRECTLY SPATTERED
0197      IF(XR(I+1).LT.0.) GO TO 21
0198      C      EREC=ER(I)-K2ASIG*SQRT(ER(I)) *NEGLECT ELEC. STOPP. IN T-T COLL
0199      EREC=ER(I)
0200      C      TEST IF ENERGY OF UNEXCITED RECOIL ENOUGH TO CAUSE EXCITATION
0201      IF((EREC.LT.EF2N).AND.(MEX(I).EQ.0)) GO TO 25
0202      C      ENERGY AND IMPACT PARAMETER
0203      EPS=F2*EREC
0204      R2=РАН(1R1)
0205      B=BV2(INT(100.*R2)+1)
0206      IEX=0
0207      C      TARGET-TARGET COLLISION
0208      BSG=B*B
0209      SGE=SQRT(EPS)
0210      C      SUBROUTINE MAGIC
0211      R=B
0212      RR=3.333*ALOG(.35/(EPS*B))
0213      IF(RR.LT.B) GO TO 2001
0214      RR=3.333*ALOG(.35/(EPS*RR))
0215      IF(RR.LT.B) GOTO 2001
0216      R=RR
0217      2001      EX1=EXP(-.3*RR)
0218      EX2=EX1*EX1*EX1*EX1
0219      EX3=EX2*EX2*EX2*EX2*EX2
0220      V=(.35*EX1+.55*EX2+.1*EX3)/R
0221      V1=(V+.105*EX1+.66*EX2+.6*EX3)/R
0222      Q=(BSG/R+V*R/EPS-R)/(-BSG/(R*R)+(V+V1*R)/EPS-1.)
0223      R=R-Q
0224      IF(ABS(Q/R).GT..01) GOTO 2001
0225      ROC=-2.*(EPS-V)/V1
0226      AA=2.*EPS*(1.+(.6743/SGE))*B**((.009611+SGE)/(1.005175+SGE))
0227      FF=(SQRT(AA*AA+1.)-AA)*((6.31+EPS)/(10.+EPS))
0228      C=(B+(R-B)*AA*FF/(FF+1.))+ROC/(R+ROC)
0229      C2=C*C
0230      S2=1.-C2
0231      C      END MAGIC
0232      C      TEST IF RECOIL BECAME EXCITED
0233      IF(R.LT.RFH2A) IEX=1
0234      C      EXCITATION POSITION
0235      IF(IEX.EQ.0) GOTO 996
0236      XRE=XR(I+1)
0237      IF(XRE.GT.30) XRE=30.
0238      DO 997 JE=1,30
0239      IF(JE.LT.XRE) GOTO 997
0240      NEX(JE)=NEX(JE)+1
0241      GOTO 996
0242      997      CONTINUE
0243      996      CT=C2+C2-1.

```

```

0244          CT2=CT*CT
0245          IF(CT2.GE.1.) CT2=1.
0246          ST=SQRT(1.-CT2)
0247          C    ANGLES OF OLD RECOIL, "PRIMARY" KNOCK-ON
0248          TPS2=ST/(1.00001+CT)
0249          TPS2S=TPS2*TPS2
0250          R3=RAN(IRI)
0251          CPH=VCOS(INT(40.*R3)+1)
0252          IF(COSI(I).GE.1.) COSI(I)=1.
0253          IF(COSI(I).LE.-1.) COSI(I)=-1.
0254          SINE2=SQRT(1.-COSI(I)*COSI(I))
0255          C    NEW DIRECTIONAL COSINE (PRIMARY KNOCK ON)
0256          COSI(I+1)=(COSI(I)/TPS2+SINE2*CPH)*SQRT(TPS2S/(1.+TPS2S))
0257          T=EREC*S2
0258          ER(I+1)=EREC-T
0259          ER(I)=T-BE
0260          IF((MEX(I)+IEX).EQ.0) GOTO 611
0261          VREC=SQRT(EREC)
0262          C    CALCULATE EXCIT./DECAY & IF EXCIT. GOES TO PRIMARY (IEXA=1)
0263          C    OR SECONDARY (IEXA=0) RECOIL ASSUMING EQUAL PROBABILITIES
0264          REX=RAN(IRI)
0265          IEXA=INT(.5+REX)
0266          C    DETERMINE DECAY PROBABILITY IF RECOIL WAS ALREADY EXCITED
0267          REX2=RAN(IRI)
0268          PROB=1.-EXP(CD/VREC)
0269          IF(MEX(I).EQ.0) PROB=0.
0270          IDEX=INT(PROB+REX2)
0271          IF(IDEX.EQ.0) GO TO 62
0272          C    DECAY POSITION
0273          XRD=XR(I+1)
0274          IF(XRD.GT.30.) XRD=30.
0275          DO 999 JD=1,30
0276          IF(JD.LT.XRD) GOTO 999
0277          NDECA(JD)=NDECA(JD)+1
0278          GOTO 99B
0279          999    CONTINUE
0280          C    MAY ELECTRON ESCAPE FROM THE TARGET WITHOUT ENERGY LOSS
0281          99B    RDEP=RAN(IRI)
0282          DEPRO=EXP(-XR(I+1)/ALAMBD)
0283          IDEP=INT(DEPRO+RDEP)
0284          IF(IDEP.EQ.1) NDEC=NDEC+1
0285          C    DECAY LISTED IN MATRIX MEXPT(DOPPLER SHIFT,DEPTH) IF X<=16
0286          IF(XR(I+1).GT.16.) GOTO 62
0287          II=INT(11.+VREC*COSI(I)/4.)
0288          IF(II.LT.2) II=2
0289          IF(II.GT.19) II=19
0290          JJ=INT(XR(I+1)/2.+3.)
0291          MEXPT(II,JJ)=MEXPT(II,JJ)+1
0292          C    DECAY BEFORE (IDEX=1) AND/OR BE EXCITED AFTER (IEX*IEXA=1) COLL
0293          62    MEX(I+1)=MEX(I)-IDEX+IEX*IEXA
0294          C    OR AFTER COLLIS. A NEW RECOIL MAY BE EXCITED (IEX=1, IEXA=0)
0295          MEX(I)=IEX*(1-IEXA)
0296          63    TPS2=ST/(1.00001-CT)
0297          TPS2S=TPS2*TPS2
0298          C    DIRECTIONAL COSINE OF NEW RECOIL
0299          COSI(I)=(COSI(I)/TPS2-SINE2*CPH)*SQRT(TPS2S/(1.+TPS2S))
0300          64    XR(I)=XR(I+1)
0301          I=I+1
0302          23    IF(ER(I).LE.0.) GO TO 25
0303          GO TO 20
0304          25    I=I-1
0305          IF(I.EQ.0) GO TO 27
0306          GO TO 23
0307          66    COSI(I+1)=COSI(I)
0308          ER(I+1)=EREC
0309          ER(I)=0.
0310          GOTO 64
0311          611   MEX(I+1)=0
0312          GO TO 63
0313          C
0314          C    SPUTTERED ATOMS
0315          C
0316          21    IBSP=IBSP+1
0317          EBSP=EBSP+ER(I)
0318          IF(MEX(I).EQ.0) GOTO 25
0319          C    IF SPUPT. ATOM IS EXCITED IT IS LISTED IN 2ND ROW OF MEXPT
0320          II=INT(SQRT(ER(I))*COSI(I)/4.+11.)
0321          IF(II.LT.2) II=2
0322          IF(II.GT.19) II=19
0323          MEXPT(II,2)=MEXPT(II,2)+I
0324          C    DETERMINE DOPPLER SHIFT

```

```

0325      EDOP=DOPP*ABS(SQRT(ER(I))*COSI(I))
0326      C      DETERMINE DECAY POSITION OUTSIDE THE SOLID (1-100 ARMSTRONGS)
0327      DO 3222 ISP=1, 100
0328      VERI=SQRT(ER(I))
0329      VER=ABS(VERI*COSI(I))
0330      APRO=1. -EXP(AK1/VER)
0331      R7=RAN(IRI)
0332      IDD=INT(APRO+R7)
0333      IF(IDD.EQ.0)GO TO 3222
0334      NSURD(ISP)=NSURD(ISP)+1
0335      GO TO 3223
0336      3222      CONTINUE
0337      NSURD(100)=NSURD(100)+1
0338      3223      AISP=ISP
0339      C      DETERMINE ENERGY SHIFT DUE TO RECOIL-SURFACE INTERACTION
0340      ESUP=0.
0341      C      IF DECAY OCURS WITHIN THE FIRST ARMSTR. THEN SKIP
0342      IF(ISP.LT.2)GOTO 3230
0343      ESUP=C11/(AISP-SI1)-CM1/((AISP-SM1)**3)+C12/((AISP-SI2)**3)
0344      C      TOTAL ENERGY SHIFT
0345      3230      EDS=EDOP+ESUP
0346      C      DETERMINE SURF. BROADENING (ONLY IF BROAD. PARAMETERS ARE KNOWN)
0347      EBRO=0
0348      BROAD=DELTA*EXP(-BRO*AISP)
0349      IF(BROAD.LT.0.2)GOTO 5381
0350      RBRO1=RAN(IRI)
0351      5380      RBRO=RAN(IRI)
0352      EBRO=DELTA*(2.*RBRO-1.)
0353      PBRO=BROAD*BROAD/(BROAD*BROAD+EBRO*EBRO)
0354      IDBRO=INT(PBRO+RBRO1)
0355      IF(IDBRO.EQ.0)GOTO 5380
0356      5381      ETOT=EDS+EBRO+1.
0357      IF(ETOT.LT.0.)ETOT=0.
0358      IF(ETOT.GT.5.)ETOT=5.
0359      C      ATOMIC LIKE PEAK (DOPPLER + RECOIL-SURF. INTERACTION)
0360      DO 4322 IDSU=1, 50
0361      AIDS=IDSU*0.1
0362      IF(AIDS.LT.ETOT)GO TO 4322
0363      NEL(IDSU)=NEL(IDSU)+1
0364      GO TO 4323
0365      4322      CONTINUE
0366      NEL(50)=NEL(50)+1
0367      C      NUMBER & ENERGY OF EXCITED ATOMS
0368      4323      IEBSP=IEBSP+1
0369      EXBSP=EXBSP+ER(I)
0370      GO TO 25
0371      27      X=X+LS*COSIN
0372      IF(X.LT.0) GO TO 8
0373      IF(X.GT.TT) GO TO 9
0374      29      IF(E.GT.EF) GO TO 1
0375      GO TO 10
0376      8      IB=IB+1
0377      EB=EB+E
0378      GO TO 10
0379      2      E=E-KASIG*SQRT(E)
0380      GO TO 27
0381      9      IT=IT+1
0382      ET=ET+E
0383      10      IF(IH.NE.(1000*INT(IH/1000))) GO TO 40
0384      OPEN(UNIT=4, FILE='D1. DAT', STATUS='OLD')
0385      E1=EB/(IB+.00001)
0386      E2=ET/(IT+.00001)
0387      E3=EBSP/(IBSP+.00001)
0388      E4=EXBSP/(IEBSP+.00001)
0389      DO 72 JJ=2, 10
0390      M20=0
0391      DO 71 II=2, 19
0392      M20=M20+MEXPT(II, JJ)
0393      72      MEXPT(20, JJ)=M20
0394      DO 73 II=2, 20
0395      M10=0
0396      DO 74 JJ=2, 9
0397      M10=M10+MEXPT(II, JJ)
0398      73      MEXPT(11, 10)=M10
0399      WRITE(4, 300) Z1, M1, Z2, M2, DELTA, TAUO, TAU
0400      300      FORMAT(6X 'Z1' 8X 'M1' 8X 'Z2' 8X 'M2' 8X 'DELTA' 4X 'TAUO' 5X 'TAU' /5F10. 2,
0401      2E10. 2, /)
0402      WRITE(4, 400) EO, EF2, EF, ALPHA, BE, RTH2, IH, IRI
0403      400      FORMAT(6X 'EO' 5X 'EF2' 6X 'EF' 3X 'ALPHA' 6X 'BE' 4X 'RTH2' 7X 'NH'
0404      1      6X 'SEED' /FB. 1, 4FB. 2, FB. 4, 2I12)
0405      WRITE(4, 450) ALAMBD, BRO, TT, RHO, CK, DOPP

```

```

0406 450 FORMAT(/, 4X'ALAMBD'7X'BRO'BX'TT'7X'RHO'BX'CK'6X'DOPP'/6F10. 2
0407 WRITE(4, 455)CI1, SI1, CI2, SI2, CM1, SM1
0408 455 FORMAT(/, 7X'CI1'7X'SI1'7X'CI2'7X'SI2'7X'CM1'7X'SM1'/6F10. 2)
0409 WRITE(4, 500)IB, E1, IT, E2, IBSP, E3, IEBS, E4
0410 500 FORMAT(/5X'BACKSCATTERED ATOMS='16, 5X'ENERGY='F8. 3, ' EV'/
0411 1 7X'TRANSMITTED ATOMS='16, 5X'ENERGY='F8. 3, ' EV'/
0412 2 9X'SPUTTERED ATOMS='16, 5X'ENERGY='F8. 3, ' EV'/
0413 3 1X'EXCITED SPUTTERED ATOMS='16, 5X'ENERGY='F8. 3, ' EV')
0414 WRITE(4, 701)
0415 701 FORMAT(/' DEPTH IN A - DOPPLER SHIFT=SQRT E(EV)*COS',/)
0416 WRITE(4, 700) MEXPT
0417 700 FORMAT(I3, 1915)
0418 WRITE(4, 3258)
0419 3258 FORMAT(/10X, 'DECAY DISTR. IN VACUUM (1-100 A, STEP=1A). ',/)
0420 WRITE(4, 8224)NSURD
0421 8224 FORMAT(20I4)
0422 WRITE(4, 8325)
0423 8325 FORMAT(/10X, 'N(E) Vs ELECT. ENERGY (-1 TO +4 EV, STEP=0.1EV)',/)
0424 WRITE(4, 8326)NEL
0425 8326 FORMAT(1X, 10I6)
0426 WRITE(4, 8330)NDEC
0427 8330 FORMAT(/, 1X, 'AUGER ELEC. FROM THE INSIDE N*EXP(-XR/LAMBDA)='1B,/)
0428 WRITE(4, 8331)
0429 8331 FORMAT(1X, 'DISTRIBUTION OF EXCITATION POS. (1-30 A, STEP=1A)',/)
0430 WRITE(4, 8333)NEX
0431 8333 FORMAT(10I6)
0432 WRITE(4, 8332)
0433 8332 FORMAT(/, 1X, 'DECAY DISTR. IN THE SOLID (1-30 A, STEP=1A)',/)
0434 WRITE(4, 8334)NDECA
0435 8334 FORMAT(10I6)
0436 CLOSE(UNIT=4)
0437 40 CONTINUE
0438 STOP
0439 END

```

ARRAYS

Address	Type	Name	Bytes	Dimensions
R-00000960	R*4	BV	400	(100)
R-00000AF0	R*4	BV2	400	(100)
R-00000000	R*4	COSI	800	(200)
R-00000640	R*4	ER	800	(200)
R-00000C80	I*4	MEX	800	(200)
R-00000FA0	I*4	MEXPT	800	(20, 10)
R-00001630	I*4	NDECA	120	(30)
R-000014F0	I*4	NEL	200	(50)
R-000015B8	I*4	NEX	120	(30)
R-00001360	I*4	NSURD	400	(100)
R-000012C0	R*4	VCOS	160	(40)
R-00000320	R*4	XR	800	(200)

VARIABLES

Address	Type	Name	Address	Type	Name	Address	Type	Name	Address	Type	Name	Address	Type	Name
2-00001780	R*4	A	2-00001784	R*4	A2	2-00001800	R*4	AA	2-00001800	R*4	AA	2-00001800	R*4	AA
2-000018AC	R*4	AISP	2-000017B0	R*4	AK1	2-00001718	R*4	ALAMB	2-000016F0	R*4	ALAMB	2-000016F0	R*4	ALAMB
2-000018A0	R*4	APRO	2-0000177C	R*4	ARHO	2-0000179A	R*4	ASIG	2-000017D0	R*4	ASIG	2-000017D0	R*4	ASIG
2-00001808	R*4	BE	2-00001738	R*4	BRD	2-000018BC	R*4	BRDAD	2-000017D4	R*4	BRDAD	2-000017D4	R*4	BRDAD
2-00001820	R*4	C	2-0000180C	R*4	C2	2-00001770	R*4	CALFA	2-000017AC	R*4	CALFA	2-000017AC	R*4	CALFA
2-00001838	R*4	C11	2-00001728	R*4	C12	2-000016FC	R*4	CK	2-00001730	R*4	CK	2-00001730	R*4	CK
2-00001820	R*4	CD52	2-000017C0	R*4	CQ5IN	2-00001650	R*4	CPH	2-0000162C	R*4	CPS	2-0000162C	R*4	CPS
2-00001860	R*4	DEPRD	2-00001824	R*4	CT2	2-0000173C	R*4	DELTA	2-00001618	R*4	CPN	2-00001618	R*4	CPN
2-000018DC	R*4	E1	2-0000171C	R*4	DOPP	2-00001788	R*4	E	2-00001618	R*4	CPN	2-00001618	R*4	CPN
2-00001754	R*4	EB	2-000018E0	R*4	E2	2-000018E4	R*4	E3	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000018B4	R*4	EDS	2-000018B8	R*4	EBRD	2-00001764	R*4	EBSP	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000017CC	R*4	EPS	2-000015F4	R*4	EF	2-00001658	R*4	EF2	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-0000175C	R*4	ET	2-00001790	R*4	EFSO	2-00001644	R*4	EREC	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000017EC	R*4	ET3	2-000018D0	R*4	ETOT	2-000017E4	R*4	EX1	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-00001804	R*4	FE	2-0000176C	R*4	EXBSP	2-00001788	R*4	F	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-00001760	R*4	FBSP	2-00001778	R*4	GAMMA	2-00001744	R*4	I	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-00001870	I*4	IDEX	2-000018CC	R*4	IDBRD	2-00001744	R*4	IDD	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-00001814	I*4	IRI	2-000018D4	R*4	IDSU	2-00001768	R*4	IH	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-00001714	I*4	IR1	2-00001864	R*4	ISPA	2-00001784	R*4	IT	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-00001878	I*4	JD	2-00001894	R*4	ISP	2-00001758	R*4	IJ	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000016DA	R*4	K2ASIG	2-0000184C	R*4	JE	2-000018BC	R*4	JJ	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000016C0	R*4	LO	2-000016D0	R*4	KASIG	2-000016C4	R*4	KL	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000016AC	R*4	M1	2-000016BC	R*4	LF	2-000016B8	R*4	LM	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000016AB	R*4	MU	2-000016F0	R*4	M10	2-000016B0	R*4	M2	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000016DB	R*4	PI	2-0000174C	R*4	NDEC	2-00001700	R*4	NH	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000017C8	R*4	R2	2-0000186C	R*4	PROB	2-000017F8	R*4	G	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000016C0	R*4	RHO	2-0000181C	R*4	R3	2-00001844	R*4	R7	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000016E4	R*4	RBR01	2-0000187C	R*4	RDEP	2-00001860	R*4	REX	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000017E0	R*4	RR	2-0000179C	R*4	RMAX	2-000017A0	R*4	REX2	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-00001710	R*4	S2	2-00001708	R*4	RTH2	2-000017A4	R*4	RTH2A	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-000017C4	R*4	SINE	2-00001774	R*4	SALFA	2-00001724	R*4	S11	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-00001828	R*4	ST	2-00001854	R*4	SINE2	2-00001734	R*4	SM1	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-0000183C	R*4	TPS2	2-00001858	R*4	T	2-0000170C	R*4	TAU	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-00001898	R*4	TT	2-00001840	R*4	V	2-000017F4	R*4	V1	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-00001878	R*4	VER1	2-000017F0	R*4	VREC	2-000017BC	R*4	X2	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO
2-00001848	R*4	XRE	2-0000185C	R*4	Z1	2-000016E0	R*4	Z2	2-000016E8	R*4	EO	2-000016E8	R*4	EO

Archivo de salida de datos
del programa ISET.

Z1	M1	Z2	M2	DELTA	TAUO	TAU	
18.00	40.00	13.00	27.00	1.00	0.10E-12	0.10E-12	
EO	EF2	EF	ALPHA	BE	RTH2	NH	SEED
4000.0	10.00	900.00	45.00	3.31	0.5380	160000	-442925349
ALAMBD	BRD	TT	RHD	CK	DOPP		
4.70	0.40	300.00	2.70	1.36	0.07		
CI1	SI1	CI2	SI2	CM1	SM1		
3.60	0.85	3.87	0.52	4.43	0.63		

BACKSCATTERED ATOMS= 970 ENERGY=1076.729 EV
 TRANSMITTED ATOMS= 0 ENERGY= 0.000 EV
 SPUTTERED ATOMS= 10360 ENERGY= 267.677 EV
 EXCITED SPUTTERED ATOMS= 2516 ENERGY= 385.089 EV

DEPTH IN A - DOPPLER SHIFT=SQRT E(EV)*COS

38	-34	-30	-26	-22	-18	-14	-10	-6	-2	2	6	10	14	18	22	26	30	34	38
0	0	9	56	129	304	511	558	523	426	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2516
2	0	0	1	6	13	34	50	92	242	63	1	0	0	0	0	0	0	1	502
4	0	0	0	4	22	31	58	90	318	139	25	5	7	3	3	3	0	2	707
6	0	0	0	5	19	34	54	102	340	203	36	17	9	10	3	3	0	4	838
8	0	0	1	8	13	33	62	114	404	276	54	29	17	16	10	4	4	4	1059
10	0	0	1	11	13	33	64	106	484	374	74	51	31	26	16	8	8	4	1327
12	0	0	1	11	13	38	72	115	514	358	94	69	39	38	18	18	8	8	1337
14	0	0	1	9	10	36	71	144	529	463	105	81	43	32	23	15	8	9	1580
16	0	9	61	165	407	770	989	1286	3257	1876	389	252	162	120	71	44	31	27	9916

DECAY DISTR. IN VACUUM (1-100 A, STEP=1A).

185	120	136	97	78	83	73	67	78	69	59	42	45	38	49	46	44	41	36	31
30	43	33	31	30	26	26	20	20	22	29	20	26	27	17	30	16	18	17	22
15	11	12	14	22	15	18	14	13	16	10	12	12	6	7	13	13	11	13	12
7	5	6	6	8	7	3	2	8	8	6	12	8	5	4	6	2	6	1	6
3	7	7	2	7	5	3	2	6	7	2	2	3	2	9	4	5	1	0	141

N(E) Vs ELECT. ENERGY (-1 TO +4 EV, STEP=0.1EV)

3	2	3	4	6	3	6	6	6	6	11
15	13	18	44	62	120	165	195	198	207	
208	175	189	134	133	88	82	64	68	42	
40	27	13	15	13	15	12	24	16	16	
8	4	8	6	3	5	1	9	1	10	

AUGER ELEC. FROM THE INSIDE N*EXP(-XR/LAMBDA)= 1917

DISTRIBUTION OF EXCITATION POS. (1-30 A, STEP=1A)

139	405	533	724	838	927	1108	1149	1205	1225
1288	1382	1416	1388	1435	1411	1425	1359	1367	1343
1364	1225	1231	1167	1157	1158	1148	1063	979	15327

DECAY DISTR. IN THE SOLID (1-30 A, STEP=1A)

228	274	305	402	413	425	506	553	641	686
690	697	757	823	851	858	892	890	920	940
948	942	1007	936	947	984	932	976	888	23969

AGRADECIMIENTOS

Agradezco al Dr. R.A. Baragiola y al Dr. V.H. Fonce por la guía y el apoyo brindados en este trabajo; al Dr. E.V. Alonso, Dr. G.E. Zampieri, Lic. M. Abate, Dr. M.M. Jakas, y al Lic. L. De Ferrariis por las útiles discusiones; a todos los miembros de la División Colisiones Atómicas del Centro Atómico Bariloche por los gratos momentos vividos en su compañía, y a la Comisión Nacional de Energía Atómica, a la Secretaría de Ciencia y Tecnología y al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, por el apoyo material otorgado.