



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE CIENCIAS

Emisión de Rayos X Inducida por Partículas (PDXI)
a Bajas Energías:
Empleo de la Variación de
la Sección Eficaz de Ionización.

TESIS
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)
PRESENTA

Javier Miranda Martín del Campo

MÉXICO

1968

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

20382



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE.

1. Introducción.....	1.0
2. Métodos para la Medición de Espesores.....	2.0
2.1. Métodos Mecánicos.....	2.1
2.2. Métodos Eléctricos y Magnéticos.....	2.2
2.3. Métodos Ópticos.....	2.10
2.4. Métodos por Radiación.....	2.18
2.5. Comparación de los Métodos.....	2.30
3. PIXE como Método para la Medición de Espesores.....	3.0
3.1. Fundamentos de la Técnica PIXE.....	3.1
3.2. Aplicación de PIXE a la Medición de Espesores.....	3.7
3.3. Evaluación de los Métodos.....	3.21
4. Sección Eficaz de Ionización.....	4.0
4.1. Introducción.....	4.2
4.2. La Aproximación de Onda Plana de Born (PWBA).....	4.5
4.3. La Aproximación Semiclásica (SCA).....	4.13
4.4. Limitaciones de la PWBA.....	4.17
4.5. Teoría ECPSSR.....	4.20
4.6. Aproximación de Encuentro Binario (BEA).....	4.28
5. La Sección Eficaz de Ionización en la Medición de Espesores.....	5.0
5.1. Validez de las Expresiones para el Cálculo de la Sección Eficaz de Ionización.....	5.1
5.2. El Poder de Frenamiento.....	5.11
5.3. Influencia de la Sección Eficaz de Ionización y el Poder de Frenamiento en la Medición de Espesores con PIXE.....	5.13
6. Uso de la Dependencia de la Sección Eficaz de Ionización con la Energía del proyectil.....	6.0
6.1. Propuesta de un Nuevo Método para Medir Espesores con PIXE.....	6.1
6.2. Desarrollo Experimental del Método.....	6.10
6.3. Confrontación del Nuevo Método con Otras Técnicas para Medición de Espesores.....	6.21
6.4. Discusión.....	6.25
6.5. Conclusiones.....	6.30
Apendices.....	A.0
Referencias.....	R.0

1 INTRODUCCION

En el mundo actual, la tecnología juega un papel fundamental. Desde las necesidades más elementales hasta los pasatiempos más complicados, se ven influenciados, en mayor o menor medida, por los desarrollos tecnológicos.

Una gran parte de estos avances técnicos ha sido posible sólo gracias a la aparición de nuevos materiales, y su presentación en muy diversas formas. Debido a su trascendencia dentro de la tecnología, es de especial interés el estudio de las propiedades de todos estos materiales.

Por esta razón, se ha desarrollado durante las últimas décadas una buena cantidad de métodos y técnicas que permiten caracterizar los materiales. Esta investigación incluye propiedades físicas de todo tipo: mecánicas, eléctricas, magnéticas, ópticas, etc.

La Emisión de Rayos X Inducida por Partícula Cargada (PIXE, por sus siglas en inglés), fue una de las técnicas que apareció con la finalidad de estudiar materiales, y más particularmente, su superficie. PIXE ha mostrado en los últimos veinte años un desarrollo espectacular. Sus aplicaciones se extienden a una gran variedad de campos, que incluyen, además del estudio de materiales, la arqueología, la medicina, y estudios sobre la calidad del aire.

La propiedad que tiene PIXE de ser multielemental (es decir, puede reconocer un gran número de elementos simultáneamente), lo ha hecho una magnífica opción para el estudio de aleaciones.

CAPÍTULO I

Dentro de la arqueología, PIXE se ha empleado de muchas maneras. Ha servido para estudiar cerámica, monedas y otros artefactos, tanto para conocer su composición, como para determinar su procedencia y fecha. Se han hecho, incluso, comparaciones entre restos momificados y tejidos humanos actuales. Igualmente, se han analizado libros antiguos.

En la medicina, sus aplicaciones son vastísimas. Se puede analizar todo tipo de tejidos -piel, mucosas, pelo, dientes, uñas- cosa que en determinadas ocasiones ha permitido diagnosticar enfermedades, entre ellas el cáncer. Una gran cantidad de trabajos se ha hecho sobre muestras sanguíneas. Los estudios no se limitan a tejidos humanos, puesto que también se han realizado en animales y vegetales.

Por medio de depósitos de aire en filtros (conocidos como aerosoles), es posible llevar al cabo análisis sobre los contaminantes ambientales. Estos se han efectuado en una diversidad de medios, como son ciudades, minas, zonas industriales, etc. Combinando estos estudios con los de tipo médico, se han observado los depósitos en el tracto respiratorio humano. Además, se han buscado residuos contaminantes en agua de ríos, lagos y mares.

Estos pocos ejemplos son una muestra palpable de la versatilidad que la técnica PIXE presenta, y que son una de las razones primordiales de la rápida expansión que ha sufrido.

CAPÍTULO I

2

Otra de las razones por las que PIXE se ha difundido es el tipo de instrumentación que requiere. La base del dispositivo experimental es un acelerador de iones, que permita obtener energías de estas que oscilan entre algunos cientos de keV y unos cuantos MeV. Como existe en el mundo una gran cantidad de aceleradores de estas energías, y puesto que la investigación en física nuclear en estos intervalos no es ya tan común, estos equipos se han dedicado a la búsqueda de aplicaciones, una de las cuales es PIXE.

Se ha encontrado, por otra parte, que las mejores resoluciones en PIXE se logran mediante el uso de protones con energías entre 1 y 2 MeV. La razón de esto radica en que la magnitud física de mayor importancia en esta técnica, que es la sección eficaz de ionización, presenta variaciones menos importantes en esta región de energías. A energías menores de 1 MeV, la sección eficaz de ionización decrece muy rápidamente con la energía del ion, cosa que en algunas situaciones complica el análisis.

En el Instituto de Física de la U.N.A.M. se cuenta, precisamente, con un acelerador de iones, del tipo Van de Graeff, que puede proporcionar diferencias de potencial entre 100 y 700 kilovolts. Estas energías de operación son justamente aquellas en las que la sección eficaz de ionización muestra una fuerte variación, que como ya se mencionó, dificulta ciertos tipos de estudios. Por tanto, es muy importante buscar aplicaciones de PIXE en este intervalo de energías.

Dentro de las investigaciones de PIXE a bajas energías, se ha presentado como un problema de interés la obtención de perfiles de profundidad, es decir, la distribución de los elementos en un material como función de la profundidad. Un caso especial de este problema general es la medición de espesores de películas delgadas. Una película delgada se puede describir como un material que presenta una de sus dimensiones mucho menor que las otras dos.

Las aplicaciones que las películas delgadas tienen en la tecnología son realmente muy numerosas e importantes. La descripción de su uso en áreas como la electrónica, la óptica y la química, solamente, serviría para llenar páginas enteras.

Entre las características más importantes de una película delgada se halla su espesor. Se ha encontrado que un gran número de fenómenos físicos que ocurren en ella dependen fuertemente del espesor. De aquí que sea indispensable la cuantificación de este.

A la fecha ha evolucionado grandemente un sinnúmero de métodos que permitan medir el espesor, entre los que se encuentran muchos que originalmente no se establecieron con ese fin.

Así pues, una forma de empleo de la técnica PIXE cuando ésta recurre a iones de bajas energías, sería la cuantificación del espesor de una película delgada. Debido a que PIXE podría hacer uso de muchos procedimientos para alcanzar este fin, se ve la necesidad de optimizarlos o de buscar alternativas.

Se establece, en consecuencia, como objetivo primordial de este trabajo la búsqueda de opciones nuevas dentro de la técnica PIXE, que hagan uso de la dependencia de la sección eficaz de ionización con la energía de incidencia del proyectil, así como la de discutir su validez y facilidad de uso.

Con base en esto, se organiza el trabajo de la siguiente forma:

Inicialmente se presentan los métodos más importantes que existen para la medición de espesores, dividiéndolos en categorías, de acuerdo al tipo de magnitudes físicas que utilicen para ello. Se hace un ligero énfasis en la Retrodispersión de Rutherford, por ser una técnica que tiene una instrumentación análoga a PIXE. Se incluye también una comparación entre los métodos.

A continuación, en el capítulo 3, se hace mención de los fundamentos de PIXE, y se hace una revisión de los procedimientos desarrollados a la fecha con esta técnica, para la obtención de perfiles de profundidad. En particular se trata sobre la medición de espesores de películas delgadas, efectuando también una crítica de cada uno de ellos.

El capítulo 4 consiste en la presentación de las teorías más importantes relativas al cálculo de la sección eficaz de ionización, que, como ya se dijo, es fundamental para la cuantificación con PIXE.

El siguiente capítulo compara las diversas teorías descritas en el capítulo 4, con resultados experimentales de la sección eficaz, con el fin de establecer su validez. Además, se hace ver cuál puede ser el efecto que las diferentes expresiones y teorías tienen en la medición de espesores.

Como último punto, se proponen alternativas a las modalidades que PIXE ya tiene para medir espesores, y se corrobora su validez desde el punto de vista experimental, comparando además con otras técnicas que están bien fundamentadas.

2

**METODOS PARA
LA MEDICION DE
ESPESORES**

La importancia que han cobrado las películas delgadas desde el punto de vista tecnológico y del estudio de propiedades básicas de la materia [1], hace indispensable su caracterización. Este análisis se efectúa dependiendo del rasgo que deseé conocerse, para lo cual se han desarrollado un gran número de técnicas [2].

Una de las propiedades esenciales de una película delgada es su espesor. Gran parte de las características de dicha película dependen directamente de él, y es por esta razón que la medición del espesor es fundamental.

Como consecuencia lógica, un sinnúmero de técnicas para la cuantificación del espesor ha aparecido. Cada método emplea una propiedad distinta de la película, aprovechando la dependencia de la correspondiente característica con el espesor. Así pues, una forma de clasificar los métodos estaría basada en el tipo de propiedad que emplea. Con esto en mente, se tendrían las siguientes categorías:

- 1.- Métodos Mecánicos;
- 2.- Métodos Eléctricos y Magnéticos;
- 3.- Métodos Ópticos;
- 4.- Métodos por Radiación.

A continuación se hará una explicación de los más importantes ejemplos dentro de estas clases.

2.1 METODOS MECANICOS.

Dentro de esta categoría se incluyen procedimientos que tienen su principio en características mecánicas de la película o del sustrato.

2.1.1 GEOMETRIA DE LA FUENTE DE EVAPORACION.

Aunque la determinación de la geometría de la fuente de evaporación no es propiamente un método para la medición del espesor, sí es útil para su estimación. Consiste en calcular la cantidad de material que se evapora y deposita para producir la o las películas [1]. Para realizar la estimación, se considera que la fuente evaporante es puntual (fig. 2.1).

CAPITULO 2

1

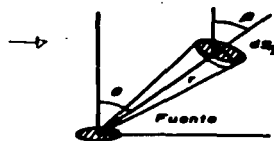


Fig. 2.1. Geometría para la estimación del espesor de una película en la evaporación.

entre θ y π , se obtiene:

$$m_2 = cm_1 4\pi. \quad (2.3)$$

y si $m_1 = m_2$, resulta $c = 1/4\pi$, y la ecuación (2.2) se vuelve

$$dm_2 = (m_1 \cos^2 \theta ds_2) / 4\pi r^2. \quad (2.4)$$

Si se supone que el espesor de la película es t , y su densidad es ρ , se tiene para el espesor:

$$t = m_1 \cos^2 \theta / (4\pi \rho r^2). \quad (2.5)$$

Esta ecuación permite calcular el espesor, sabiendo la masa que se ha evaporado. La aproximación hecha es, sin embargo, demasiado burda, y solo da información de órdenes de magnitud.

2.1.2. MICROBALANZA.

El método consiste en la medición directa de la masa que se deposita sobre un sustrato. Para ello, se emplea una microbalanza que posea las siguientes características:

- Buena sensibilidad ($\sim 10^{-8}$ g/cm²);
- Rigidez mecánica;
- Posibilidad de desgasificar a temperaturas altas;
- Amortiguamiento anarmónico.

CAPITULO 2

2

Sean m_1 la masa total evaporada, m_2 la masa recibida por una superficie ds_2 , la cual resulta ser igual a la cantidad de material que pasa por el ángulo sólido $d\Omega$. Entonces:

$$d\Omega = da_2 \cos \theta / r^2 \quad (2.1)$$

y por tanto

$$da_2 = cm_1 d\Omega = (cm_1 / r^2) \cos \theta ds_2. \quad (2.2)$$

Aquí, c es una constante que es posible determinar si se integra sobre toda la superficie receptora.

Si se piensa que dicha superficie es

una esfera centrada en la fuente, se tiene $\rho = R$ y $ds_2 = 2\pi R^2 \sin \theta d\theta$. Integrando la ec. (2.2), con θ variando

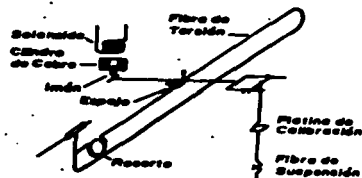


Fig. 2.2. Microbalanza para medición de espesores. Tomada de Meyer et al. (3). El dispositivo está construido de cuarzo, para facilitar su desgasificación.

Un ejemplo de microbalanza que cumple con estos requisitos es la construida por Mayer et al. (3), que se muestra en la fig. 2.2. El brazo de la balanza consiste en un alambre de cuarzo, con una placa en extremo, sobre la cual se evapora el material. El amortiguamiento de las vibraciones se efectúa por medio de un imán roscado en un cilindro de cobre, situado debajo de una bobina. El alambre de cuarzo se fija en un marco también de cuarzo, a través de un resorte. Con ayuda de un espejo se determina precisamente la posición del alambre. Al evaporar el material, se compensa la desviación del alambre con una corriente en la bobina.

Con el dispositivo arriba descrito, se obtienen medidas de hasta 10^{-9} g. Además, como está construido básicamente de cuarzo, puede calentarse sin dificultad hasta 500° C. lo cual lo hace ideal para trabajar en ultra-alto vacío.

Una vez obtenida la masa M , evaporada sobre un área S , se calcula el espesor t por medio de la relación

$$t = M/S\rho \quad (2.6)$$

donde ρ es la densidad del material. Esta puede tomarse como la densidad del material grueso, aunque en ciertos casos no es igual a la de la película (4). Sin embargo, en metales como aluminio, cobre, cromo, oro y plata, hay una coincidencia dentro del 5% (5, 6). De esta forma, con una masa de 10^{-9} g, en un Área de 1 cm^2 , para un elemento como la plata, el espesor calculado es de 10 \AA .

2.3. PERFILOMETRIA.

El método consiste solo en medir el movimiento mecánico de una punta al recorrer un escalón entre la película y el sustrato. La punta o suiza es normalmente de diamante y tiene por lo común un radio de 0.7 a $2 \mu\text{m}$, y una masa del orden de 0.1 g .

La suiza atraviesa el escalón película sustrato, y su movimiento vertical respecto a un plano de referencia se transforma en una señal eléctrica, que se amplifica y registra en un papel, obteniéndose una gráfica del perfil del escalón y de las irregularidades de la superficie.

Para obtener el escalón puede enmascararse una porción del sustrato sustrato durante la evaporación, o bien remover parte de la película con métodos químicos. El primer procedimiento requiere que la máscara esté en un contacto muy cercano con el sustrato, y que sea además muy delgada, para evitar sombras o acumulación de material. Puede entonces usarse una técnica que consiste en "pintar" el sustrato, y después retirar químicamente la capa de "pintura." El segundo método queda limitado a ciertos materiales de la película. La fig. 2.3 muestra una comparación de perfiles entre las dos técnicas de enmascaramiento.

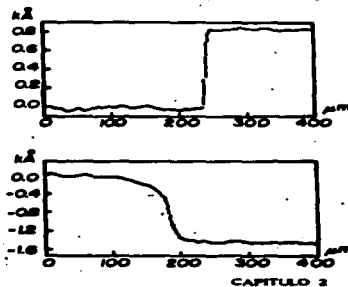


Fig. 2.3. Comparación de perfiles de secciones obtenidos con dos formas de enmascaramiento. Parte superior, escalón obtenido con técnica de pintura. Parte inferior, escalón obtenido con un vidrio. de la Ref. (7).

- Las principales limitaciones del método son:
- 1.- La punta puede penetrar y rayar películas suaves, lo cual destruirá la muestra o introducirá graves errores.
 - 2.- La rugosidad del sustrato puede producir ruido, el cual se traducirá en una fuerte incertidumbre sobre la posición del sustrato y de la película.
 - 3.- Sustratos ondulados hacen aparecer pendientes y curvaturas en ambos lados del escalón, como se ve en la fig. 2.4.
 - 4.- Se requiere un escalón entre la película y el sustrato.

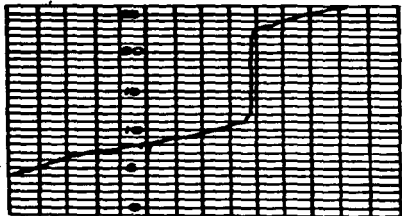


Fig. 2.4. Perfil de una película depositada sobre un sustrato ondulado. La amplificación es de 20 000 x. Ref. [7].

A pesar de las restricciones anteriores, se pueden tener resoluciones de hasta 5 Å en la medición del espesor, según los fabricantes de estos instrumentos [7], aunque en la práctica se tienen incertidumbres del orden de 40 Å [6].

2.14. CUARZO OSCILANTE.

Este método consiste en medir los cambios en la frecuencia de un cuarzo oscilante, debidos a la evaporación de una película sobre dicho cristal.

La frecuencia ν de las vibraciones del cristal de cuarzo depende de su espesor D en la forma:

$$\nu = K/D. \quad (2.7)$$

donde K es una constante que depende de la orientación del corte del cristal. Al variar el espesor del cuarzo en una cantidad ΔD , hay una variación en la frecuencia:

$$\frac{\Delta \nu}{\nu} = -\frac{\Delta D}{D}. \quad (2.8)$$

El espesor puede modificarse también por la presencia de una película de espesor t :

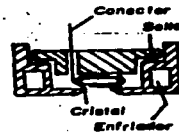
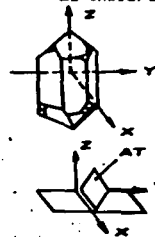
$$\Delta D = \rho_p t / \rho_c. \quad (2.9)$$

donde ρ_p y ρ_c son las densidades de la película y el cuarzo, respectivamente. Así pues, de las ecu. (2.8) y (2.9) se obtiene para la variación de la frecuencia debido a la película:

$$\Delta \nu = -\frac{\nu}{D} \frac{\rho_p}{\rho_c} t. \quad (2.10)$$

Dependiendo del material de la película, es posible medir espesores de hasta 1 nm [9, 10]. Debe observarse que para medir espesores pequeños se requieren frecuencias de oscilación grandes.

Es indispensable considerar otros factores que afectan el



corrimiento de la frecuencia, como es la temperatura del cristal. Este puede elevar su temperatura debido a la presencia de la fuente evaporadora, y también por la energía transferida por los átomos del material que se depositan en el cuarzo. Como es difícil estimar estos efectos, se busca que el cristal presente la menor dependencia de la frecuencia

Fig. 2.5. Corte AT de un cristal de cuarzo. y ejemplo de montaje. Se utiliza un plano del cuarzo. Ref. [11].

un cambio de 1 \AA , corresponde un cambio en masa de $4 \times 10^{-10} \text{ g/cm}^2$. A este corte se le llama Δf , y tiene una frecuencia de oscilación de 14 MHz. Además, se coloca el cristal en una montura con enfriamiento (fig. 2.5). Este tipo de dispositivo puede emplearse en ultra-alto vacío con gran facilidad. Debido a su amplia utilización en la medición de espesores durante la evaporación, a estos dispositivos se les llama *monitores de curso*.

2.15 ULTRASONIDO.

El ultrasonido como herramienta para la medición de espesores no se encuentra muy difundido en la actualidad. En general, los principios en los que se basa este método son simples [11,12].

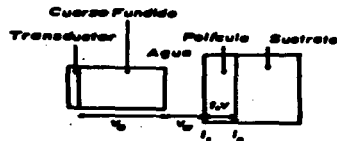


Fig. 2.6. Geometría para la medición de espesores con ultrasonido. Determinando las mediciones del espesor de una película con interferencia de las ondas ultrasónicas. Def. t espesor de la película. t₂ espesor del sustrato. I₁ interfaz agua-película. I₂ interfaz película-sustrato.

La determinación del espesor requiere de la solución de un sistema de ecuaciones basado en los coeficientes de reflexión y transmisión de la señal en todos los medios que intervienen en el dispositivo. Esto da como resultado para el espesor la ecuación:

$$t = \frac{v}{2\Delta f_m} = \frac{v}{2\Delta f_m} \quad (2.11)$$

donde t es el espesor, v la velocidad de fase de la señal en la película; Δf_m y Δf_n son las diferencias de frecuencias a las cuales ocurren resonancias y antirresonancias sucesivas, respectivamente.

La técnica de interferometría ultrasónica, sin embargo, no

permite la medición de espesores muy pequeños. Pues la máxima resolución que se ha alcanzado con ella es de $4.3 \mu\text{m}$, en cubiertas de pintura sobre acero [12], y empleando frecuencias entre 90 y 510 MHz.

2.2. METODOS ELECTRICOS Y MAGNETICOS.

Dentro de esta clase, aparecen técnicas que hacen uso de propiedades electro-magnéticas de la muestra, como son resistencia, capacitancia, inductancia, etc.

2.2.1 METODOS POR RESISTENCIA.

Una de las propiedades eléctricas de un material que depende del espesor en forma conocida es la resistencia. Sin embargo, debido a las pequeñas dimensiones de la película y por su gran rugosidad superficial, se requieren modelos teóricos más complicados para tener medidas confiables.

Hoffmann y Vancea [13], describen varios modelos que permiten medir espesores de películas de hasta 1.0 nm con una precisión del 1%, siempre y cuando la resistencia pueda cuantificarse con una incertidumbre menor al 0.1 %.

Para medir la resistencia, se necesitan contactos eléctricos entre los cuales se evapora la película. Con ellos, pueden utilizarse una variedad de circuitos, que permitan estabilidad en las mediciones. Un ejemplo es el puente de Wheatstone (fig. 2.7).

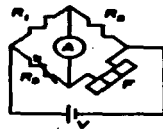


Fig. 2.7. Puente de Wheatstone para medir espesores. R₁, R₂, R₃, R₄ - Resistencias. P - Película. V - Voltaje.

La principal dificultad en este método es la irregularidad de las películas, pues la presencia de gases residuales adsorbidos modifica la resistividad en forma importante. Además, películas que no son uniformes tienen comportamientos distintos. Por otro lado, la temperatura de la muestra afecta la resistividad, y por ello se requiere también conocer esta influencia correctamente.

2.2.2. METODOS POR CAPACITANCIA.

La medición del espesor de una película por medio de la capacitancia de un sistema de conductores está limitada a materiales dieléctricos. Si este material se evapora en un capacitor como el de la fig. 2.8, habrá cambios en la capacitancia, dependiendo del espesor de la película.

Otra posibilidad está en evaporar otra película metálica sobre el dieléctrico, lo cual permite en ciertos casos cuantificar el espesor de una película de óxido formada en la superficie de un metal.

Las limitaciones de estas técnicas radican principalmente en el conocimiento de la constante dieléctrica de la película, la cual generalmente se toma como la del material grueso. Por supuesto, las irregularidades de la película dieléctrica también afectan la resolución.

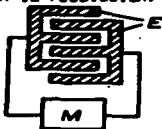


Fig. 2.8. Medición de espesores por medio de capacitancias. E - dieléctrico. M - puente para medir capacitancias.

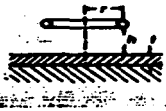


Fig. 2.9. Medición del espesor t de una película, por medio del cambio en el factor Q de una bobina de radio r , situada a una distancia h de la primera.

2.2.3. CORRIENTES INDUCIDAS.

El cambio en la frecuencia de resonancia y el factor Q de una bobina por la cual fluye una corriente alterna, y que está colocada en las proximidades de una película delgada, puede dar información acerca del espesor de esta última.

Una configuración para este método se encuentra en la fig. 2.9. En ella, una bobina circular de radio r , situada a una distancia h de la película de espesor t , lleva la corriente. La

cual induce a su vez corrientes dentro de la película. Estas corrientes hacen que algo de la energía se pierda.

En forma práctica, la medición se efectúa con la bobina como elemento de un circuito puente que está balanceado. Como resultado de la pérdida de energía por las corrientes inducidas, el equilibrio se rompe y aparece una corriente en la diagonal del puente, la cual se mide, para obtener el nuevo factor Q de la bobina. La relación con el espesor de la película se da a través de la ecuación [1]:

$$t = A(Q_0/Q_1 - 1). \quad (2.12)$$

Aquí, A es una constante, Q_0 y Q_1 son los factores Q de la bobina antes y después de romper el equilibrio del circuito, respectivamente.

Este método tiene la ventaja de no ser destructivo. Los espesores que pueden medirse, sin embargo, son demasiado grandes, pues oscilan entre 10 y 100 μm , con frecuencias en la corriente alterna del orden de 10 a 100 MHz.

2.3. METODOS OPTICOS.

Los métodos ópticos para medir el espesor de las películas delgadas se encuentran entre los que dan resultados más precisos. Los principios en los que se fundamentan son variados, e incluyen la reflexión, la transmisión, la interferometría y la polarización de los haces luminosos que se emplean en cada técnica. A continuación se describirán las más importantes.

2.3.1. MEDIDA POR TRANSMISION DE LUZ.

La técnica es muy simple: un haz luminoso de intensidad I_0 atraviesa la película, e incide sobre un detector (que puede ser una fotocelda). La intensidad del haz después que cruzó la película se reduce según la expresión:

$$I = I_0(1 - R)^2 e^{-\alpha t}, \quad (2.12)$$

donde t es el espesor de la película, α su coeficiente de absorción, y R la reflexión de la interfaz aire-película.

Con suficiente sensibilidad en el detector de luz, se pueden medir espesores de películas muy delgadas. Sin embargo, debe tenerse en cuenta que el comportamiento según la ec. (2.12) sólo es válido para ciertos materiales que forman películas microcristalinas continuas (como la aleación Ni-Fe). En otros elementos, como la plata, con espesores de hasta 30 nm, el decaimiento de la intensidad es lineal, y sólo después el comportamiento es exponencial.

2.3.2. MÉTODOS POR INTERFEROMETRÍA.

Estos métodos están fundamentados en la interacción de cierta cantidad de haces luminosos, los cuales se han originado por reflexiones sucesivas en un material altamente reflejante. Un esquema de este proceso se observa en la fig. 2.10. En ella, una onda plana incide sobre una película de espesor t a un ángulo α . En la interfaz, la onda se refleja parcialmente y se transmite parcialmente. En la interfaz inferior, la onda vuelve a reflejarse y transmitirse, y esto ocurre reiteradamente. La onda O_1R_1 reflejada primariamente, interfiere con las ondas O_2R_2 , O_3R_3 , etc.

Las características de la interferencia quedan determinadas por la diferencia de caminos ópticos de las diversas ondas. Haciendo referencia a la fig. 2.10, y suponiendo que alrededor de la película el índice de refracción es 1, se tiene para la diferencia de camino óptico entre los haces O_1R_1 y O_2R_2 :

$$\Delta l = \frac{2tn}{\cos \beta} - 2t \operatorname{sen} \alpha \operatorname{tg} \beta. \quad (2.13)$$

Fig. 2.10. Interferencia luminosa en una película delgada.

Aquí, n es el índice de refracción. Con la ley de Snell, resulta:

$$\Delta l = 2t (n^2 - \operatorname{sen}^2 \alpha)^{1/2}. \quad (2.14)$$

En materiales de alta reflectividad, la onda reflejada sufre un cambio de fase igual a π . Este cambio de fase se incorpora en

la ec. (2.14) restando a la diferencia de camino óptico la mitad de la longitud de onda λ_0 :

$$\Delta l_{ef} = \Delta l - \lambda_0/2 = 2t(n^2 - \operatorname{sen}^2 \alpha)^{1/2} - \lambda_0/2. \quad (2.15)$$

Para que se efectúe la interferencia constructiva, la diferencia de camino óptico debe ser un número entero de longitudes de onda:

$$\Delta l - \lambda_0/2 = k\lambda_0, \quad (2.16)$$

donde k es un entero. Así:

$$\Delta l = (2k + 1)\lambda_0/2. \quad (2.17)$$

Ocurre un mínimo para múltiplos semienteros de la longitud de onda

$$\Delta l - \lambda_0/2 = (2k - 1)\lambda_0/2, \quad (2.18)$$

o bien:

$$\Delta l = k\lambda_0. \quad (2.19)$$

Estas ecuaciones permiten la medición de espesores de películas por una gran variedad de métodos. Entre ellos se distinguen dos:

- (a) Franjas de igual orden cromático.
- (b) Franjas de igual anchura.

En seguida se discuten las propiedades de cada una.

(a) Franjas de Igual Orden Cromático.

Para efectuar la medición con este técnica, se emplea luz blanca. Las componentes de esta que se refuerzan son aquellas para las que el espesor de la película representa la cuarta parte de su longitud de onda, o múltiplos impares de esta cantidad ($3\lambda/4$, $5\lambda/4$, ...), mientras que la interferencia destructiva tiene lugar en múltiplos pares de $\lambda/4$. La película, entonces, refleja luz del color correspondiente a la superposición de las longitudes de onda que tienen interferencia constructiva.

Debido a que el color observado varía conforme cambia el espesor, es posible cuantificar este último, normalmente por métodos espectroscópicos (fig. 2.11). Si el máximo en intensidad de orden k ocurre en la longitud de onda λ_1 , y el de orden $(k+1)$ en la longitud λ_2 , para incidencia normal se tiene:

$$2nt = k\lambda_s = (k + 1)\lambda_s \quad (2.20)$$

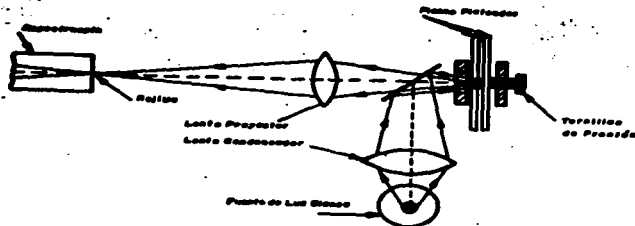


Fig. 2.11. Interferómetro para medir franjas de igual orden cromáticas. (de la ref. [14]).

o equivalentemente:

$$2nt = \frac{\lambda_s \lambda_p}{\lambda_s - \lambda_p} \quad (2.21)$$

Una forma práctica de efectuar las mediciones con esta técnica, consiste en tener un escalón, como en el caso del perfilómetro. Sin embargo, aquí la película se recubre con otra de un material de gran reflectividad. Así, la interferencia se lleva a cabo en la película superpuesta; pero, debido al escalón, aparece un corrimiento en las franjas de interferencia (fig. 2.12). La expresión para el espesor se modifica, entonces, a lo siguiente [14]:

$$t = \left[\frac{\lambda_p}{2} \right] \left[\frac{\Delta\lambda_s}{\lambda_s - \lambda_p} \right] \quad (2.22)$$

ecuación en la que $\Delta\lambda_s$ es el corrimiento en la franja correspondiente a la longitud de onda λ_s .

La máxima resolución que se obtiene con esta técnica es de 25 Å [14]. Por otro lado, es necesario que haya uniformidad en la

película, de lo cual se desprende que exista un límite inferior en el espesor que puede medirse. Por ejemplo, para plata, son del orden de 50 Å el límite máximo oscila alrededor de 2×10^6 Å.

Hay muchos factores que afectan la resolución del método, como son la reflectividad de la película, y consecuentemente su absorción; la dispersión angular del haz luminoso incidente; si el sustrato no es totalmente plano, las franjas pueden curvarse; el escalón debe ser lo suficientemente abrupto para mejorar la precisión del método; etc.

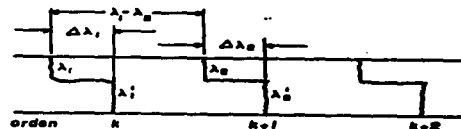


Fig. 2.12. Corrimiento en las franjas de igual orden cromáticas debido a la presencia de un escalón.

(b) Franjas de Igual Anchura.

El procedimiento para producir estas franjas es el que se describe a continuación:

- 1.- Se construye un escalón abrupto entre la superficie del sustrato y la de la película;
- 2.- Una película opaca, de baja absorción y alta reflectividad, que siga fielmente el perfil del escalón, se evapora sobre este;
- 3.- Por medio de una placa semipiloteada, formando un ángulo pequeño con la superficie de la película, se construye un interferómetro (fig. 2.13). La luz empleada debe ser monocromática.
- 4.- Usando el espaciamiento de las franjas, y su corrimiento por el escalón, puede calcularse el espesor, por medio de la ecuación

$$e = \frac{\Delta L}{L} \cdot \frac{\lambda}{2}$$

(2.23)

Aquí, ΔL es el corrimiento en las franjas L su separación, y λ es la longitud de onda de la luz incidente.

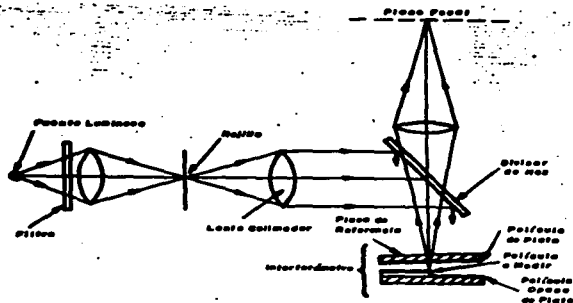


Fig. 2.18. Interferómetro para producir franjas de igual espesor. (De la ref. 1643).

Un instrumento típico para la medición de espesores por este método tiene la capacidad de cuantificar el grosor en un intervalo de 3 a 3×10^4 nm, con una resolución de 3 nm, usando luz de 10^4 Å, con una longitud de onda de 589 nm [7].

Las limitaciones que se explicaron en el método de franjas de igual orden cromático se aplican a esta técnica. Además, debe apuntarse que el espesor de la capa de aire entre ambas placas ha de ser pequeña, para que el área donde se origina la interferencia también lo sea.

Otras técnicas interferométricas, no tan comunes, también se

han desarrollado, y en ocasiones permiten medir espesores de hasta 1.5 nm, con una precisión de 20.5 nm [13].

2.33. ELIPSOMETRÍA.

Una de las técnicas más importantes para medir espesores es la elipsometría [15]. Esta puede definirse como la medición del estado de polarización de una onda electromagnética. Este estado de polarización se ve afectado cuando la radiación electromagnética incide sobre un material, ya sea que éste sea absorbente o no. En particular, una película delgada afectará la polarización dependiendo de su espesor y su índice de refracción, de tal forma que, midiendo las características de la luz utilizada, pueda cuantificarse dicho espesor.

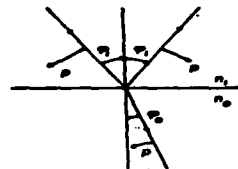


Fig. 2.16. Reflexión en una frontera plana. Las direcciones positivas de los vectores p se indican. Los vectores s son perpendiculares al plano del diagrama.

vector electrico (fig. 2.14):

$$r_{\parallel} = \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} \quad (2.24)$$

$$r_{\perp} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \quad (2.25)$$

A estas cantidades se les conoce como *coeficientes de Fresnel* para la reflexión, y representan el cociente de las amplitudes incidente y reflejada. A partir de aquí, se define la *Reflectancia* como la razón de flujos de energía incidente y reflejado, lo cual resulta ser igual a r^2 .

Estas definiciones pueden aplicarse a una película delgada, isotrópica y de lazos paralelos, de índice de refracción n_1 , y rodeada por dos medios de índices de refracción n_0 y n_2 . Si un haz luminoso incide sobre esta película, tal como lo muestra la fig. 2.15, la expresión para la reflectancia es:

$$R = \frac{r_0^2 + r_2^2 - 2r_0 r_2 \cos \delta}{1 + r_0^2 r_2^2 - 2r_0 r_2 \cos \delta} \quad (2.26)$$

donde r_0 y r_2 son los coeficientes de Fresnel en las interfaces n_0/n_1 y n_1/n_2 , respectivamente; $\delta = 2\pi n_1 d \cos \theta_1$ es el *espesor de fase* de la película; θ_1 es el número de onda de la luz incidente en el vacío.

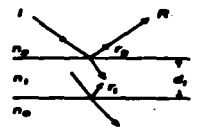


Fig. 2.15. Reflexión en una película.

Por otro lado, los parámetros que caracterizan el haz reflejado se pueden expresar convenientemente en términos de la razón del tamaño de los ejes de la elipse de polarización, y también del cambio de fase entre las componentes del vector eléctrico que son paralela y perpendicular al plano de incidencia. Así:

$$\frac{r_{\perp}}{r_{\parallel}} = \frac{|r_{\perp}| e^{i\phi_{\perp}}}{|r_{\parallel}| e^{i\phi_{\parallel}}} = e^{i\alpha} \tan \psi \quad (2.27)$$

Si la definición se emplea en el caso de la película delgada.

con las ecuaciones (2.24) - (2.26) se obtiene:

$$e^{i\alpha} \tan \psi = \frac{r_{\perp} + r_{\parallel} e^{-i\delta}}{1 + r_{\perp} r_{\parallel} e^{-i\delta}} = \frac{1 + r_{\perp} r_{\parallel} e^{-i\delta}}{r_{\perp} + r_{\parallel} e^{-i\delta}} \quad (2.28)$$

Estas ecuaciones permiten determinar el espesor de la película, realizando mediciones de α y ψ , y efectuando los cálculos necesarios, los cuales deben efectuarse con métodos numéricos, a causa de su complejidad. Sin embargo, la precisión del método es tal, que posibilita la medición de cambios en el espesor de las películas de hasta 0.07 Å, que es una fracción de monolapa (1). Es común en esta técnica la medición de espesores de películas del orden de 10 Å, y aun desde los inicios de su aplicación, se daban incertidumbres del orden de 0.3 Å (15).

2.4 METODOS POR RADIACION.

Las técnicas que caen dentro de este grupo pueden, en general, clasificarse de acuerdo al tipo de radiación en la cual están fundamentadas, aunque hay algunas que emplean más de una. Las principales clases son:

- 1.- Radiación Electromagnética (X ó γ);
- 2.- Electrónica;
- 3.- Iónica;
- 4.- Técnicas mixtas.

En seguida se describen los métodos más importantes dentro de cada categoría.

2.4.1. METODOS CON RADIACION ELECTROMAGNETICA.

Los métodos más ampliamente usados son los que tienen a los rayos X como radiación característica.

(a) Fluorescencia de Rayos X (XRF).

Cuando un material se irradia con rayos X de cierta energía, se puede tener una re-emisión de radiación X, característica del material blanco. La intensidad de esta radiación depende del material, y de la cantidad en que este se halle presente, debido a sus propiedades de emisión y absorción. Teniendo en cuenta este hecho, se pueden realizar mediciones de espesores de películas

delgadas, hasta de un cierto valor límite [17].



Fig. 2.16. Representación esquemática de un espectrógrafo de rayos X.

La instrumentación requerida para este método se encuentra esquematizada en la fig. 2.16. Los rayos X primarios pasan por un colimador, de manera que incide sobre la muestra con un ángulo θ_1 . La película emite su radiación característica, que es difractada por un cristal analizador, situado a un ángulo θ_2 con la superficie de la película. Los rayos X difractados se captan mediante un contador.

La intensidad de los rayos X medidos dependen del arreglo experimental particular. Sin embargo, puede relacionarse con la intensidad inicial, I_0 , mediante la expresión:

$$I_m = I_0 K_0 \rho t. \quad (2.28)$$

donde K_0 es un factor que incluye la eficiencia de la conversión de rayos X primarios a secundarios; ρ es la densidad de la película, y t su espesor. Midiendo esta intensidad, puede compararse entonces con la intensidad medida de una película de espesor conocido.

Una forma alternativa de aplicar este método consiste en considerar la intensidad producida por un blanco grueso, I_{∞} , del mismo material que la película, de forma tal que, para la intensidad de los rayos X de la película, se tendrá:

$$I_m = I_{\infty} (\mu_1 \sec \theta_1 + \mu_2 \sec \theta_2) \rho t. \quad (2.29)$$

donde μ_1 y μ_2 son los coeficientes de absorción de la radiación primaria y secundaria, respectivamente.

Entre las ventajas que esta técnica presenta, está la no destructividad del método, no se requiere preparación de la película, y puede haber medición directa del espesor, sin comparación con patrones de espesor conocido.

Los inconvenientes principales son el que normalmente se precisa de un patrón, el espesor obtenido es un promedio en cierta área, y se necesita conocer la composición química de la muestra.

La fuente excitadora de la radiación X secundaria puede ser, en vez de un tubo de rayos X, una fuente radiactiva, como ^{244}Pu , ^{244}Am , o ^{109}Cd , entre otros [17,18].

Con el método descrito pueden obtenerse, utilizando también técnicas de análisis especiales, medidas de espesores de hasta 5 Å, con errores experimentales de 20% [17].

(b) Reflexión de Rayos X.

Otra forma de medir el espesor de una película consiste en hacer incidir un haz de rayos X sobre la muestra, a un ángulo bastante grande con la normal, y medir los máximos en las interferencias producidas por la reflexión del haz en las dos superficies de la película (fig. 2.17).

El método consiste en observar los máximos de interferencia como función del ángulo de incidencia. Farratt [19], obtiene una expresión que relaciona el número de orden del máximo, con el ángulo de incidencia ϕ :

$$N = R + (2t/\lambda) (\phi_m^2 - \phi_c^2)^{1/2}. \quad (2.30)$$

donde N es el número de orden del máximo, R una constante de fase desconocida, t el espesor de la película, λ la longitud de onda incidente, ϕ_m la posición angular del máximo, y ϕ_c es el ángulo crítico.

Dado que N y R se desconocen inicialmente, se recorren todos los ángulos ϕ_m , y con ello todos los órdenes del máximo. Luego se

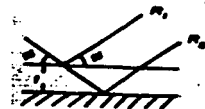


Fig. 2.17. Reflexión de Rayos X en una película.

construye una recta N vs. $(\theta_0^2 - \theta_0^2)^{1/2}$, y la pendiente de el espesor de la película. Sauro et al. [20] aplicaron este método en películas de cobre sobre vidrio, y reportaron medidas de espesores de hasta 240 Å como mínimas, con un error del 10%. Correcciones hechas a la ec. (2.30) reducen la incertidumbre hasta el 5%.

(c) Difracción de Rayos X.

La difracción de un haz de rayos X por un material policristalino se puede utilizar para la medición de espesores. Aunque el método no se encuentra muy difundido [21].

El método se basa en la ley de absorción de rayos X:

$$J = J_0 \exp(-\mu l). \quad (2.31)$$

donde J y J_0 son las intensidades de radiación incidente y atenuada, μ es el coeficiente de absorción de masa en el material, y l es la trayectoria total del haz en el absorbedor. Si esto se aplica a la intensidad difractada I_d^0 de una cierta línea, para un sustrato grueso policristalino, consistente en una fase J , cubierta con una película de espesor t , y diferente espesor, se puede escribir:

$$I_d^d = I_d^0 \exp(-2\mu t \sin^2 \theta). \quad (2.32)$$

ecuación en la cual I_d^0 es la intensidad difractada en el sustrato sin película (que puede medirse en el reverso de la muestra), y θ es el ángulo de Bragg. Resulta entonces para t :

$$t = - \frac{\sin^{-2} \theta}{2\mu} \ln \left(\frac{I_d^d}{I_d^0} \right). \quad (2.33)$$

Como es evidente, las condiciones para medir ambas intensidades deben ser idénticas. Las limitaciones principales del método estriban en que se obtiene un espesor de masa, y se requiere de un patrón para comparar.

2.4.2. MÉTODOS CON ELECTRONES.

Al igual que en el caso de radiación electromagnética, un alto número de técnicas para medición de espesores, fundamentadas en la incidencia de un haz de electrones, ha evolucionado ampliamente. A continuación se describen los más importantes.

(a) Transmisión de Electrones.

La determinación del espesor de una película puede efectuarse por medio de una microsonda electrónica, la cual se transmite a través de la película. Se puede hacer uso de la ecuación [22]:

$$I_{tr} = I_0 \exp(-\mu D), \quad (2.34)$$

donde I_{tr} es la intensidad del haz transmitido, I_0 la intensidad del haz incidente, μ es el coeficiente de absorción, y D el espesor de la película. El dispositivo experimental puede observarse en la fig. 2.16.

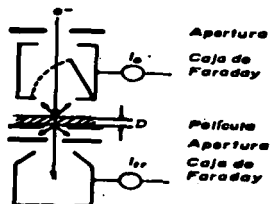


Fig. 2.16. Medición de espesores por transmisión de electrones.

La dificultad más importante en este caso es que, para películas cristalinas, la intensidad transmitida se ve fuertemente afectada por difracción de Bragg. El coeficiente de absorción μ para este tipo de muestras puede depender del ángulo de incidencia, y del tamaño de los cristales. Así, la ec. (2.34) sólo se puede aplicar en general a películas amorfas. Otro posible obstáculo sería la presencia de pequeños agujeros o figuras en la muestra, que enmascaran la información.

Una variante del método consiste en medir la energía crítica a la cual comienza a aparecer la transmisión.

Con este método, se han medido espesores de hasta 20 Å, con un error del 5% [23]. La resolución lateral también es excelente, y llega a ser del orden de 100 nm.

(b) Retrodispersión de Electrones.

El principio de este procedimiento se encuentra en la detección de los electrones de un haz que incide sobre la película, y que son retrodispersados por ésta.

Existen dos modalidades distintas. La primera utiliza fuentes

radiactivas, emisoras de partículas beta, mientras que la segunda tiene como fuente un cañón de electrones, como el de un microscopio electrónico. Debe señalarse que debido a la mejor regulación de las características del haz en la segunda forma, se pueden obtener con ella mejores resoluciones que con la primera. No obstante, por la mayor energía de las partículas emitidas por la fuente radiactiva, se pueden medir espesores mayores.

Los dispositivos experimentales para ambas variantes se aprecian en las figs. 2.19 y 2.20. De la fig. 2.19 se desprende que, a su vez, el primer tipo, con cañón de electrones, también se divide en dos clases, de acuerdo al medidor de la intensidad retrodispersada que se emplee.

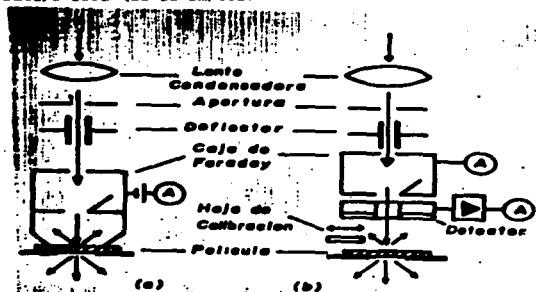


Fig. 2.19. Arreglo para medir retrodispersión de electrones en una película, usando cañón de electrones, y (a) una caja de Faraday, (b) detector semiconductor ómulo y caja de Faraday.

El método en sí consiste en medir el cociente entre las intensidades incidente y retrodispersada por la película, η_{r}/I_0 . Para el caso de películas autosostenidas, se tiene la siguiente expresión para el espesor:

$$t = \frac{\eta}{C_{exp}(E_0)N_a Z^2} \quad (2.35)$$

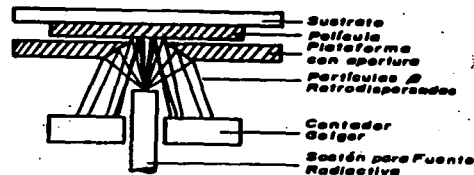


Fig. 2.20. Arreglo experimental para medir espesores de películas con retrodispersión de partículas beta.

donde C_{exp} es una constante de retrodispersión, que depende de la energía de incidencia de los electrones, N_a es la densidad atómica de la película, y Z es el número atómico de ésta. Análogamente, para películas sobre un sustrato, se tiene:

$$\eta_p(D) = \frac{\eta_{TOT}(D) - \eta_{su}}{1 - \eta_{su}/\eta_{is}} \quad (2.36)$$

en donde $\eta_{TOT}(D)$ es la razón de electrones retrodispersados por la muestra bajo estudio, η_{su} la razón para un sustrato limpio, η_{is} la razón para una película muy gruesa (mayor que el alcance de los electrones en el material), y $\eta_p(D)$ es la razón de retrodispersión de una película autosostenida con espesor igual al de la muestra. Con esta expresión, y la ec. (2.35), es posible calcular el espesor.

Los procedimientos arriba descritos eliminan la fuente de error que pueden representar perforaciones en la película, o la estructura cristalina de ésta. Con el uso de un cañón electrónico, pueden medirse espesores menores que 15 nm, aunque no se reportan incertidumbres [22]. Las mínimas incertidumbres medidas con fuente radiactiva son de ± 30 Å.

patrones o referencias para efectuar la medición del espesor. Así como el tener que conocer la composición química.

(c) Espectroscopia de Electrones Auger (AES).

La Espectroscopia de Electrones Auger representa en sí misma una técnica poderosísima para análisis de películas delgadas y superficies, y cuyo empleo se encuentra muy extendido actualmente [2.24].

Cuando un átomo se ioniza en una capa profunda, ya sea por un agente externo (incidencia de radiación, por ejemplo), o interno (decaimiento nuclear), queda en un estado excitado. Un electrón de una capa superior puede pasar a ocupar la vacancia, dejando un exceso de energía, del cual el átomo se deshace por la emisión de un fotón, o bien expulsando otro electrón de capas más externas. A este último electrón se le conoce como un electrón Auger. La energía con la cual emerge este electrón depende de las energías de los niveles atómicos involucrados en el proceso, y por tanto, del átomo de que se trate. De aquí que se pueda aplicar el fenómeno para analizar una superficie o película delgada. Lo más común es usar electrones como agente ionizante.

Existe un gran número de dispositivos experimentales para aplicar el proceso Auger como método de análisis. En la fig. 2.21 se puede apreciar un ejemplo. Las maneras en que es factible emplear la técnica para medir un espesor son también variadas.



Fig. 2.21. Ejemplo de dispositivo para Espectroscopia de electrones Auger. De la ref. [24].

La primera, y más simple, consiste en medir la cantidad de electrones Auger provenientes de la película, y compararla con la producida por un patrón de espesor conocido, utilizando algún medio para la producción de dichos electrones [24].

Un segundo método [25], está basado en el conocimiento de los caminos libres medios de los electrones Auger de energías altas

bajas de un elemento de la película. Las intensidades relativas de los picos de energías alta y baja, en el espectro obtenido, se comparan con las intensidades relativas del elemento puro.

Otra forma consiste en observar los picos de alta y baja energía del sustrato, y a partir del conocimiento de las profundidades de escape de ambos tipos de electrones, hallar una expresión para el espesor. Esta ecuación es [25]:

$$t = \left[\frac{m\lambda}{n - m} \right] K \ln \frac{P_{\text{a}}^{\text{t}}}{P_{\text{b}}^{\text{t}}} \quad (2.37)$$

ecuación en la que m (n) es la profundidad de escape de los electrones de alta (baja) energía. K es la razón de alturas pico a pico para $t = 0$, y P_{a}^{t} es la altura pico a pico de la curva $dNCE/dE$ (NCE es el número de electrones en el espectro como función de su energía), de los electrones de energía alta (baja).

La resolución de los dos últimos métodos es excelente, pues se han podido medir películas de $(2.0 \pm .05) \text{ \AA}$ [25], con buen acuerdo entre ambas técnicas.

El obstáculo sobresaliente con estos métodos es la necesidad de patrones para cuantificar el espesor, así como conocer la composición.

2.43. METODOS CON IONES.

En este caso se tiene como radiación primaria a un átomo con una carga neta distinta de cero, o bien simplemente un núcleo, como pueden ser los protones, deuterones, partículas alfa, etc.

(a) Espectroscopia de Masas de Iones Secundarios (SIMS).

Al igual que AES, la Espectroscopia de masas de Iones Secundarios (SIMS), es una herramienta poderosísima para el análisis de superficies y películas delgadas, en general [2.24].

A grandes rasgos, SIMS consiste en hacer incidir un haz de iones, generalmente de gases nobles (Ne, Ar), sobre una película, de forma tal que átomos de esta salen expulsados. A continuación,

los átomos secundarios son ionizados y analizados con un espectrómetro de masas. Un ejemplo esquemático de aparato experimental se observa en la fig. 2.22.

Una de las magnitudes fundamentales en SIMS es el rendimiento de erosión (sputtering yield), definido como el cociente:

$$Y_A = \frac{N_A}{N_i} \quad (2.38)$$

donde N_A es el número de átomos del elemento A expulsados, y N_i es el número de iones incidentes. Esta cantidad depende fuertemente de muchos factores (energía cinética de los iones primarios, de la masa de éstos, su configuración electrónica, ángulo de incidencia, masa de los átomos blanco, configuración electrónica de estos últimos, energía de ligadura a la superficie, estructura cristalina, rugosidad, temperatura, etc.).

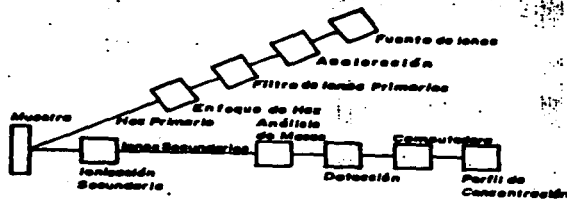


Fig. 2.22. Esquema de dispositivo experimental para realizar espectroscopía de masas de iones secundarios (SIMS).

Ahora bien, el número de iones captados en el detector del espectrómetro de masas es [2]:

$$N_A^L = N_i Y_A a^+ f c_A \quad (2.39)$$

expresión en la que a^+ es la probabilidad de ionización, f es la transmisión del instrumento (que puede medirse), y c_A es la concentración del elemento A en la película. Dando por conocida

concentración, es posible obtener una expresión para el espesor de la película.

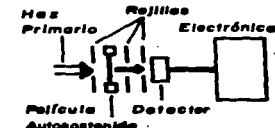
La problemática de esta técnica es amplia, dado el gran número de factores que influyen en ella [2]. Sin embargo, la más notable desventaja que presenta para medir el espesor de una película es el ser altamente destructiva.

Las mejores resoluciones que se alcanzan con este método están comprendidas entre 3 y 30 Å [2].

(b) Transmisión de Iones.

El método aquí descrito tiene el mismo principio que los ya explicados para electrones y radiación electromagnética, pero en este caso se utilizan iones, y existe una variación en cuanto a la magnitud medida.

Los iones que sirven como proyectil pueden provenir ya sea de un acelerador o bien de una fuente radiactiva. Un arreglo experimental se ejemplifica en la fig. 2.23. El detector, que normalmente es de estado sólido, servirá para medir la energía de las partículas que atraviesan la película. Esta energía final está dada por:



$$E_f = E_0 - \int_0^t S(E) dL \quad (2.40)$$

donde E es la energía de incidencia del ion, t es el espesor de la película, θ_i el ángulo de incidencia del haz, y $S(E) = dE/dx$ es el poder de frenamiento del material que compone la película, sobre el ion incidente. Si se conoce esta cantidad como función de la energía, la integral puede calcularse (numérica o analíticamente), y entonces conocer el espesor. Cuando la película es muy delgada, puede hacerse la aproximación:

$$E_f = E_0 - S(E_0)t/\cos\theta_i \quad (2.41)$$

lo cual da directamente el espesor:

$$t = \cos\theta (E_0 - E_f) / E_0 \quad (2.42)$$

La técnica tiene la limitación importante de requerir películas autoestenidas, lo cual pone una cota mínima al espesor que puede medirse. El espesor máximo queda determinado por el alcance de los iones en el material, el cual a su vez es función de la energía original.

Con el uso de fuentes radiactivas, es posible medir películas de un espesor de 4000 Å, con un error de 3%, con toda facilidad.

(c) Retrodispersión de Rutherford (RSD).

La *Retrodispersión de Rutherford*, o *Espectrometría de Retrodispersión*, es una de las técnicas de análisis más difundidas y con mayores ventajas [27].

Los principios del método son simples. Un haz de iones colimado y monoenergético incide sobre un blanco. En general, un cierto número de estos iones serán dispersados por los núcleos del blanco, en ángulos mayores de 90° con respecto a la dirección de incidencia. El número de iones retrodispersados en una cierta dirección, así como su energía, dan información del blanco.

El sistema experimental típico se encuentra en forma esquemática en la fig. 2.24, y su elemento fundamental es un acelerador de partículas, usualmente del tipo Van de Graaff, que permita alcanzar energías del orden de 1 MeV. Por otro lado, el tipo de detector empleado es de estado sólido (barrera superficial). Además, la cámara de dispersión se halla normalmente en vacío (del orden de 10⁻⁶ torr).

Las magnitudes fundamentales que intervienen en RSD son cuatro:

1.- El factor cinemático de dispersión, K , que es una medida de la energía cedida por el proyectil al blanco en la colisión. Es una función de las masas del proyectil y átomo blanco, así como del ángulo de dispersión. En el sistema de laboratorio, la expresión para K es:

$$K = \frac{E_f}{E_0} = \left\{ \frac{[1 - (M_1/M_2)\sin^2\theta]^{1/2} + (M_1/M_2)\cos\theta}{1 + (M_1/M_2)} \right\}^2 \quad (2.43)$$

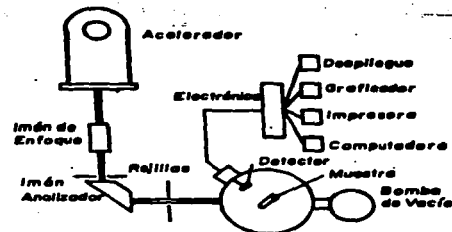


Fig. 2.24. Disposi-
tivo
experimental
para
Espectrometría
de
Retrodispersión
de Rutherford (RSD)

E_f es la energía final del proyectil, E_0 su energía de incidencia, M_1 y M_2 son las masas del proyectil y blanco, respectivamente, y θ es el ángulo al cual se dispersa la partícula incidente. Una característica de esta cantidad es que tiene un mínimo en 180°, independientemente del valor de M_1 y M_2 . Además, sólo depende del cociente M_1/M_2 .

El factor cinemático K es la base de la sensibilidad de RSD para detectar masas. Si se conocen las cantidades M_1 , E_0 y θ , y se mide la energía final E_f , se puede evaluar la masa del blanco M_2 , pues es la única incógnita en la ec. (2.43). Es preciso apuntar, también, que la energía perdida por el ion incidente en la colisión es mayor si las masas de los blancos son pequeñas.

2.- La *Sección Eficaz de Dispersión*, que marca la probabilidad de la cual el fenómeno de retrodispersión se lleva a efecto. Aparece, inicialmente, el concepto de *Sección Eficaz Diferencial*, $d\sigma/d\Omega$, definida como:

$$d\sigma/d\Omega = (1/Nt) [(dQ/d\Omega)/Q], \quad (2.44)$$

ecuación en la que N es la densidad atómica del blanco, t su espesor, Q el número total de partículas incidentes, y dQ es el número de partículas dispersadas en el ángulo sólido $d\Omega$. Para el caso de un proyectil con una energía E , y una interacción de tipo coulombiano con el núcleo del átomo blanco, resulta para la sección eficaz diferencial en el sistema de laboratorio:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \right]^2 \frac{1}{\sin^4 \theta} \frac{[1 - (M_1/M_2) \cos \theta]^2 + \cos^2 \theta}{[1 - (M_1/M_2) \cos \theta]^2 + \cos^2 \theta} \quad (2.45)$$

expresión debida a Rutherford (de ahí el nombre de la técnica de análisis). Los hechos importantes a observar en esta expresión son los siguientes:

- (i) $d\sigma/d\Omega$ es proporcional a Z_1^2 , lo cual implica que iones con mayor carga tienen una probabilidad mayor de ser dispersados, como ocurre con He , comparado con protones, para un blanco determinado.
- (ii) $d\sigma/d\Omega$ es proporcional a Z_2^2 . Los blancos de elementos pesados ofrecen una mayor sección eficaz para un proyectil dado. Esto hace que la sensibilidad sea mayor para estos elementos que para los ligeros.
- (iii) $d\sigma/d\Omega$ es inversamente proporcional al cuadrado de la energía del ion.
- (iv) $d\sigma/d\Omega$ aumenta rápidamente cuando θ es pequeño.

3.- La Pérdida de Energía, cantidad que ya se había definido previamente, y que otorga a RBS su percepción en profundidad. Además de la pérdida de energía o poder de frenamiento, se define la Sección Eficaz de Frenamiento, como:

$$s = \frac{1}{N} \frac{dE}{dX} \quad (2.46)$$

con N la densidad atómica del blanco. Esta es, en ocasiones, más práctica en su utilización, pues no depende de la cantidad de material presente.

4.- Las Fluctuaciones de Energía (Energy Straggling), que son de carácter estadístico, y que limitan la resolución de masa y de profundidad del método.

En general existen tres formas de aplicar RBS a la medición de espesores de películas delgadas. A continuación se describe

cada una de ellas.

1.- Anchura de Energía del Espectro.

Para entender este método, se hace referencia a la fig. 2.25(a). En ella, un haz de iones incide sobre una película, formando un ángulo θ_1 con la normal a ésta, y son dispersadas y detectadas a un ángulo θ_2 con la misma normal. La energía inicial es E_0 ; los iones que son retrodispersados en la superficie son detectados con una energía KE_0 , mientras que aquellos que rebotan en la última capa de la película emergen de ella con una energía E_1 , que depende del espesor t .

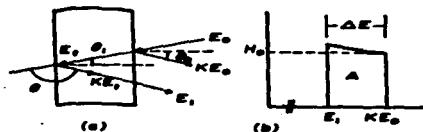


Fig. 2.25. (a) Retrodispersión de iones. (b) Espectro de energía resultante del proceso de retrodispersión en una película; y (c) la señal de retrodispersión resultante.

La película producirá un espectro como el de la fig. 2.25(b), el cual presenta un ancho en energía dado por:

$$\Delta E = KE_0 - E_1 \quad (2.47)$$

Por otro lado, en primera aproximación, la energía E_1 se puede calcular con:

$$E_1 = KE - \frac{t}{\cos \theta_2} \left. \frac{dE}{dX} \right|_{\text{salida}} \quad (2.48)$$

donde, a su vez, E está expresada por:

$$E = E_0 - \frac{t}{\cos \theta_1} \left. \frac{dE}{dX} \right|_{\text{entrada}} \quad (2.49)$$

de lo cual se desprende:

$$KE_0 - E_1 = \left[\frac{t}{\cos \theta_1} \left. \frac{dE}{dX} \right|_{\text{entrada}} + \frac{1}{\cos \theta_2} \left. \frac{dE}{dX} \right|_{\text{salida}} \right] t \quad (2.50)$$

o de otra forma:

$$\Delta E = [F] N t \quad (2.51)$$

en que el factor de sección eficaz de frenamiento se define como:

$$\langle \bar{E} \rangle = \frac{1}{\cos \theta_0} \epsilon_{Entrada} + \frac{1}{\cos \theta_0} \epsilon_{Salida} \quad (2.52)$$

Así pues, midiendo el ancho del espectro, y evaluando el factor de sección eficaz de frenamiento con la ayuda de tablas o expresiones analíticas, se puede calcular el espesor de la película, con la ec. (2.51).

2.- Número total de cuentas en el espectro.

Si se suman todas las alturas de cada canal en el espectro de la película, se puede obtener una relación entre este número total de cuentas y el espesor.

Si la película se subdivide en intervalos de espesor t_i , el número de iones detectados que fueron retrodispersados por la i -ésima capa de la película es:

$$H_i = \sigma(E_i) \Omega N t_i / \cos \theta_0 \quad (2.53)$$

en donde $\sigma(E_i)$ es la sección eficaz de retrodispersión a la energía E_i , Ω el ángulo sólido subtendido por el detector, N el número total de iones incidentes. Sumando sobre todos los intervalos se obtiene:

$$A = \sum H_i = \sum \sigma(E_i) \Omega N t_i / \cos \theta_0 \quad (2.54)$$

Al tomar el límite en que $t_i \rightarrow 0$, resulta:

$$A = (\Omega N / \cos \theta_0) \int_0^A \sigma(E) dx \quad (2.55)$$

La integral puede evaluarse con diversos métodos o aproximaciones. La más simple es la llamada aproximación superficial, que considera la energía del ion dentro de la película como constante, e igual a la energía de incidencia. De esta manera, se tiene para el espesor de la película:

$$Nt = (A_0 / \sigma(E_0) \Omega) \cos \theta_0 \quad (2.57)$$

donde se ha puesto el subíndice 0 a A para identificar la aproximación superficial. Se pueden efectuar mejores aproximaciones para la medición de t [27].

3.- Corrimiento en la energía máxima detectada.

Cuando se tiene una película sobre un sustrato, la energía de los iones retrodispersados por la superficie del sustrato tendrá

una energía menor a la que tendría si no existiera la película, es decir, si se tuviera una superficie limpia. Evidentemente, este corrimiento en la energía depende del espesor de la película.

Es fácil demostrar que el corrimiento, definido por:

$$\Delta E_0^P = K_0 E_0 - E_{0A}^P \quad (2.57)$$

se puede calcular mediante la ecuación:

$$\Delta E_0^P = K_0 (N_0 t_0 / \cos \theta_0) \epsilon_{Entrada}^P + (N_0 t_0 / \cos \theta_0) \epsilon_{Salida}^P \quad (2.58)$$

donde K_0 es el factor cinemático del sustrato, y los índices P y S se refieren a la película y el sustrato, respectivamente. La ec. (2.58) se puede reducir a la forma:

$$\Delta E_0^P = \langle \bar{E} \rangle_0^P N_0 t_0 \quad (2.59)$$

en analogía con la ec. (2.51).

Estas tres variantes de RBS para la medición de espesores tienen importantes limitaciones. La más importante de ellas, en el caso de las dos primeras modalidades, es que sólo pueden medirse películas de elementos pesados sobre sustratos ligeros, pues en el caso opuesto (ligero sobre pesado), el espectro de la película se superpone al espectro del sustrato, impidiendo una correcta evaluación [27]. Por otro lado, aunque el corrimiento en la energía se puede aplicar a estos casos, la resolución de los sistemas de detección oscurece los resultados, cosa que resulta a bajas energías del proyectil. Sin embargo, en condiciones óptimas, pueden medirse películas de hasta $10 \pm .2 \text{ \AA}$ [27].

Una de las mayores ventajas de esta técnica es no ser destructiva, a diferencia de SIMS.

2.4.4. TÉCNICAS MIXTAS.

Dentro de esta subdivisión se puede enmarcar a técnicas que involucren dos o más tipos de radiación para cuantificar el espesor de la película.

(a) Erosión Iónica (Sputtering).

Esta técnica tiene como principio el mismo que SIMS, es decir, la expulsión de átomos o moléculas de la superficie de la muestra por un haz de iones que incide sobre ella. La diferencia

con SIMS radica en el hecho de que no son los iones expulsados los que se analizan, sino la región de la muestra en la cual ha ocurrido la erosión, por medio de técnicas de análisis de superficies, siendo AES el caso más usual [2].

El gran número de factores que intervienen en la erosión iónica ya se mencionaron en el §2.4.3.a. La información se obtiene de la intensidad $I(t)$ de la señal del método de análisis como función del tiempo de erosión, t . Para transformar esta intensidad en un perfil de concentración $c(x)$, es preciso a su vez conocer x como función del tiempo. La razón de erosión se puede escribir como

$$\frac{dx}{dt} = \frac{R_0}{\rho_0 N_A e} T_j \quad (2.60)$$

donde R_0 es la masa atómica promedio del blanco, ρ_0 su densidad, N_A el número de Avogadro, e la carga del electrón, T_j la razón de erosión, y j la densidad de corriente iónica incidente. El espesor de la película se mide con la integración de la ec. (2.60).

De nuevo, debido a la influencia de un número tan grande de propiedades del proyectil y el blanco sobre el método, se tienen importantes limitaciones en él. El problema más importante es el de ser una técnica altamente destructiva. Sin embargo, los espesores mínimos que se llegan a medir son del orden de las decenas de Angstroms [2].

(b) Análisis con Reacciones Nucleares (NRA).

Esta técnica se emplea con éxito para la medición de espesores y el perfil de concentraciones, en general. Se utiliza normalmente a energías de proyectiles más bien bajas (cientos de keV), y para estudiar elementos ligeros. La ventaja del método es que se obtienen productos emitidos con energías grandes comparadas con las de incidencia, lo cual evita en gran medida ruidos e interferencias.

Existen dos variantes de la técnica, en la primera se analiza la energía del producto, lo cual tiene sentido cuando la sección eficaz para que ocurra el fenómeno es una función suave de la energía. Para la segunda, se requiere que en la curva sección

eficaz contra energía haya resonancias. En este caso, se mide la intensidad de la señal secundaria.

Un ejemplo de la aplicación de la primera forma aparece en la producción de partículas alfa o protones por un elemento de la película. La energía detectada de estos productos dependerá de la profundidad a la cual fueron originados, y mediante una expresión como la ec. (2.40), puede calcularse el espesor de la película.

La segunda opción también es simple en su aplicación, pues como se requiere una energía determinada para la ocurrencia de la reacción, esta se realizará solo a una cierta profundidad z , la cual depende de la energía de incidencia del proyectil, y el poder de frenamiento en el material. La variación de la energía de incidencia da entonces una capacidad para medir la cantidad de material como función de la profundidad. Entonces, si se obtiene la energía a la cual deja de aparecer la señal de la película, o aquella en la que comienza a aparecer la del sustrato, se puede calcular el espesor.

Las desventajas del método radican en que solo ciertas combinaciones proyectil-blanco proporcionan información, y además se requieren determinadas energías, a pesar de que la técnica no es muy destructiva. Por otra parte, las mejores resoluciones que se alcanzan oscilan alrededor de 30 Å.

2.5 COMPARACION DE LOS METODOS.

De todo lo anteriormente dicho, se concluye que no existe una técnica perfecta para la medición de espesores. Es por ello que se sugiere la disponibilidad de un cierto número de métodos, de tal forma que se puedan complementar unos con otros.

Por otra parte, tampoco puede decirse que un método sea mejor que otro, debido a que las carencias que generalmente presenta alguno, son cubiertas por uno alternativo. El uso de una técnica debe estar determinado por las necesidades particulares.

Se puede afirmar, además, que el método ideal para la

medición de espesores de películas delgadas debería presentar las siguientes características, tomadas sólo a título de ejemplo:

- Aplicable a todo tipo de material;
- Medir películas autosostenidas y depositadas en sustratos;
- Medir hasta una monocapa con incertidumbres menores al 1%;
- No ser destructivos;
- No requerir patrones;
- No necesitar complicados procedimientos de análisis;
- Tener influencia de un mínimo de factores;
- Utilizar una sola medición de la magnitud empleada;
- Ser barato.

Como puede verse en la tabla 1, en la página siguiente, ninguna de las técnicas descritas cumple con todos los requisitos citados previamente. La tabla 1 presente una comparación, entre ellas.

Tabla 1. Comparación Entre Métodos de Medición de Espesores.

Método	Material	Espesor		Comentarios o Requerimientos
		Mínimo	Destructivo	
Microbalanza	Todos	~ 10 Å	No	Conocer densidad
Feriloestría	Todos	40 Å	Foco	Escala
Cuarzo	Todos	10 Å	No	Conocer densidad
Ultrasonido	Todos	4 µm	No	Foco difundido
Resistencia	Todos	10 Å	No	Afecta Irregularidad
Capacitancia	Dielectrico	N.R. §	No	Constante Dielectrica
Corrientes Inducidas	Conductor	10 µm	No	Foco difundido
Transmisión de Luz	Todos	< 30 nm	No	Película y sustrato Translucidos
Interferencia luminosa	Dielectrico	30 Å	Si	Escala, película superpuesta
Elipsometría	Dielectrico	~ 1 Å	No	Película translucida
XRF	2 / 12	5 Å	No	Patrón
Reflexión R-X	Todos	240 Å	No	Foco difundido
Difracción Rayos X	Todos	N.R. §	No	Densidad, Patrón, Policristalina
Transmisión de Electrones	Todos	20 Å	No	Autosostenida, morfía, composición.
Retrodisp. de Electrones	Todos	< 150 Å	No	Patrón, composición
AES	Todos	2 Å	No	Patrón, composición
SIMS	Todos	~ 10 Å	Si	Influyen muchos factores
Transmisión de Iones	Todos	~ 10 ⁸ Å	No	Autosostenida, composición
RBS	Todos	10 Å	No	Elemento pesado sobre ligero, composición
Erosión Iónica	Todos	~ 10 Å	Si	Influyen muchos factores, técnica auxiliar
NRFA	Ligeros	~ 30 Å	No	Isótopos y energías determinados.

§ No se reportan espesores medidos.

3

**PIXE COMO
METODO PARA
LA MEDICION DE
ESPESORES**

La Emisión de Rayos X Inducidos por Partícula Cargada (PIXE), es una técnica de análisis que en las dos últimas décadas ha presentado un desarrollo notable, debido a su gran aplicabilidad en una amplia variedad de campos [2B.29].

El principio de PIXE consiste en la ionización de capas profundas de un átomo blanco por un proyectil (un ion), y la subsiguiente excitación del blanco por medio de la emisión de un fotón de rayos X.

PIXE puede aplicarse al análisis de superficies en general, y en particular, a la medición de espesores de películas delgadas. Esto último se halla fuertemente ligado a la obtención de los perfiles de concentración en profundidades de una muestra. Por ello, la mayor parte de los métodos que son útiles para calcular un perfil de concentración será aplicable a la medición de espesores, aunque lo inverso no ocurre normalmente.

En el presente capítulo se hará una descripción de los diversos métodos que se han desarrollado para adquirir información sobre perfiles de concentración y medición de espesores por medio de PIXE, haciendo primero una breve síntesis de sus fundamentos.

3.1. FUNDAMENTOS DE LA TÉCNICA PIXE.

PIXE consiste, como se dijo antes, en hacer incidir un haz de partículas pesadas cargadas (protones, partículas α o iones más pesados), sobre un blanco, y detectar los rayos X producidos en los átomos de este último, para así obtener información sobre el material [2B-32].

El proceso físico básico se encuentra esquematizado en la fig. 3.1. El proyectil transfiere energía a un electrón de capas profundas del átomo blanco, de manera que lo expulsa, dejando al átomo en un estado excitado. La vacancia producida se llena entonces por otro electrón de capas más altas, y la energía excedente se deja escapar en dos formas posibles: la expulsión de un tercer electrón (un electrón Auger), o bien por la emisión de

un fotón. Las energías involucradas en cada uno de estos procesos es característica del elemento de que se trata.

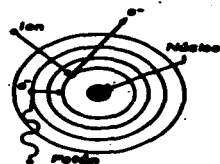


Fig. 3.1. Representación del proceso físico de emisión de rayos X inducida por partícula cargada.

La instrumentación usual para la aplicación de PIXE se representa en la fig. 3.2. El haz de iones proviene generalmente de un acelerador electrostático (tipo Van de Graaff). Este haz incide sobre la muestra después de haber sido colimado. A continuación, los rayos X producidos son captados mediante un detector, que normalmente es del tipo Silicio-Litio, o Si(Li), es decir, de estado sólido. El detector se encuentra separado del blanco por una hoja de algún material, para frenar iones retrodispersados. Las señales originadas en el detector son amplificadas y procesadas mediante un analizador multicanal. Después, el espectro resultante puede estudiarse con ayuda de una computadora.

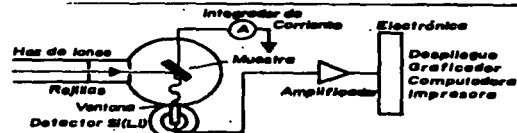


Fig. 3.2. Esquema del arreglo experimental para PIXE.

Debido a la existencia de niveles de energía discretos en un átomo, el electrón expelido en el proceso descrito antes, puede corresponder a diferentes capas, al igual que el electrón que ocupa la vacancia. Esto da origen a grupos de líneas de rayos X bien determinadas, y que tienen una denominación acorde a la capa de la cual fue removido el electrón original. Así, una línea que fue causada por una vacancia en la capa K del átomo (número cuántico principal $n = 1$), se llamará una línea K ; una línea debida a una vacancia en la capa L será una línea L, etc.

Ahora bien, el electrón que llena la vacancia puede provenir de un gran número de subcapas, limitado solamente por las reglas de selección en transiciones atómicas. Este hecho hace que aparezca una cierta cantidad de líneas K, de líneas L, etc., que sepan también ser identificadas. La distinción se hace en virtud de la intensidad relativa que case una de estas líneas tiene dentro de su grupo. De esta manera, la línea K más intensa será la línea K_{α} y la siguiente es la K_{β} . Cada una de estas líneas puede, a su vez, estar compuesta por cierto número de transiciones, que se reconocen por un subíndice (i, j, ...), existiendo así las líneas $K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$, $L_{\beta 1}$, $L_{\beta 2}$, ... La fig. 3.3 describe las líneas más importantes para el análisis con PIXE, señalando la transición atómica a la cual corresponden.

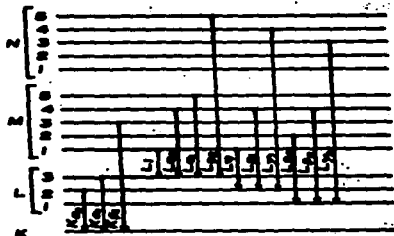


Fig. 3.3. Niveles de energía atómicos, y transiciones atómicas que dan origen a rayos X. La nomenclatura se señala en la figura

La cantidad de fotones de una línea en particular, registrados por el detector, depende de la cantidad de átomos del elemento que se hallen en la muestra, de la eficiencia del detector, del número de iones incidentes, de la absorción que sufren los rayos X en la muestra, y de la probabilidad con que se produce la radiación por la colisión ion-átomo. Con ayuda de la fig. 3.4 se puede escribir, este número de fotones como:

$$N_i = \frac{\Omega}{4\pi} \epsilon \int \sigma_{ik}(E(x)) P(y, z) n(x, y, z) e^{-\mu_{\text{total}}(x)} dx dy dz, \quad (3.1)$$

donde $\Omega/4\pi$ es el ángulo sólido del detector, ϵ su eficiencia, σ_{ik} la sección eficaz de producción de rayos X, $P(y, z)$ es la distri-

bución espacial de intensidad del haz, $n(x, y, z)$ la distribución del elemento de interés, μ_{total} es la absorción de la radiación, con μ el coeficiente de absorción, y $E(x)$ es la energía del proyectil a la profundidad x . Esta energía puede evaluarse, como en el caso de RB5, por medio de la ecuación

$$E = E_0 - \int_0^x \frac{dE}{dx} dx, \quad (3.2)$$

en la cual E_0 es la energía de incidencia, y dE/dx es el poder de frenamiento.

Se observa, pues, que para la aplicación de PIXE se requiere el conocimiento de dos cantidades básicas: la sección eficaz de producción de rayos X, y el poder de frenamiento. La primera está íntimamente relacionada con la sección eficaz para la producción de vacancias en el átomo, es decir, la ionización. Esta relación puede expresarse, para emisión de rayos X K_i :

$$\sigma_{K_i} = \sigma_i \omega_K F_i \quad (3.3)$$

en que σ_i es la sección eficaz de ionización, ω_K es la producción de fluorescencia (fluorescence yield), y F_i es la intensidad relativa de todas las posibles transiciones que producen radiación en la línea i . La producción de fluorescencia (que en adelante llamaremos simplemente fluorescencia), es el cociente del número total de fotones X emitidos entre el número total de vacancias en la capa K. Para la capa L (y capas superiores), las expresiones son más complicadas, puesto que además de las transiciones radiativas de electrones procedentes de capas más altas, se puede dar el caso de transiciones no radiativas entre las subcapas L_1 , L_2 y L_3 . Así, si se crea una vacancia en la subcapa L_1 , ésta puede llenarse con un electrón de la subcapa L_2 , dejando a su vez una

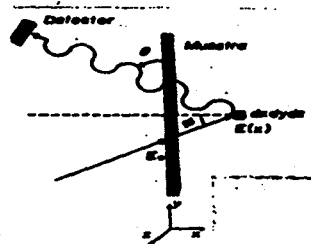


Fig. 3.4. Geometría para la producción de rayos X por bombardeo con iones. θ es el ángulo entre la dirección incidente del haz y la normal a la superficie del blanco, ϕ representa el ángulo de detección, y E_0 es la energía de incidencia.

vacancia que se ocupa con otro electrón de la subcapa L_n . El efecto neto es una vacancia en L_n . A estas transiciones no radiativas se les conoce como transiciones Coster-Kronig [33]. En estos casos, es preciso conocer las secciones de ionización y las fluorescencias para cada subcapa. De esta manera, se tiene para la sección de producción de las líneas L más comunes en el análisis PIXE:

$$\sigma_{L_{23}} = \sigma_{L_{12}} f_{12} + \sigma_{L_{12}} f_{12} + \sigma_{L_{23}} + \sigma_{L_n} \omega_L F_{L_{23}} \quad (3.4)$$

$$\sigma_{L_{23}} = \sigma_{L_{12}} \omega_L F_{L_{23}} + (\sigma_{L_{12}} + \sigma_{L_n}) \omega_L F_{L_{23}} + \sigma_{L_{12}} f_{12} + \sigma_{L_{12}} f_{12} + \sigma_{L_{23}} + \sigma_{L_n} \omega_L F_{L_{23}} \quad (3.5)$$

$$\sigma_{L_{23}} = \sigma_{L_{12}} \omega_L F_{L_{23}} + (\sigma_{L_{12}} + \sigma_{L_n}) \omega_L F_{L_{23}} \quad (3.6)$$

$$\sigma_{L_{23}} = \sigma_{L_{12}} f_{12} + \sigma_{L_{12}} f_{12} + \sigma_{L_{23}} + \sigma_{L_n} \omega_L F_{L_{23}} \quad (3.7)$$

donde las σ_{L_i} son las secciones de ionización de las subcapas i y ω_L son las fluorescencias; f_{ij} es la probabilidad de una transición Coster-Kronig de la capa j a la i ; $F_{L_{ij}}$ es la probabilidad de que ocurra una transición radiativa, tomada como la fracción de rayos X originados por una vacancia en la subcapa L_n , y que contribuya a la línea L_{ij} .

Como puede verse de las ecs. (3.4-3.7), se requiere de un conocimiento de las secciones de ionización de cada subcapa, separadamente, para poder calcular la sección de producción de rayos X de cada una de las líneas L. Sin embargo, en ocasiones se puede definir una fluorescencia promedio, y utilizar una intensidad relativa de la línea i , en analogía con el caso de la capa K, y resultará entonces:

$$\sigma_{L_{ij}} = \sigma_{L_{ij}} \bar{\omega}_L F_{L_{ij}} \quad (3.8)$$

ecuación donde $\sigma_{L_{ij}}$ es la sección de ionización total de la capa L, $\bar{\omega}_L$ es la fluorescencia promedio, y $F_{L_{ij}}$ es la intensidad relativa. En cuanto al uso de la ec. (3.8), aparecen dificultades que se discutirán en un capítulo posterior.

Además de los rayos X producidos por las transiciones atómicas, existe en los espectros una radiación de fondo. En

general, los picos característicos están superpuestos a dicho fondo. Las fuentes productoras del ruido son tres: (i) radiación de frenado (Bremsstrahlung) de electrones secundarios; (ii) radiación de frenado de los proyectiles, y (iii) dispersión Compton de rayos γ producidos en excitación de estados nucleares. Discusiones más amplias sobre las propiedades y origen de la radiación de fondo pueden encontrarse en las referencias [28] y [31]. Debe apuntarse, sin embargo, que esta radiación en ocasiones evita la detección de algunas líneas. Por otra parte, para blancos gruesos es más importante la primera fuente, aunque también depende de la energía de incidencia del proyectil y de su número atómico.

Un aspecto fundamental de PIXE es la sensibilidad que presenta para la detección de trazas de elementos. Folkmann et al. [34], demuestran que es posible obtener concentraciones de elementos dentro de una matriz de hasta 1 ppm, en condiciones óptimas de operación. Esta sensibilidad depende fuertemente del elemento de interés, y del medio en el cual se encuentra absorbido.

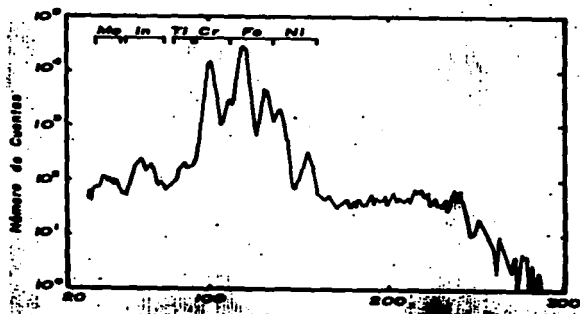


Fig. 3.5. Espectro por PIXE de una línea para estándar.

Una de las mayores ventajas de PIXE es que ofrece la posibilidad de realizar análisis multielemental, es decir, en un solo espectro se puede obtener información acerca de todos los elementos existentes en la muestra. Esto se encuentra limitado a elementos con $Z \geq 13$, a causa de la absorción de los rayos X de elementos ligeros en las ventanas del sistema de detección. Un espectro típico de PIXE puede apreciarse en la fig. 3.5. En él se advierte la presencia de las líneas K_{α} y K_{β} de diversos elementos ligeros (titanio, cromo, hierro y níquel), y las líneas L de elementos más pesados (molibdeno e indio). Además, es evidente la existencia de la radiación de fondo.

3.2. APLICACION DE PIXE A LA MEDICION DE ESPESORES.

Como se dijo previamente, la cuantificación de un espesor con PIXE tiene una asociación directa con los perfiles de profundidad, pues la primera puede tomarse como un caso particular de la segunda. Un método que sea útil para obtener un perfil de profundidad será, en general, bueno para medir espesores. Debe notarse que lo inverso no es necesariamente cierto.

La descripción que se haga de las aplicaciones de PIXE a la investigación de espesores se realizará dividiéndolas en categorías, de acuerdo a semejanzas que presentan entre sí.

3.2.1. DECONVOLUCION DE LA INTEGRAL.

Se puede escribir la ec. (3.1) en la forma

$$N_{\alpha}(x) = \int_0^{\text{max}} n(x) \sigma_{\alpha}(E) e^{-\mu x} dx. \quad (3.9)$$

si se supone que tanto el haz como la concentración de elementos de la muestra son uniformes en el plano yz .

La ec. (3.9) muestra que es posible, en principio, extraer el perfil de concentración $n(x)$ de un conjunto de experimentos en los cuales se varían sistemáticamente ya sea la absorción, o la sección eficaz de producción de rayos X. La primera alternativa se logra con la selección de diversas líneas de rayos X característicos, o bien con diferentes ángulos de salida, para la

radiación. Por otro lado, la segunda opción puede efectuarse variando la energía de incidencia E_0 , el ángulo de incidencia θ , la radiación característica medida, o la naturaleza de los proyectiles.

Si se toma en consideración la relación existente entre la energía de un ion y su alcance dentro de un material dado, se puede escribir para la ec. (3.9):

$$N_{\alpha}(x) = \int_0^{\text{max}} \Gamma(x) \sigma_{\alpha}(x) dx. \quad (3.10)$$

Aquí, $\Gamma(x) = n(x) e^{-\mu x}$, y $x_0 = R \cos \theta$, con R el alcance del proyectil. Dado que $\Gamma(x_0 - x) = 0$ cuando $x \geq x_0$, el límite de integración superior se puede extender a infinito, resultando así:

$$N_{\alpha}(x_0) = \int_0^{\infty} \Gamma(x) \sigma_{\alpha}(x_0 - x) dx. \quad (3.11)$$

Lo que resulta es una ecuación integral, con un núcleo $K(x_0, x)$ dado por la sección de producción de rayos X. Esta ecuación se puede resolver por medio de un espectro experimental $N_{\alpha}(x_0)$. Para obtener el perfil de concentración "amortiguado", $\Gamma(x)$.

El primer intento para realizar la deconvolución de la integral fue hecho por Reuter y Smith [35]. La variación que efectúan es la de energía de incidencia del ion, el método general para invertir la ecuación consiste en expresar la integral como un conjunto de ecuaciones lineales, y aplicar una inversión matricial para resolver el sistema. En el caso particular de Reuter y Smith, el perfil de concentración se dio como una serie de puntos conectados entre sí por arcos de parábola, $C_j = C(x_j)$. Así, la ecuación se transforma en:

$$1(x_j) = \sum A_{ij} C_j, \quad (3.12)$$

donde A_{ij} son los elementos de la matriz que ha de invertirse. Sin embargo, la matriz A es difícil de invertir, debido a que contiene términos demasiado grandes y demasiado pequeños; el resultado

debe notarse también que cuando la energía del ion es menor que la energía de ligadura del electrón a expulsar, la sección de ionización se anula, haciendo válida la ec. (3.12).

final lleva a una serie de fluctuaciones erráticas.

El siguiente paso en esta dirección fue realizado por Fabst [3a], quien para invertir la integral utiliza variaciones de N_{ij} con el ángulo de incidencia de las partículas excitadoras. El sigue el mismo camino de la ec. (3.12), y encuentra que la matriz A tiene un comportamiento irregular, por la misma razón que en el caso de Keuter y Smith. Por otro lado, al aplicar su método de inversión a una muestra de InSb contaminada con telurio, cuya concentración sigue un perfil gaussiano, encuentra oscilaciones menores a 10^{-3} . Sin embargo, al variar las $I(x_j)$ en 1%, las oscilaciones resultantes son del orden de 10^3 , aunque aplicando técnicas para suavizar las $I(x_j)$, las oscilaciones se reducen, sin desaparecer (fig. 3.e). Es conveniente agregar que Fabst considera que la sección eficaz de ionización varía como la cuarta potencia de la energía de los protones.



Fig. 3.e. Perfil gaussiano, y resultado obtenido con el parámetro de suavización escogido idealmente. De la ref. [3a].

Con el fin de superar la dificultad presentada por las oscilaciones, Veen et al. [37, 38], simplifican la formulación cuando consideran las capas sucesivas en la muestra iguales a los alcances de los protones usados, los cuales inciden con diferentes energías. Así, el número de fotones producidos puede tomarse como la suma de las contribuciones de cada capa:

$$I(x_j) = k \sum_{i=1}^L \int_{x_{i-1}}^{x_i} \Gamma(x) \sigma(x_i - x) dx. \quad (3.13)$$

donde x_i y x_{i-1} son los alcances perpendiculares de los protones que

tienen energías e_i y e_{i-1} , respectivamente. Luego, sustituyen el perfil amortiguado $\Gamma(x)$ por una constante C_i , de modo que regresan a la ec. (3.12), pero en este caso las A_{ij} son:

$$A_{ij} = k \int_{x_{j-1}}^{x_j} \sigma(x_i - x) dx, \quad (3.14)$$

donde i corresponde a la mínima energía usada, y de esta manera A_{ij} es una matriz triangular. Por otro lado, la sección eficaz en una capa de material depende de la energía en esa capa, por lo que resulta:

$$A_{ij} = A_{i-1,j-1} \quad (3.15)$$

Esta ecuación reduce el número de grados de libertad, y hace inmediata la inversión de la matriz. Sin embargo, las oscilaciones de C_i siguen existiendo, por lo cual se hace necesario un proceso de suavizado, y una re-evaluación de las A_{ij} . Para esto, se toman las C_i como el valor de $\Gamma(x)$ a la mitad de cada capa, suponiendo que en ella la concentración es constante, con lo cual se tiene:

$$C_i = C_0 \exp[-\mu(x_i + x_{i+1})/2 \cos \theta]. \quad (3.16)$$

y se toma como valor inicial de A_{ij} a los $I(x_j)$. Con un procedimiento iterativo, obtienen los valores reales de los A_{ij} , y esto permite invertir la ec. (3.12). Los resultados que se obtienen están totalmente libres de oscilaciones.

Brissaud et al. [39] discuten más ampliamente el método desarrollado por Veen et al., y lo extienden al considerar que las A_{ij} pueden incluir funciones de peso $f_j(x)$, para quedar en la forma:

$$A_{ij} = k \int_0^{\infty} f_j(x) \sigma(x_i - x) \exp(-\mu x / \cos \theta) dx. \quad (3.17)$$

Veen et al. usan como $f_j(x)$ funciones escalón de ancho constante, pero Brissaud et al. utilizan además funciones escalón de ancho variable, gaussianas, polinomios de Hermite, entre otras. Los perfiles de concentración que obtienen son muy semejantes en todos los casos. Toman en cuenta también los errores experimentales en el número de rayos X detectados, y encuentran una excelente reproducibilidad.

Rössiger [40] sigue un camino ligeramente distinto para invertir la integral. Tiene en consideración que se efectúan N medidas bajo diferentes condiciones experimentales (que pueden ser variación del ángulo o de la energía de incidencia). Esto da como resultado un conjunto de ecuaciones dado por:

$$Y_{exp}^i = \frac{1}{\sin^2 \theta} \int_0^{\infty} n^2(a_1, \dots, a_{K+1}) \sigma_N(E_0^i, \theta^i) e^{-\mu_N x} dx, \quad (3.18)$$

(i = 1, \dots, N)

donde $n^2(x)$ es una función modelo para la concentración que contiene K parámetros libres como incógnitas. Dado que $K < N$, el sistema está superdeterminado, por lo cual la solución debe hallarse por el mínimo de la función:

$$F(a_1, \dots, a_K) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{Y_{exp}^i - Y^i}{Y^i} \right]^2. \quad (3.19)$$

ecuación en la cual Y^i denota el lado derecho del sistema de ecuaciones dado por (3.18). Rössiger recalca que el método es extremadamente sensible a la forma en que se calcula la sección eficaz de producción de rayos λ $\sigma_{\lambda}(E)$, y al poder de frenamiento.

La aplicación de este método por Rössiger a muestras de GaAs y Si implantadas con argón da buenos resultados, pues obtiene un perfil de concentración gaussiano para el argón, lo cual era de esperarse, y que además da una buena coincidencia con el perfil que se mide con AES.

Otra técnica, desarrollada por Brunner [41], está fundamentada en el uso de "hojas de frenamiento", es decir, una película autosostenida antepuesta a la muestra de interés, y medir rayos λ producidos por esta última cuando hay hoja y no la hay, y tomar un cociente entre ellas. Brunner tiene la ecuación básica

$$A = [(E_0^h - c_0 s_0) / (E_0^k - c_0 s_0 - c_0 s_0)]^{1/\mu_0} e^{\mu_0 s_0}. \quad (3.20)$$

Aquí, A es el cociente de intensidades antes mencionadas, E_0 es la energía de incidencia del proyectil, s_0 es la profundidad a la cual se halla el elemento de interés, s_0 es el espesor de la "hoja de frenamiento", μ_0 es el coeficiente de absorción de masa de esta última, mientras que A y i están dados por las ecuaciones:

$$- \frac{dE}{dx} = aE^{1+q}, \quad (3.21)$$

$$\sigma_N = E^i. \quad (3.22)$$

Z es el número atómico de la matriz de la muestra y q es un número positivo; además, los c_i son factores geométricos.

De la ec. (3.20) puede despejarse s_0 , que es la cantidad de interés. Sin embargo, es necesario advertir que el método está considerando formas muy particulares para el frenamiento y la sección de producción de rayos λ , las cuales son fundamentales en su aplicación. No obstante, su utilización para medir la profundidad a la cual se encuentran impurezas de níquel implantadas en plata, con una hoja de frenamiento de cobre, da resultados aceptables.

Benke et al. [42], por otra parte, presentan un método que también se basa en un cociente de intensidades medidas. En primer lugar, hacen la suposición de que la capa de interés es infinitamente delgada, y así tienen el cociente:

$$Y = Y(E_1) / Y(E_2) = \sigma(E_1 - E_1 x_0) / \sigma(E_2 - E_2 x_0), \quad (3.23)$$

donde las E_i son dos energías de incidencia distintas, E_i son los frenamientos evaluados en esas energías, y x_0 es la profundidad a la cual se halla el elemento. La ec. (3.23) se resuelve para x_0 entonces, con el uso de métodos numéricos y modelos adecuados de la sección eficaz y el frenamiento.

El modelo se puede extender a capas del elemento de un espesor finito, para lo cual se hace una aproximación en la integral (3.1), tomando valores promedio. Esto lo justifican Benke y sus colaboradores por el hecho de que el integrando es una función monótona. Al hacer esta aproximación, se obtiene una ecuación totalmente análoga a la ec. (3.23), excepto que en lugar de x_0 aparece un ancho efectivo:

$$x_0 = x_1 + \beta x_2, \quad (3.24)$$

donde x_1 es la profundidad a la cual se halla la capa, $2x_2$ es el ancho de ésta, y β es una constante de proporcionalidad entre el frenamiento de la capa y el frenamiento del mismo elemento

presentándose como blanco grueso.

La aplicación a la medición de espesores de películas superpuestas de cobre y plata da excelentes resultados. Estas películas son del orden de 3000 Å, y se tienen incertidumbres del 2%.

Posteriormente el mismo Benka [43], y Geratschikger [44], utilizan el mismo principio de los cocientes de intensidades medidas, pero ahora empleando tres energías de incidencia, y así pueden calcular también la concentración de las películas. De esta manera se obtienen dos ecuaciones:

$$\frac{Y(E_1)}{Y(E_2)} = \frac{f(a, b, c, C_0)}{f(a, b, c, C_0)} = Y(a, b) \quad (3.25)$$

$$\frac{Y(E_1)}{Y(E_2)} = \frac{f(a, b, c, C_0)}{n(a, b, c, C_0)} = Z(a, b),$$

en las cuales a es la profundidad media de la capa de interés, b su espesor, y C_0 es una concentración alrededor de la cual oscila la concentración real, c . Una tercera ecuación aparece al integrar numéricamente la ec. (3.1) para un blanco infinitamente grueso. Esto da como resultado:

$$\frac{Y(E_1)}{Y(E_2)} = \frac{c}{C_0} \frac{f(a, b, c, C_0)}{f} \quad (3.26)$$

La solución a estas ecuaciones se efectúa por métodos iterativos. De nueva cuenta, su uso en películas superpuestas Ag/Cu/Ag da magníficos resultados, coincidentes con el análisis efectuado por RBS.

3.2.2 MEDICIÓN DIRECTA DE ESPESORES CON PIXE.

En la sección anterior se describieron diversos métodos que, en general, tienen como finalidad obtener perfiles de concentración en profundidad. Como puede concluirse fácilmente, estos procedimientos se pueden aplicar a la medición de espesores si se considera el sistema película-sustrato como uno que presenta un perfil de concentración dado por una función escalón. Sin embargo, también se han elaborado métodos que específicamente miden el espesor de una película.

La primera medición de espesores con PIXE fue realizada por Khan et al. [45], quienes originalmente proponen utilizar la ec. (3.1) para el número de rayos X detectados, pero haciendo la aproximación de que la pérdida de energía en la película es ignorable, y así, obtienen para el número de fotones detectados, y que fueron producidos por un elemento en la película:

$$N_X = n \sigma_X A r \quad (3.27)$$

Aquí, n es la densidad atómica de la película, y $A r$ es su espesor. La sección eficaz σ_X se evalúa en la energía de incidencia. Además, es preciso observar que la absorción de los rayos X en la película no se toma en cuenta.

El método fue aplicado a películas de carbón [46], y de aluminio [45], y se dan espesores medidos de 30 Å para el carbón, y de 185 Å \pm 10%, para el caso del aluminio. Utilizan un contador proporcional en lugar de un Si(Li).

Christensen et al. [47] encuentran los límites de validez de este método, usando para ello el cociente entre el número de fotones producidos por la película y los producidos por un blanco grueso. Cuando se grafica esta cantidad como función del espesor, en la región de espesores pequeños se obtiene una recta, lo cual está en coincidencia con la ec. (3.27). Logran también medir espesores de 90 Å, pero con una incertidumbre del 15%. Es importante agregar que la energía de incidencia de los protones empleados como proyectil es de 100 keV (fig. 3.7).

El siguiente trabajo en que se aplicó PIXE para la medición de espesores fue hecho por Musket y Bauer [48]. Esencialmente, siguen la técnica propuesta por Khan et al. [45], es decir, suponen que la película es lo suficientemente delgada como para ignorar la absorción de los fotones y el frenamiento de los protones. Sin embargo, expresan la ec. (3.27) con ciertas modificaciones:

$$N_X(L) = \frac{d\Omega}{4\pi} \epsilon N_0 \sigma_X(E_p) L \quad (3.28)$$

donde N_0 es la concentración del elemento de interés en la película, supuesta uniforme, y L es el espesor de la película. El

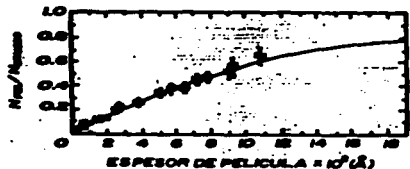


Fig. 3.7. Gráfico de Intensidades de blancos delgado y grueso, contra espesor, para aluminio. Ref. [47].

resto de los términos son conocidos. El uso que se dio al método fue medir el espesor de capas de óxidos crecidas sobre metales puros.

Musket y Bauer enfatizan el hecho de que el empleo de la ec. (3.28) requiere del conocimiento de la eficiencia del detector ϵ , y el ángulo sólido. Para eludir esta necesidad, utilizan un Patrón de espesor conocido, y midiendo la intensidad de los rayos X de este patrón, N_0 , tienen como resultado:

$$L = \frac{C N_0}{N_0 C_0 \epsilon \Omega} \quad (3.29)$$

donde C_0 es la concentración en el patrón. Aquí se ignora también la absorción en el patrón, por lo cual tampoco es indispensable conocer la forma precisa en la cual se presenta el óxido.

Con esta técnica, Muskel y Bauer logran medir espesores de hasta 40 Å de óxido de cobre, en un sustrato de cobre, y de 120 Å de óxidos en acero. Hay que decir, sin embargo, que en este último caso, el no conocer la exacta composición del óxido hace que pueda haber 115 Å de Cr_2O_3 , 130 Å de Fe_2O_3 ó 120 Å de NiO. Por tanto, aunque tratan de ignorar qué tipos de óxidos están presentes, de este ejemplo se ve la necesidad de conocerlos. Los proyectiles usados fueron protones con energías entre 100 y 350 keV.

Después que se explotó a fondo el procedimiento establecido por la ec. (3.27), se buscaron formas alternativas para medir el

espesor. Así, aparecen los trabajos efectuados por Feldman et al. [49], y por Fabat [50]. En ellos, la base se encuentra en la variación del ángulo de incidencia del proyectil con respecto a la normal a la muestra.

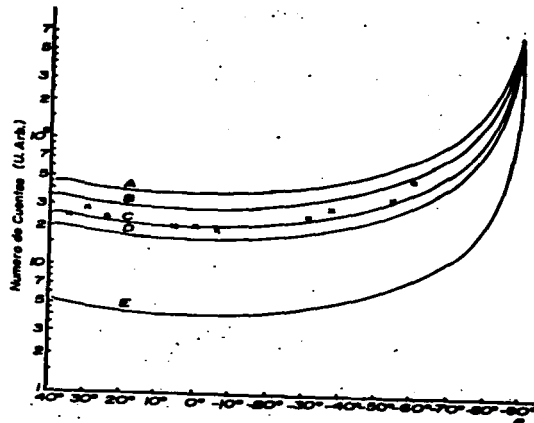


Fig. 3.8. Variación de la intensidad de rayos X al girar el blanco, para una muestra de sílice contaminada con zinc. Las curvas A-E son cálculos para espesores de 2000, 1000, 500, 200 y 100 Å, respectivamente. Los cruces representan mediciones para una película de sílice, de 1000 Å, de la Ref. [50].

Feldman y sus colaboradores tratan de medir el espesor de capas de óxido formadas sobre GaAs, mostrando la incapacidad de RBS para efectuar dicha medida. Así, utilizan patrones de espesor conocido, y miden la intensidad de los rayos X producidos al variar el ángulo de incidencia. Por simple comparación determinan el espesor. El valor que obtienen es del orden de 3000 Å para el óxido de galio, mientras que para películas de germanio evaporadas sobre el GaAs, pueden medir espesores del orden de 1000 Å. Feldman et al. usaron iones de helio de 1.0 MeV, y utilizan, como comparación solamente, una variación de la sección eficaz de producción de rayos X con la sexta potencia de la energía ($\propto E^6$).

Por otra parte, Fabst hace una integración numérica de la ec. (3.1), variando el ángulo de incidencia. Así, obtiene un conjunto de curvas (fig. 3.6), con las cuales hace comparación directa de los datos experimentales. Para su caso particular, hace medición de un espesor de 1100 Å de una película de zinc-silicio sobre silicio puro, aunque en apariencia el método puede tener mayor resolución. Se emplean protones de 1.3 MeV, y la sección de ionización usada es la que se calcula con la Aproximación de Born de Onda Plana (véase cap. 4).

Fabst también trata de aplicar este método a perfiles de concentración gaussianos y asimétricos, construyendo también curvas, y encontrando máximos en ellas, los cuales relaciona con la posición del máximo en la distribución gaussiana. El sistema que estudia es silicio contaminado con zinc.

Un método distinto, y que en principio es aplicable a perfiles de concentración, es el propuesto por Ahlberg (51). El procedimiento se basa en la variación que sufre la razón (I_1/I_2) (es decir, el cociente entre la cantidad de rayos X $K_{\alpha 1}$ y la cantidad de rayos X $K_{\alpha 2}$), de acuerdo a la profundidad a la cual se halla un elemento dentro de la muestra. Este cambio se debe a que los rayos $K_{\alpha 1}$ (ϕL_1), tienen mayor energía que los rayos $K_{\alpha 2}$ (ϕL_2), y por ello, en general, su absorción será menor.

La forma más práctica de aplicar el método consiste en hacer

integraciones numéricas de la ec. (3.1) para cada línea, tomar el cociente, y comparar con los resultados experimentales. Debe notarse que los rayos X medidos ya no son los producidos en la película, sino en el sustrato. Ahlberg, sin embargo, no reporta el espesor medido de ninguna película. Señala que el método es muy sensible a los errores experimentales en los números de fotones medidos.

Un procedimiento que en principio solo es aplicable a sistemas binarios de elementos que tienen números atómicos muy próximos, fue presentado por Kössiger y Lenk (52). El problema en este tipo de sistemas es el de la superposición de los picos característicos de ambos elementos. Para ilustrar el método, se empleó el sistema aluminio sobre silicio, y se utilizan energías bajas del proyectil, para hacer que la pérdida de energía en la película sea importante, y lograr de esta manera que la cantidad de rayos X producidos por el sustrato sea comparable a la que se produce en la película.

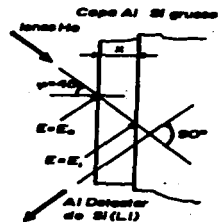


Fig. 3.9. Esquema para establecer el método propuesto por Kössiger y Lenk (52).

Con ayuda de la fig. (3.9) se puede obtener la ecuación:

$$K = \cos \phi \int_{E_1}^{E_0} dE/S. \quad (3.30)$$

donde S es el frenamiento en la película, E_0 es la energía del

proyector al abandonar la película. Para determinarla, se usan las relaciones:

$$Y_{Al}(E_0, X) = Y_{Al}(E_0) - Y_{Al}(E_1) \quad (3.31)$$

$$Y_{Si}(E_0, X) = Y_{Si}(E_1) e^{-\mu x / \cos \theta} \quad (3.32)$$

donde $Y_{Al}(E)$ y $Y_{Si}(E)$ son las cantidades de rayos X producidos por los elementos puros y gruesos. μ es el coeficiente de absorción de la línea K_{α} del Si en Al. El sistema de ecuaciones se resuelve haciendo ajustes polinomiales a los números de fotones detectados y usando una forma analítica para el frenamiento. Los resultados obtenidos son bastante confiables.

Kossiger y Lenk miden una película de aluminio, obteniendo un espesor de $5\mu\text{m} \pm 11\%$ A, y lo comparan con una medición hecha con perfilometría, la cual da $6\mu\text{m} \pm 7\%$ A, es decir, la concordancia es muy buena. Puede advertirse que en este caso se usan los rayos X característicos tanto del sustrato como de la película. Las energías usadas para los iones de He varían entre 200 y 350 keV.

Un método alternativo fue desarrollado por Torrasi et al. [53]. En este caso, los rayos X utilizados son los del sustrato. La técnica consiste en medir primero la cantidad de rayos X producidos en un patrón, el cual no es sino un blanco grueso con la misma composición que el sustrato, pero sin película. A continuación se miden los rayos X de la muestra de interés, y se toma un cociente entre ellos. Este cociente (el rendimiento normalizado) se relaciona con una curva, obtenida experimentalmente, del número de fotones producidos en el patrón, como función de la energía de incidencia de los protones excitadores. Se obtiene así la energía con la cual salen los protones de la película, y usando el frenamiento del material que forma la película, se obtiene su espesor. La absorción de los rayos X del sustrato en sí mismo y en la película no se toma en cuenta.

Torrasi y sus colaboradores miden espesores de películas de carbono, aluminio y cobre en oro, usando la línea M_{α} de este último. Los espesores mínimos observados son de 150-200 Å. Como puede notarse, la cantidad importante en este método es el frenamiento

(fig. 3.10).

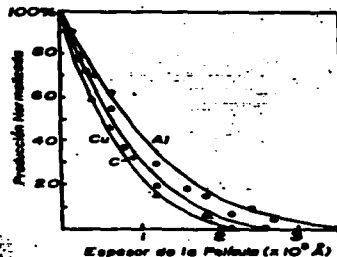


Fig. 3.10. Cambio de la producción normalizada de rayos X de oro como función del espesor de películas depositadas: carbono, aluminio y cobre. De la ref. [53].

siguiendo la línea de utilizar cocientes entre cantidades de rayos X. Rickards [54] propone un método para evaluar el espesor de una capa de óxido sobre un metal puro, basándose en las expresiones presentadas por Reuter et al. [55] para análisis cuantitativo con PIXE. Aquí se define una cantidad R , como la razón de los rayos X del metal producidos por la muestra oxidada, a los producidos por una muestra no oxidada. Esta cantidad se calcula numéricamente, y con esto construye gráficas de R contra la energía de incidencia del protón, dando diferentes curvas para diferentes espesores del óxido. Midiendo experimentalmente la función R , se puede obtener el espesor del óxido.

La aplicación del procedimiento arriba descrito a una muestra de silicio oxidado, da un espesor de 0.03 mg/cm^2 para el SiO_2 , usando protones con energías entre 300 y 500 keV.

Una pequeña variante para medir el espesor consiste en tomar el cociente de cantidades de rayos X producidos por un elemento en la película, al número de fotones característicos de un elemento distinto, presente en el sustrato. Un ejemplo de aplicación de

esto se puede encontrar en el trabajo de Rickards y Zironi [34]. Nuevamente, se hacen cálculos numéricos del cociente ya citado, y se comparan con los resultados experimentales. El sistema usado para mostrar el método es el de titanio sobre acero. Un efecto importante en este sistema es el de la excitación secundaria, es decir, rayos X provenientes del sustrato producidos por elementos más pesados que el titanio (hierro y cromo), provocan ionización, y por tanto emisión de rayos X característicos del titanio. Este efecto se toma en cuenta por Rickards y Zironi, el espesor mínimo medido por ellos es de 233 ± 18 Å. Los proyectiles empleados son protones con energías que van de los 400 a los 700 keV.

3.3 EVALUACION DE LOS METODOS.

La gran diversidad de métodos que se describieron en la sección anterior, hace necesaria una discusión sobre la validez o facilidad de aplicación a la cuantificación de espesores, con el fin de establecer el lugar dentro de las técnicas para medición de espesores que corresponda a cada uno de ellos, así como el de los métodos que puedan proponerse posteriormente.

En primer lugar, debe hablarse de las técnicas de deconvolución. Los métodos presentados por Reuter-Smith [35] y Pabst [36], como ya se dijo, dan como resultado oscilaciones que invalidan los cálculos en gran proporción. Estas fuertes variaciones se atribuyen al comportamiento irregular de la matriz A, aunque también debe añadirse la gran cantidad de parámetros independientes que intervienen.

El obstáculo que representa el gran número de parámetros libres en los métodos de Reuter-Smith y Pabst, se ve superado por las técnicas de Vegh et al. [37, 38] y Brissaud et al. [39], al relacionar los elementos de la matriz por medio de la ec. (3.15). La reducción en el número de grados de libertad lleva finalmente a resultados consistentes. Sin embargo, existe en estas técnicas el problema matemático, pues el procedimiento de inversión es largo, y no perfectamente aclarado en los trabajos citados.

Aunque el artículo de Rössiger sí explica claramente los procedimientos matemáticos a seguir, la influencia de la forma en que se evalúan la sección eficaz de producción de rayos X, y el poder de frenamiento, es sumamente importante en el resultado. Esta influencia no se discute en los trabajos de Vegh et al. ni en el de Brissaud et al.

El trabajo de Brunner [41] tiene el inconveniente de estar fundamentado en formas extremadamente peculiares tanto del frenamiento como de la sección de producción de rayos X. Cualquier desviación en los valores reales de estas magnitudes de las formas propuestas, echa por tierra la validez del método.

Los procedimientos explicados por Benka et al. [42, 43], son bastante simples, y aun Geretschläger [44] da sugerencias para la selección de energías de incidencia del proyectil. Sin embargo, las precisiones más altas sólo se logran en espesores superiores a 2000 Å [44]. Esto, desde luego, limita en gran medida la aplicabilidad de la técnica.

En lo referente a los métodos de medición de espesores específicamente propuestos, puede discutirse inicialmente el método de Khan et al. [45-47]. Este sólo es utilizable en películas sumamente delgadas, pues como ellos mismos señalan, a espesores mayores que un cierto límite, hay una clara desviación de la linealidad. Además, como se hace notar en el trabajo de Musket y Bauer [48], la eficiencia del detector debe conocerse, lo cual en algunos casos es una limitación. La modificación que hacen Musket y Bauer (tomar el cociente con otra intensidad), presenta el obstáculo de requerir un patrón.

Las variantes desarrolladas por Feldman et al. [49] y Pabst [50], que en cierto sentido son equivalentes, pueden ser métodos apropiados. Sin embargo, están limitados, al hecho de que el primero emplea patrones de espesor conocido, y el segundo necesita expresiones adecuadas para la sección eficaz de ionización y el frenamiento.

La técnica de Ahlberg [51] parece ser una de las mejores, por varias razones. La primera es que, en principio, sólo se requiere obtener un espectro para medir el espesor. La segunda consiste en que no se requiere de ningún patrón. Las limitaciones posibles surgen al momento de tener los modelos apropiados para la sección de ionización y el frenamiento, y en conocer la eficiencia del sistema de detección como función de la energía de los rayos X. Además, deben conocerse perfectamente las razones ρ/α de los elementos puros.

El trabajo de Rossiger y Lenk [52] está limitado por ellos mismos a sistemas de elementos con números atómicos cercanos. No obstante eso, se puede advertir que su aplicación no tiene por qué estar restringida a dichos sistemas. La limitación importante que sí presenta es la de requerir dos patrones, y efectuar mediciones a varias energías para efectuar ajustes polinomiales.

El método de Torrasi et al. [53], aunque no está sujeto a la validez de un modelo para la sección eficaz de ionización, sí lo está al poder de frenamiento. Además sólo es válido o para películas muy delgadas, o para líneas características de muy alta energía, puesto que la absorción en la película se ignora por completo. Esto puede llevar a errores importantes, ya que, por ejemplo, reportan espesores de películas de cobre en oro, de un espesor de $\sim 2200 \text{ \AA}$ (Fig. 3.10). Como están midiendo la línea M_{α} del oro, que es de baja energía, están dejando de lado un factor, debido a la absorción, de 0.46, es decir, ¡un error de casi el 50%! Por otro lado, tiene la ventaja de no depender ni de la eficiencia ni del número de partículas incidente sobre el blanco.

La misma ventaja de no depender del número de proyectiles, ni de la eficiencia, la tiene el método de Rickards [54], aunque el utilizado posteriormente por Rickards y Zironi [55], sí depende de la eficiencia, pues se miden líneas de diferentes elementos, y por tanto, energías. Las influencias importantes en estos casos pueden prevenir tanto de la sección eficaz de ionización, como del poder de frenamiento.

De todo lo anteriormente dicho, podría tentativamente agregarse una línea más a la tabla 2.1:

Método	Material	Espesor Mínimo	Destructivo	Comentarios
PIXE	Z>12	$\sim 30 \text{ \AA}$	No	Muchas Variantes

Un hecho casi general en los métodos, es el uso de partículas con energías menores a 1 MeV. Esto se debe, principalmente, a la forma en que varían la sección eficaz de ionización y el poder de frenamiento a estas energías. Este comportamiento debe por sí quedar bien establecido para una correcta aplicación de un método específico, dado que, como se dijo antes, la mayor parte de ellos sufre una influencia decisiva por ambas magnitudes.

Esto hace necesaria una discusión más amplia alrededor de las formas que actualmente existen para calcular las dos magnitudes físicas ya mencionadas. Esto servirá para poder establecer la validez de estas teorías o expresiones, lo cual a su vez traerá como consecuencia la búsqueda de nuevas formas de aplicación del comportamiento que la sección de ionización y el frenamiento tienen.

4 SECCION EFICAZ DE IONIZACION

Del capítulo anterior, es posible extraer como conclusión que FIAE es definitivamente una técnica capaz de dar información sobre perfiles de profundidad. Es, por tanto, factible cuantificar espesores de películas delgadas.

Sin embargo, es preciso observar que existe una cantidad fundamental para el desarrollo y utilización de cada una de las técnicas: la sección eficaz de ionización. Un detalle que debe señalarse es que no existe consistencia entre las formas de evaluar esta cantidad. Mientras que algunos autores emplean un modelo teórico para la sección eficaz, otros siguen alguna expresión que a su juicio es el comportamiento más adecuado.

De lo anterior se desprende que es indispensable una discusión más amplia sobre las distintas formas de calcular la sección eficaz de ionización. Para ello, lo mejor es partir de la descripción de los modelos teóricos más usados, ya que a partir de algunos de ellos se han presentado fórmulas que permitan obtener dicha sección eficaz, y que se utilizan ampliamente. Además, debe ser posible a partir de esta discusión, decir cuál es la forma más apropiada para su cálculo.

Los modelos a discutir son cuatro: la Aproximación de Onda Plana de Born (PWSA), la Aproximación Semiclásica (SCA), la Aproximación de Encuentro Binario (BEA), y la Aproximación de Onda Plana de Born con correcciones por pérdida de energía, efectos relativistas del electrón a expulsar, deflexión coulombiana del proyectil, y perturbación de estados estacionarios del electrón (ECPSE). La validez desde el punto de vista experimental de dichas teorías será discutida en un capítulo posterior.

4.1 INTRODUCCION.

Una colisión ionizante no relativista entre una partícula cargada y un átomo se puede describir con la ayuda de un Hamiltoniano:

$$H = H_0 + aU_0 + bV_0 \quad (4.1)$$

H_0 representa al sistema átomo-partícula sin interacción; aU_0 es la interacción coulombiana núcleo-átomo (intensidad a), mientras que bV_0 es la interacción coulombiana ionizante (intensidad b), entre la partícula y los electrones atómicos. a y b son proporcionales a la carga de la partícula incidente. Q_0 .

Es posible expandir, en una serie de Born, la sección eficaz de ionización, en potencias de b [57]:

$$\sigma = \sum_{n \neq 0} b^n G_n(a). \quad (4.2)$$

Cada término $b^n G_n(a)$ se relaciona con los elementos de matriz de bV_0 entre los eigenestados de $H_0 + aU_0$. El término preponderante en esta serie es el de orden 2:

$$\sigma^{CVBA} = b^2 G_2(a) \quad (4.3)$$

Dado que $G_2(a)$ depende de los eigenestados de $H_0 + aU_0$, los cuales son productos de estados del átomo blanco no perturbado, y de estados que describen la partícula como una onda dispersada por la interacción coulombiana, se llama a esta primera aproximación la "Aproximación de Born de Onda Coulombiana" (CWBA). Así, la ec. (4.2) es una serie de Born de ondas coulombianas.

A continuación, cada coeficiente $G_n(a)$ se puede expandir en una serie de potencias de a , con coeficientes J_{mn} , que se relacionan con los elementos de matriz de U_0 y V_0 entre los eigenestados de H_0 . Dichos eigenestados son productos de estados atómicos no perturbados, y estados de onda plana de la partícula. Así, la serie es:

$$\sigma = \sum_{n \neq 0} \sum_{m \neq 0} a^m b^n J_{mn}. \quad (4.4)$$

Ahora se tiene una serie de Born de ondas planas, en

potencias de las intensidades de la interacción total $aU_0 + bV_0$, entre partícula incidente y átomo. Con el primer término, se tiene la "Aproximación de Born de Onda Plana" (PWBA):

$$\sigma^{PWBA} = b^2 J_{02} = b^2 G_2(a=0). \quad (4.5)$$

Esto es porque J_{02} depende sólo de los eigenestados de H_0 , los cuales son ondas planas, para la partícula. Los estados atómicos son los mismos en ambas series.

La ec. (4.5) muestra una relación entre σ y σ^{PWBA} , para una partícula de carga Z_0 :

$$\sigma^{PWBA} = Z_0^2 \lim_{a \rightarrow 0} [\sigma(Q_0)/Q_0^2]. \quad (4.6)$$

Así pues, la PWBA de la sección de ionización σ es igual al producto de Z_0^2 con el límite de dicha sección de ionización por cuadrado de la carga de la partícula, cuando la misma carga tiende a cero.

Para que la aplicación de la teoría de onda plana sea válida, se requieren tres condiciones fundamentales:

- (i) El proyectil debe actuar como una carga puntual;
- (ii) Las ondas inicial y final de la partícula son planas en todo el espacio;
- (iii) Los estados de los electrones del blanco son los del mismo \rightarrow sin perturbar.

Si estos requerimientos se cumplen, el único límite al cálculo de la sección es el de los estados de N_0 .

La excitación de los electrones atómicos se efectúa por medio de la interacción coulombiana de estos con el proyectil. A esto se llama, entonces, excitación coulombiana. Este proceso domina a velocidades lo suficientemente grandes como para que el proyectil sea considerado como un núcleo libre de electrones. Sin embargo, un proyectil lento puede tomarse como una simple partícula cargada si el radio de su capa K (a_{K0}), es grande comparado con el radio de la capa K del átomo blanco (a_{K0}). La razón de esto es que la ionización sólo puede tener efecto si el proyectil penetra dicha capa. Los electrones del proyectil quedan fuera de la región de

interacción.

→ La condición $a_{BK} \gg a_{BK}$ es equivalente a $Z_A \ll Z_B$, ya que los radios están dados por $a_{BK} = a_0/Z_{BK}$ y $a_{BK} = a_{BK}/Z_{BK}$, donde a_0 es el radio de Bohr ($a_0 = \hbar/mv_0 = 0.53 \text{ \AA}$) y $Z_{BK} = Z_A - 0.3$, $Z_{BK} = Z_B - 0.3$, son los números atómicos corregidos por apantallamiento. La extensión a capas L se logra tomando $a_{BK} = (2)^2 a_0/Z_{BK}$, con $Z_{BK} = Z_A - 4.15$. Es necesario que la penetración del proyectil sea profunda, puesto que los parámetros de impacto que contribuyen en forma más importante a la ionización son aquellos que tienen valores cercanos a a_0^{-1} , donde $R_{g_0} = R_{g_{BK}}/v_A$ es la mínima transferencia de momento para la ionización de un electrón de la capa K, cuya energía de ligadura es $R_{g_{BK}}$, debida al proyectil de masa M_A y energía $E_A = \frac{1}{2} M_A v_A^2$ mucho mayor que $R_{g_{BK}}$ [58]. Los proyectiles lentos, con $a_0 \ll a_{BK}^{-1}$, penetran a una gran profundidad para provocar la ionización.

Si se define un parámetro adimensional $\xi_{BK} = R_{g_{BK}}/Z_{BK}^2 R$ (con $R = 13.6 \text{ eV}$, la constante de Rydberg), el cual indica la diferencia de la energía de ligadura real con la que tendría el átomo hidrogenoide equivalente, puede advertirse que la condición $a_0^{-1} \ll a_{BK}$ es lo mismo que $v_A \ll v_{BK} = \frac{1}{2} \xi_{BK} v_{BK}$. Los proyectiles que cumplen esta condición (y $Z_A \ll Z_B$), actúan como cargas puntuales. Lo mismo ocurre a velocidades muy altas, en las que el proyectil pierde sus electrones al incidir sobre el blanco.

Para distinguir las colisiones lentas de las rápidas, puede emplearse el tiempo que toma el proyectil al cruzar la capa K del átomo a ionizar, que es aproximadamente a_{BK}/v_A , y compararlo con el tiempo característico del electrón, $1/\omega_{BK}$. Si $a_{BK}/v_A \gg 1/\omega_{BK}$, se tienen colisiones lentas, o de baja velocidad. Esta condición es, claramente, la misma que para penetración profunda: $a_0^{-1} \ll a_{BK}$. Definimos un nuevo parámetro,

$$\xi_{BK} = (a_0/v_{BK})^{-1} = v_A / \frac{1}{2} \xi_{BK} v_{BK} \quad (4.7)$$

la construcción arriba mencionada es $\xi_{BK} \ll 1$. Si $\xi_{BK} \gg 1$, la colisión es rápida, o de alta velocidad.

Adicionalmente, puede definirse un tercer parámetro.

relacionado con la energía de la partícula incidente:

$$\eta_{BK} = v_A/v_{BK} = v_A/v_0 Z_{BK} = (a_0/2) \xi_{BK}^{-1} \quad (4.8)$$

→ Puede verse que $\eta_{BK} = 40 Z_A$ (en MeV)/ $Z_{BK}^2 M_A$ (en u.m.s.). Con esto se observa que las colisiones son rápidas si las energías del proyectil son mayores que 0.5 MeV/u.m.s. en blancos ligeros, y 50 MeV/u.m.s. en átomos pesados.

4.2 LA APROXIMACION DE BORN DE ONDA PLANA (PWBA)

Para efectuar el análisis en esta aproximación, puede considerarse el proceso de ionización como uno en el que el proyectil imparte alguna fracción de su energía al átomo, dejándolo en un cierto estado final f , que estará descrito como una vacancia en la capa interna del átomo, más un electrón con energía cinética finita dentro del continuo.

La dispersión se estudia dentro de un sistema de coordenadas centrado en el átomo. La velocidad inicial v corresponde a la velocidad en el sistema de laboratorio, aunque la descripción se lleve al cabo en un sistema relativo. Debe notarse que la velocidad final no coincide en ambos sistemas, debido al retroceso del átomo blanco.

La distinción entre blanco y proyectil no puede consistir en la preparación del haz antes de incidir sobre el blanco. Ambos pueden ionizarse, y emitir electrones Auger o radiación K. Lo que determina finalmente el blanco es la radiación medida en el laboratorio. Esta distinción se utilizará en lo que resta del trabajo.

Puede reescribirse el Hamiltoniano, ec. (4.1), en la forma

$$H = H_0 + V. \quad (4.9)$$

Con ello, la amplitud de transición de un estado inicial i a un estado final f es:

$$T_{fi} = \langle \phi_f | V | \phi_i \rangle. \quad (4.10)$$

donde

$$H_0 \phi_f = E_f \phi_f. \quad (4.11)$$

y donde ϕ es la función de onda para el Hamiltoniano total.

La ec. (4.10) es útil como punto de partida, si V se toma como una perturbación que se anula al alejarse proyectil y blanco.

La función Φ es prácticamente imposible de determinar, aun para la dispersión en los sistemas más simples, para lo cual debe entonces seleccionarse N_p , y aproximar Φ . Se considera entonces el Hamiltoniano

$$H_0 = H_A(\xi) + H_p(r_p) \quad (4.12)$$

donde $H_A(\xi)$ es el Hamiltoniano del átomo, con ξ denotando las coordenadas de todos los electrones, y $H_p(r_p)$ es el Hamiltoniano del proyectil como partícula libre. r_p es su coordenada. Así, Φ puede tomarse como un producto de eigenfunciones de H_A y H_p . Un conjunto particular de eigenfunciones para el operador H_p está dado por las ondas planas:

$$\Phi_{K_f}(p) = (2\pi)^{-3/2} U_{pp}(K_f) \exp(iK_f \cdot r_p) \quad (4.13)$$

en la cual U_{pp} es la función de onda de espín del proyectil, y K_f es su momento final. Cuando el proyectil tiene energías relativistas, U representa un espínor de Dirac de cuatro componentes [59].

En el estado final, N_A describe $N-1$ electrones ligados y un electrón libre. Las eigenfunciones de N_A son conocidas, al menos en principio, y se les denota con Φ . Dichas funciones podrían obtenerse de cálculos autoconsistentes del tipo Hartree-Slater. La selección de estas funciones puede afectar en forma importante el cálculo de las secciones de ionización.

Por otro lado, como se explicó en la introducción, Φ se aproxima por una onda plana, lo que da nombre al método (PWBA).

Así pues, la amplitud de transición en la PWBA es:

$$T_{fi}^0 = (2\pi)^{-3/2} \int \Phi_f^*(\xi) U_{pp}^*(K_f) V(\xi, \sigma_e, r_p, \sigma_p) \times U_{pp}(K_i) \Phi_i(\xi) \exp(iq \cdot r_p) d^3r_p d^3\xi, \quad (4.14)$$

donde $q = K_f - K_i$, y $d^3\xi$ es la diferencial de todas las coordenadas electrónicas. Es indispensable conocer V para poder reducir la ec. (4.14). Se adopta la forma general

$$V(\xi, \sigma_e, r_p, \sigma_p) = V_0(r_p, \sigma_p) + \sum_{j=1}^N V_{jp}(r_j, \sigma_j, r_p, \sigma_p) \quad (4.15)$$

en la cual

$$V_{jp} = (2\pi)^{-3/2} |r_p - r_j| F(\sigma_j, \sigma_p) \exp(i\lambda |r_p - r_j|). \quad (4.16)$$

Cuando la dispersión no es relativista y es independiente del espín, de la ec. (4.15) se tiene el potencial de interacción tomando $\lambda=0$, $F=1$, y V_0 igual a la interacción coulombiana entre proyectil y núcleo.

Al introducir el potencial (4.15) en la amplitud de transición (4.14), se puede reducir esta a integraciones sobre funciones de onda de una sola partícula. Φ es eigenfunción del Hamiltoniano N_A de N partículas. Se hacen las siguientes suposiciones:

- 1- Φ es una combinación de productos de funciones de onda de una sola partícula, debidamente antisimetrizadas;
- 2- Las funciones de onda de partícula individual que no intervienen en la ionización permanecen inalteradas;
- 3- Estas funciones de onda individuales ligadas y libre son ortogonales entre sí.

Estas suposiciones no forman parte de la PWBA, estrictamente hablando. La suposición 3 hace que los elementos de matriz del término V_0 en el potencial (4.15) se anulen. Entonces, el elemento de matriz de la interacción de dos cuerpos se simplifica al integrar sobre r_p :

$$T_{fi}^0 = -iZ_0 e^2 / 2\pi^2 (q^2 - \lambda^2) \int \Phi_f^*(\xi) U_{pp}^*(K_f) \sum_{j=1}^N F(\sigma_j, \sigma_p) \times \exp(iq \cdot r_j) U_{pp}(K_i) \Phi_i(\xi) d^3\xi. \quad (4.17)$$

La función de onda atómica antisimetrizada se puede escribir:

$$\Phi_i(\xi) = (N!)^{-1/2} A(1, \dots, N) x_1(1) x_2(2) \dots x_N(N), \quad (4.18)$$

donde A es el operador que antisimetriza las funciones de onda, y las x_i funciones de onda de partícula individual. Los índices i a N se refieren a las partículas que no cambian, y x_i es la función de onda del electrón expulsado. Estas funciones de onda pueden ser relativistas.

Caso el operador A conmute con los operadores de interacción en la ec. (4.17), resulta para la amplitud de transición:

$$T_{fi}^0 = -[Z_0 e^2 / 2\pi^2 (a^2 - \lambda^2)] \int x_1^0(1) x_2^0(2) \dots x_N^0(N) U_{op}^0(K_f) \\ = \sum_{P_N} F(\sigma_1, \sigma_2) \exp(iq \cdot r) U_{op}(K_f) N! A(x_1(1) x_2(2) \dots x_N(N)) d^3r. \quad (4.19)$$

Se supone que x_1^0 y x_2^0 son ortogonales entre sí y con el resto de las x . Con ello, sólo el término $j = 1$ en la suma sobrevive, y sólo las permutaciones del operador A que llevan a la partícula 1 al estado x_1^0 persisten. Por la misma ortogonalidad, la única permutación que queda entre las funciones de onda no participantes es la que lleva al mismo orden que σ_1 . Si se integra sobre todas las x , excepto la del electrón expulsado:

$$T_{fi}^0 = -[Z_0 e^2 / 2\pi^2 (a^2 - \lambda^2)] \int x_1^0(r) U_{op}^0(K_f) F(\sigma_1, \sigma_2) \\ = U_{op}(K_f) x_1^0(r) \exp(iq \cdot r) d^3r. \quad (4.20)$$

Si $\lambda = 0$ y $F = 1$, se tiene la amplitud no relativista independiente del espín.

La sección eficaz diferencial con respecto al momento final K_f del proyectil es (40):

$$d\sigma_f = (1/\hbar^2 v) |T_{fi}^0|^2 d(E_f + E_e - E_i) d^3K_f, \quad (4.21)$$

en la que E_i y E_f son las energías inicial y final del proyectil, E_e es la energía transferida, y $d^3K_f = K_f^2 dE_f d\Omega_f$, puesto que $dE_f/dE = 1/v$, con $d\Omega$ el elemento de ángulo sólido para el proyectil dispersado. La función δ garantiza la conservación de la energía.

Al integrar la ec. (4.21) sobre E_f se obtiene:

$$d\sigma_f = (1/\hbar^2 v) E_f K_f / c^2 N! |T_{fi}^0|^2 d\Omega \quad (4.22)$$

En el límite no relativista, $E_{red}/c^2 \rightarrow M$, que es la masa reducida del sistema proyectil-átomo, y entonces

$$d\sigma_f = (2\pi)^2 K_f K_f / v^2 |T_{fi}^0|^2 d\Omega \quad (4.23)$$

Para el caso de interés, la interacción entre espines no interviene, y de la ec. (4.20) se tiene para una colisión ion-electrón:

$$T_{fi}^0 = (2\pi)^{-2} \int \langle n' | (-Z_0 e^2 / |R-r|) | n \rangle \exp(iq \cdot R) d^3R, \quad (4.24)$$

donde ahora se ha escrito n y n' para los estados inicial y final, r es la posición del electrón activo, y R es el vector de posición del proyectil. La carga nuclear del proyectil es $Z_0 e$, y la del blanco se denotará por Z_1 .

Integrando sobre R , la amplitud de transición es

$$T_{fi}^0 = (-Z_0 e^2 / 2\pi^2 \hbar^2 v^2) F_{nn}(q), \quad (4.25)$$

en donde el elemento de matriz atómico

$$F_{nn}(q) \equiv \langle n' | \exp(iq \cdot r) | n \rangle \quad (4.26)$$

se denomina el factor de forma inelástico para la colisión. El ángulo de dispersión θ del proyectil se relaciona con q por

$$q^2 = k_f^2 + k_i^2 - 2k_i k_f \cos\theta, \quad (4.27)$$

de lo cual resulta

$$q\theta \approx k_i k_f \sin^2 \theta. \quad (4.28)$$

Se sigue de aquí que la sección eficaz diferencial para la dispersión inelástica en la transferencia de momento dq está dada por la ec. (4.22) como:

$$d\sigma_{nn} = (4Z_0^2 e^4 / v^2) |F_{nn}(q)|^2 (dq/q^2) d\phi \quad (4.29)$$

en la que ϕ es el ángulo azimutal de K_f o q en el plano perpendicular a K_i .

Para obtener la sección eficaz sobre una determinada capa o subcapa, se supone que esta está totalmente llena, y se suma sobre todos los subestados que forman la subcapa, y que además sean congruentes con la energía final del electrón. El espín sólo interviene en este caso como un factor estadístico, multiplicando por 2 la ec. (4.29).

Si se integra sobre ϕ , se suma sobre los subestados finales y las direcciones del electrón, se define un factor de forma total con la sección eficaz diferencial para una transferencia de energía entre s y s' de un electrón que está originalmente en una capa inicialmente llena, denotada por s :

$$d\sigma_{ss} = 1/\hbar^2 (Z_0^2 e^4 / v^2) |F_{ss}|^2 ds (dq/q^2). \quad (4.30)$$

La cantidad $|F_{ss}|^2 ds$ depende sólo de la magnitud de la transferencia de momento q , y es adimensional.

-7 Empleando funciones de onda hidrogenoides, y las cantidades adimensionales

$$Z_0 e^2 / 2a_0 = Z_0^2 R \quad (4.31)$$

que es la energía hidrogenoide de ionización, y en la que

$$a_0 = a_0 / Z_0 = 1 / Z_0 a_0^2 \quad (4.32)$$

es el radio de Bohr de la capa K del blanco. La transferencia de momento se escribe:

$$Q = a_0^2 R_0^2 \quad (4.33)$$

y el momento final del electrón expulsado es h/a_0 (h es evidentemente adimensional). Para la transferencia de energía se tiene:

$$d = W Z_0^2 R_0 \quad (4.34)$$

mientras que para la energía del proyectil se usa la ec. (4.8) sin apantallamiento. Con la definición $|F_{V_0}(Q)|^2 dW = |F_{V_0}(Q)|^2 dQ$, se puede escribir:

$$d\sigma = (8\pi Z_0^2 / \eta^2) |F_{V_0}(Q)|^2 dW (dQ/Q^2) a_0^2 \quad (4.35)$$

A continuación debe integrarse la ec. (4.35) sobre Q . Los límites de integración se encuentran a partir de la conservación de la energía y del momento. La ec. (4.27) nos indica:

$$Q_{\min} = K_1 - K_2 = (2ME)^{1/2} - [2M(E-e)]^{1/2} \quad (4.36)$$

y además:

$$Q_{\max} = K_1 + K_2 = (2ME)^{1/2} + [2M(E-e)]^{1/2} \quad (4.37)$$

De este último resultado se desprende que la sección eficaz para transferencia de energía en la ionización de capas internas por partículas pesadas puede escribirse así:

$$d\sigma = 8\pi (Z_0/Z_1)^2 (a_0^2/\eta) I_0(\eta, W) dW \quad (4.38)$$

donde la función de excitación $I_0(\eta, W)$ se define por:

$$I_0(\eta, W) = \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} |F_{V_0}(Q)|^2 (dQ/Q^2) \quad (4.39)$$

Al pensar en la ecuación de onda para un átomo hidrogenoide, cuya energía potencial es $Z_0 e^2/r$, es fácil notar que $|F_{V_0}(Q)|^2$ y, por tanto, $I_0(\eta, W)$, no dependen explícitamente de Z_0 . Esto lleva a una conclusión de suma importancia: la cantidad $d\sigma(Z_0/Z_1)^2/a_0^2$ es una función universal de los parámetros de energía η y W . Cualquier desviación del experimento con la teoría, como se verá más

adelante, mostraría lo inapropiado de este desarrollo, en cualquiera de sus hipótesis (funciones de onda hidrogenoides, descripción con un solo electrón, o la misma FWBA).

La sección eficaz total de ionización se obtiene al integrar la ec. (4.39) sobre la transferencia de energía W , desde su valor mínimo, el cual debe ser la energía de ligadura del electrón, hasta el máximo valor. El límite inferior se ve afectado por el apantallamiento del resto de los electrones. De esta manera, la energía mínima está dada por:

$$W_{\min} = e/a_0^2 \quad (4.40)$$

para una capa de número cuántico principal s . Con esto, la sección total es, finalmente:

$$\sigma_s = 8\pi (Z_0/Z_1)^2 (1/\eta) \int_{e/a_0^2}^{W_{\max}} I_0(\eta, W) dW a_0^2 \quad (4.41)$$

A energías bajas, de las ecs. (4.39) y (4.41) puede demostrarse que la sección eficaz sigue la ley de escalamiento:

$$\sigma_s (Z_0/Z_1)^2 (e/a_0^2) = f(\eta, e/a_0^2) \quad (4.42)$$

la cual muestra nuevamente universalidad.

Se han calculado las funciones $|F_{V_0}(Q)|^2$ para transiciones de las capas K, L y M, al continuo, por Bethe [a1], Choi et al. [a2, a3], y Walske [a4]. Estas funciones pueden verse en el apéndice 1.

Lo anterior permite evaluar numéricamente las secciones eficaces. Esto ha sido efectuado por Khandelwal et al. [a2, a3] (quienes emplean $Q_{\min} = v^2/4\eta$, $Q_{\max} = e$, $v_{\max} = e$), Senka y Kropf [a4] (utilizando límites de integración exactos), y Johnson et al. [a5] (para ionización de capas M). En las figuras 4.1, 4.2 y 4.3 pueden observarse las secciones así calculadas para capas K y L [a2]. Es posible demostrar, además, que a bajas energías la sección eficaz se comporta como:

$$\frac{d\sigma}{dW} = (Z_0/Z_1)^2 (1/\eta) \int_{v^2/4\eta}^e (dQ/Q^{1+\epsilon}) a_0^2 = (Z_0/Z_1)^2 (\eta^{1+\epsilon}/W^{1+\epsilon}) a_0^2 \quad (4.43)$$

con l el número cuántico de momento angular. Esta ecuación muestra

universalidad, y crece rápidamente con la energía del proyectil.

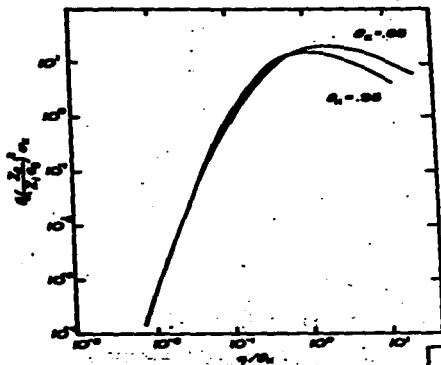
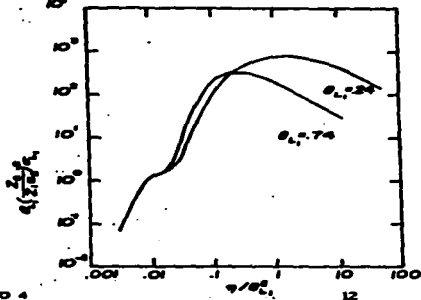


Fig. 4.1 Sección eficaz de ionización de capa K en la Aproximación de Born de Ondas Planas, como función de la energía de incidencia del proyectil, para dos valores del parámetro θ_{L_1} .

Fig. 4.2. Sección eficaz de ionización de la subcapa L, en la aproximación de onda plana de Born, como función de la energía de incidencia del proyectil para dos valores del parámetro θ_{L_1} .



CAPITULO 4

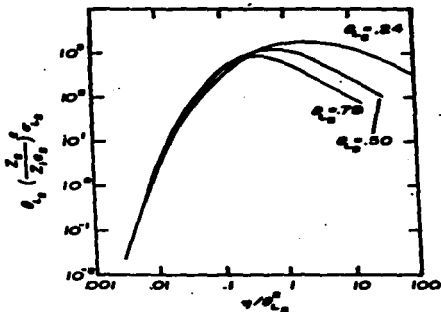


Fig. 4.3. Sección eficaz de ionización para la subcapa L, en la Aproximación de Ondas Planas de Born, como función de la energía de incidencia del proyectil, para tres valores del parámetro θ_{L_1} .

4.3 LA APROXIMACION SEMICLASICA (SCA)

Si la descripción del proceso de ionización por proyectiles pesados se efectúa en un sistema de referencia fijo en el átomo blanco, lo cual es comúnmente el caso, la interacción coulombiana entre dicho proyectil, y el electrón activo puede tratarse como una perturbación dependiente del tiempo, en el átomo blanco.

En este contexto, la posición relativa del núcleo del proyectil con respecto al núcleo atómico $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$, especifica el movimiento de este sistema. Es una función vectorial del tiempo. La teoría de perturbaciones dependientes del tiempo da una forma bien conocida para la amplitud de transición de un estado n a otro n' , no perturbados, debido a la perturbación coulombiana

$$V(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -Z_1 e^2 / |\mathbf{R}(t) - \mathbf{r}|. \quad (4.44)$$

La amplitud de transición es:

$$T_{n'n}^{SCA} = iZ_0 e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{|R(t)-r|} |n\rangle \exp[i(E_n^{(0)} - E_n^{(0)})t] dt \quad (4.45)$$

La sección eficaz de interés ha de obtenerse al sumar la probabilidad de transición sobre todas las trayectorias posibles.

Con la transformada de Fourier del potencial coulombiano:

$$1/|R-r| = (1/2\pi^2) \int \exp[iq \cdot (r-R)]/q^2 d^3q \quad (4.46)$$

se convierte la ec. (4.45) en:

$$T_{n'n}^{SCA} = i(Z_0 e^2/2\pi^2) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp[i(E_n^{(0)} - E_n^{(0)})t] \\ = \int F_{nn}(q) \exp[-i(q \cdot R(t))/q^2] d^3q. \quad (4.47)$$

Expresión conocida como la Aproximación Semiclásica (SCA), a la amplitud de transición, y, como puede observarse, es sumamente simple. La cantidad $F_{nn}(q)$ es el factor de forma de la ec. (4.26), pero aquí aparece como función de la variable de la transformada de Fourier, q .

Este factor puede interpretarse con base en la aproximación súbita de la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. Cuando se transfiere un momento q , impulsivamente, a un átomo en el estado n , la amplitud de transición al estado n' es el elemento de matriz del operador $\exp(-i \int V(t') dt')$, donde la interacción impulsiva es $V(t') = -r \cdot q \delta(t-t')$, lo cual sugiere que la cantidad q sea considerada como una transferencia de momento.

A continuación, la integral correspondiente a una transferencia de energía $\epsilon = E_n^{(0)} - E_n^{(0)}$ debe ser evaluada. Dicha integral es:

$$I(\epsilon, q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[i\epsilon t - i q \cdot R(t)] dt. \quad (4.48)$$

El movimiento más simple es una trayectoria rectilínea, en la que no se toman en cuenta ni la dispersión elástica ni la pérdida de energía del proyectil. Tomando, como de costumbre, un sistema de referencia con origen en el núcleo blanco, y cuyo plano $Y-Z$ contiene a la trayectoria, esta puede escribirse:

$$R(t) = b_j + v t k \approx b + v t k. \quad (4.49)$$

donde se ha tomado $t=0$ como el instante de máximo acercamiento del proyectil. Así, la ec. (4.48) se transforma a:

$$I(\epsilon, q) = 2\pi \exp(-i q \cdot b) \delta(\epsilon - q \cdot v). \quad (4.50)$$

expresión que indica la conservación de la componente longitudinal de q (q_{\parallel}), para una transición con transferencia de energía ϵ . La transferencia total de momento debe ser mayor que esta cantidad límite:

$$q = (q_{\perp}^2 + q_{\parallel}^2)^{1/2} = (q_{\perp}^2 + \epsilon^2/v^2)^{1/2} \geq \epsilon/v \equiv q_0. \quad (4.51)$$

$-P_{q_0}$ será denominada en adelante la mínima transferencia de momento.

El resultado anterior es válido si no hay grandes contribuciones por parámetros de impacto pequeños que requieran la consideración de la deflexión coulombiana, y el cambio en la velocidad del proyectil por la energía perdida en la transición electrónica es pequeño. Estas condiciones son equivalentes a las que se dan en la PVBA. Además, las ecs. (4.46) y (4.47) dan mayor peso a las transferencias de momento pequeñas. Así, el movimiento con $q_0 \ll K_0$ domina en la amplitud de transición, señalando esta condición una deflexión imperceptible.

Al sustituir la ec. (4.50) en la ec. (4.47), se da el resultado:

$$T_{n'n}^{SCA} = i(Z_0 e^2/v^2) \int F_{nn}(q_{\perp}, \epsilon/v) \exp(-i q_{\perp} \cdot b) / (q_{\perp}^2 + (\epsilon/v)^2) d^2 q_{\perp} \quad (4.52)$$

Con el uso de coordenadas polares en el plano transversal, y la expresión explícita del factor de forma, la ec. (4.52) se reduce a:

$$T_{n'n}^{SCA} = \frac{iZ_0 e^2}{v^2} \left\langle n \left| \int \frac{\exp[iq_{\perp} \cdot (r-b)]}{q_{\perp}^2 + (\epsilon/v)^2} q_{\perp} dq_{\perp} d\phi e^{i\epsilon r/vs} \right| n \right\rangle \\ = \frac{2iZ_0 e^2}{v} \left\langle n \left| \int_0^{\infty} \frac{J_0(\xi q_{\perp})}{q_{\perp}^2 + (\epsilon/v)^2} q_{\perp} dq_{\perp} e^{i\epsilon r/vs} \right| n \right\rangle. \quad (4.53)$$

ecuación en la que $\xi = [x^2 + (y-b)^2]^{1/2}$, y $J_0(\xi q_{\perp})$ es la función de Bessel cilíndrica. ξ es la distancia entre el electrón y la trayectoria del proyectil. A continuación se calcula la integral

sobre db_{\perp} y el resultado es:

$$T_{n'n}^{SEA}(b) = (2iZ_1 e^2 / v) \langle n' | K_0(Z_1 s/v) e^{iZ_1 s/v} | n \rangle \quad (4.54)$$

donde K_0 es una función de Bessel modificada. Se ha indicado explícitamente la dependencia con el parámetro de impacto. Puede verse que la ec. (4.54) es de una simplicidad extraordinaria.

Dado que $T_{n'n}^{SEA}(b)$ es la probabilidad de transición para el parámetro de impacto b , la sección eficaz para la colisión inelástica a primer orden dentro de la teoría de perturbaciones se obtiene de

$$\sigma_{n'n} = 2\pi \int_0^{\infty} |T_{n'n}^{SEA}(b)|^2 b db. \quad (4.55)$$

La evaluación de los elementos de matriz en la ec. (4.54) es muy compleja desde el punto de vista matemático. Sin embargo, Hansteen y sus colaboradores [58, 69, 70], obtuvieron resultados por medio de funciones de onda hidrogenoides para los estados inicial y final del electrón.

Otra forma de evaluar la sección eficaz (4.55) se puede efectuar directamente de la expresión (4.52), con la aplicación del teorema de Parseval a la transformada de Fourier bidimensional

$$\begin{aligned} \sigma_{n'n} &= \int |T_{n'n}(b)|^2 b db \\ &= (4Z_1^2 e^4 / v^2) \int |F_{n'n}(q_{\perp}, s/v)|^2 d^2 q_{\perp} / |q_{\perp}^2 + (s/v)^2|^2. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Sumando sobre los electrones en las subcapas inicialmente llenas, como en la sec. 4.2, e integrando sobre el área en el espacio q transversal, con coordenadas polares, la sección eficaz para una transferencia de energía ϵ es:

$$\sigma_{\epsilon\epsilon} = 16\pi(Z_1^2 e^4 / v^2) \int_0^{\infty} |F_{\epsilon\epsilon}(q)|^2 (dq/q^3) dq. \quad (4.57)$$

que no es sino la ec. (4.30). Así pues, se demuestra que la SCA y la PWBA son completamente equivalentes, pero solo para secciones eficaces inelásticas totales.

4.4 LIMITACIONES DE LA PWBA

En las secciones 4.2 y 4.3 se obtuvieron expresiones para el cálculo de secciones eficaces de ionización por medio de las aproximaciones de onda plana de Born y semiclásica, y se demostró que ambas aproximaciones resultan equivalentes. Este hecho no es sorprendente, ya que en la PWBA se consideran los estados inicial y final del proyectil como ondas planas, que corresponden a las trayectorias rectilíneas de la aproximación semiclásica.

Como se explicó en la sec. 4.1, se requieren tres condiciones para la validez de la PWBA. Estas son:

- (i) El proyectil actúa como una carga puntual;
- (ii) Los estados inicial y final de la partícula son ondas planas en todo el espacio;
- (iii) Los estados de los electrones del blanco son los de este sin perturbaciones.

El punto (i) es válido para $Z_1 \ll Z_2$ a velocidades pequeñas $v_1 \ll \frac{1}{2} \alpha_0 v_{20}$, como se dijo en la sección 4.1, y para velocidades grandes. Un criterio comúnmente utilizado para justificar el uso de la PWBA consiste en tener $v_1 \gg Z_1 v_0$, o, equivalentemente:

$$v_1 \gg (Z_1 / Z_2) v_{20} \quad (4.58)$$

relación que expresa también la condición de que la amplitud de la onda dispersada es muy pequeña comparada con la de la onda incidente. Así, se satisface la condición (i), pero no se ha tomado en cuenta la dispersión coulombiana por el núcleo. Coincide, además, con la condición para que el proyectil viaje libre de electrones.

Otra forma de que la condición (ii) se cumpla, es decir que la mitad de la distancia de máximo acercamiento del proyectil al núcleo sea pequeña comparada con la distancia óptica de penetración para que se efectúe el proceso de ionización:

$$d \approx \frac{1}{2} (2Z_1 e^2 / M v_1^2) \approx Z_1 (m_0 / M) (v_{20} / v_1)^2 a_{00} \ll a_{00}^{-1}. \quad (4.59)$$

o bien:

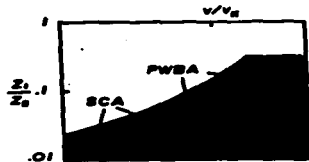


Fig. 4.4. Dependencia de Z_1/Z_2 para los esquemas de aproximación PWBA y SCA, como función de Z_1/Z_2 y velocidad de colisión v (en unidades de la velocidad del electrón en la capa K). Tomado de la referencia [80].

4.5 TEORÍA ECPSSR.

La teoría ECPSSR debida a Brandt y sus colaboradores [71-79], es una mejora sustancial a la PWBA y la SCA, que toma en cuenta efectos de pérdida de energía del proyectil en la colisión (E), la deflexión coulombiana de este (C), el aumento por la presencia del proyectil en la energía de ligadura del electrón expulsado, estudiada con la teoría de *Estados Estacionarios Perturbados* (PSS), y la descripción relativista del electrón activo (R). A continuación se describirá cada uno de estos procesos, y su influencia en el cálculo de la sección eficaz de ionización.

4.5.1 DEFLEXIÓN COULOMBIANA.

El tratamiento semiclásico original de Bang y Hansteen [58], incluye también un análisis basado en la suposición de que la partícula se mueve en trayectorias hiperbólicas dentro del campo coulombiano debido al núcleo. Este análisis da como resultado para la sección eficaz diferencial:

$$\left(\frac{d\sigma}{dE_f}\right)^C = e^{-\alpha} d\alpha \left(\frac{d\sigma}{dE_f}\right)^{BL} \quad (4.62)$$

en donde $(d\sigma/dE_f)^{BL}$ es la sección de ionización para una trayectoria rectilínea, para una energía final E_f (equivalente a

la PWBA). La cantidad $d = Z_1 Z_2 e^2 / E_1$ es la mitad de la distancia de máximo acercamiento, en una colisión frontal. Además, $R_0 \approx (R_{00} + E_1)/v_1$ es la transferencia de momento al electrón, cuya energía final es E_f .

Con ayuda de la ec. (4.43), es posible demostrar que, para velocidades pequeñas (esto es, $Z_1 < 1$), se tiene para la sección eficaz de una trayectoria rectilínea [80]:

$$\left(\frac{d\sigma}{dE_f}\right)^{BL} = \begin{cases} \alpha^{-10} & s = K, L_1 \\ \alpha^{-12} & s = L_2, L_3 \end{cases} \quad (4.63)$$

de lo cual se sigue:

$$\sigma_{K,L_1}^C = 9E_{10} (R_0 d \alpha_{K,L_1}) \sigma_{K,L_1}^{PWBA} \quad (4.64)$$

$$\sigma_{L_2,L_3}^C = 11E_{10} (R_0 d \alpha_{L_2,L_3}) \sigma_{L_2,L_3}^{PWBA} \quad (4.65)$$

ecuación en la que:

$$\alpha_{s} = \frac{2(1 - \beta_{10} / v_1)}{1 + (1 - \beta_{10} / v_1)^2} \approx \frac{1 - \beta_{10}}{v_1} \quad (4.66)$$

es la mínima transferencia de momento, y

$$E_n(x) = \int_1^\infty t^{-n} e^{-xt} dt \quad (4.67)$$

representa la integral exponencial de orden n .

Por otro lado, el argumento de la integral exponencial se puede escribir en la forma:

$$R_0 d \alpha_s = (\pi/2) Z_1 (m_0/M) \alpha_s^{-2} (\eta_s / \theta_s^2)^{-2/3} \quad (4.68)$$

Las expresiones (4.64) y (4.65) pueden usarse para incorporar los efectos de la repulsión coulombiana núcleo-proyectil. Este procedimiento tiene límites correctos; con velocidades altas, tales que la deflexión coulombiana no influye, $C_n = 12E_{10} (R_0 d \alpha_s)^{-1}$, lo cual lleva de nuevo a σ_s^{PWBA} , mientras que para velocidades pequeñas se tienen las ecuaciones (4.64) y (4.65), con σ_s^{PWBA} dada por [80]:

$$\sigma_s^{PWBA}(Z_1, \theta_s) = (\sigma_{00} / \theta_s) F_{00}(Z_1, \theta_s) \quad (4.69)$$

donde

$$F_{eK}(Z_K) = (2^{10}/45)Z_K^{10}. \quad (4.70)$$

$$F_{eL_1}(Z_{L_1}) = (2^{18}/45)Z_{L_1}^{18}. \quad (4.71)$$

$$F_{eL_2}(Z_{L_2}) = (2^{15}/11)Z_{L_2}^{15}. \quad (4.72)$$

Estas expresiones son válidas si $Z_K < 1$, o $Z_{L_1} < 0.1$.

4.5.2 EFECTO DE LIGADURA.

Cuando el proyectil tiene una velocidad tal que $Z_K \ll 1$, la ionización se produce solo si hay una penetración grande dentro de la capa atómica en la que se halla el electrón a expulsar, es decir, que lleva un parámetro de impacto $b_0^{-1} = v_1/\omega_{e0} \ll r_{e0}$. En este caso, el tiempo que tarda el proyectil en cruzar el radio r_{e0} , que es del orden r_{e0}/v_1 , es largo comparado con el tiempo de respuesta del electrón, ω_{e0}^{-1} . La respuesta de este electrón consistirá entonces en "sentir" una mayor energía de ligadura, por la presencia del núcleo del proyectil. Este efecto, desde luego, reduce la sección eficaz de ionización.

La influencia del proyectil sobre el estado inicial del electrón se puede tomar en cuenta dentro del marco de la Teoría de Estados Estacionarios Perturbados (PSS) [81], la cual considera a los estados iniciales de los electrones del blanco como una superposición de estados de la molécula proyectil-blanco. En este contexto, se tiene, para sistemas con $Z_K \ll Z_A$, que el resultado neto sobre el electrón es un aumento en la energía de ligadura, como se dijo en el párrafo previo.

La aplicación de la teoría PSS lleva, pues a modificar la constante del blanco σ_0 , que aparece en la expresión para la sección eficaz en la FWBA, en la forma [71, 74, 75]:

$$\sigma_0^* = [1 + (2I_1/\sigma_0 Z_{K1})g_1(Z_K)]\sigma_0. \quad (4.73)$$

conce

$$g_1(Z_K) = (1+Z_K)^{-2}(1.5Z_K^2 + 7.14Z_K^3 + 4.27Z_K^4 + 0.947Z_K^5). \quad (4.74)$$

$$g_2(Z_K) = (1+Z_K)^{-2}(1+9Z_K + 30.2Z_K^2 + 22.8Z_K^3 + 100Z_K^4 + 94.1Z_K^5 + 51.3Z_K^6 + 15.2Z_K^7 + 1.891Z_K^8). \quad (4.75)$$

$$g_{L_1}(Z) = (1+Z)^{-2}(1+9Z + 30.7Z^2 + 73Z^3 + 105Z^4 + 29.9Z^5 + 45.7Z^6 + 12.8Z^7 + 1.549Z^8). \quad (4.76)$$

$$g_{L_2}(Z) = (1+Z)^{-2}(1+9Z + 34.7Z^2 + 81.2Z^3 + 112Z^4 + 93.5Z^5 + 46.6Z^6 + 12.9Z^7 + 1.549Z^8). \quad (4.77)$$

Estas funciones son aproximaciones a las exactas, y son correctas dentro del 1%.

Si se escribe la ec. (4.42) de la siguiente manera:

$$\sigma_K^{FWBA}(Z_K, \theta_0) = (\sigma_{e0}/\sigma_0)F_K(Z_K, \theta_0). \quad (4.78)$$

puede, finalmente, escribirse la sección eficaz de ionización como:

$$\sigma_K = (n_K - 1)E_{n_K}(\text{atq}_{e0} \sigma_0) \sigma_K^{FWBA}(Z_K/\epsilon_0, \epsilon_0 \theta_0), \quad (4.79)$$

donde $n_K = n_{L_1} = 10$, $n_{L_2} = n_{L_3} = 12$. Debe advertirse que se ha incluido la corrección por la deflexión coulombiana.

Es preciso advertir, por otro lado, que cuando la energía de incidencia es pequeña, esto es, $\eta_1/\sigma_0^* \ll 1$, en el caso de ionización de capa K, se tiene el resultado:

$$\frac{\sigma_K^{FWBA}}{\sigma_{e0} \sigma_0} = \frac{2.17}{45} \left[\frac{\eta_K}{\sigma_0^*} \right]^4 \quad (4.80)$$

Si se emplea esta ecuación en la expresión (4.79), al expandir en el límite en el cual $Z_K \rightarrow 0$, entonces

$$\begin{aligned} \sigma_K &= \sigma_K^{FWBA} \left[1 - \frac{2}{3} \text{atq}_{e0} - 18(I_1/I_2 \sigma_0^*)g(Z_K) + \phi(Z_K^2) \right] \\ &= Z_{L_1}^2 \sigma_0 - Z_{L_1}^2 \sigma_0^* - Z_{L_1}^2 \sigma_0^* + \phi(Z_K^2). \end{aligned} \quad (4.81)$$

Así pues, la deflexión coulombiana y la ligadura corresponden a los términos con coeficientes J_{12} y J_{08} en la aproximación de onda plana de Born de la ec. (4.4). Son términos sustractivos en la sección, es decir, la reducen.

4.5.3 CORRECCION RELATIVISTA.

En general, los electrones que son expulsados del átomo en el proceso de ionización son aquellos que presentan velocidades más altas dentro de la distribución de momentos de los estados ligados [82]. Si estas distribuciones se ven modificadas, como ocurriría

al considerar efectos relativistas para las funciones de onda del átomo blanco, la sección eficaz de ionización debe cambiar. La corrección relativista hace que el radio de Bohr se vea reducido, aumentando así la velocidad del electrón y, consecuentemente, la sección eficaz de ionización.

Varios esquemas han sido propuestos para incluir el efecto relativista, aunque ninguno es exacto. La teoría ECPSSR lo toma en cuenta análogamente a como añade el efecto de ligadura.

A velocidades pequeñas del proyectil, la sección de ionización es proporcional a la cuarta potencia de la transferencia máxima de energía al electrón de masa m [80]:

$$T_{max} = 2mv_0^2 = m\alpha_0 \omega_{ps}^2 r_0^2 \quad (4.82)$$

Aquí puede introducirse, mediante el teorema del virial, una masa relativista para un electrón en un potencial central de la forma Z_{ps}/r (en unidades atómicas, es decir, $m_0 = 1$, $e = 1$). Así:

$$m^R(r) = (1 + (Z_{ps}/2rc^2)^2)^{1/2} + Z_{ps}/2rc^2 \quad (4.83)$$

Escogiendo para r un valor medio del inverso de la distancia del núcleo al blanco, que estaría en función del parámetro de impacto, y procediendo a continuación sobre todos los parámetros de impacto con las funciones de peso de la ref. [3], se obtiene

$$m_{K,L}^R(\xi_0) \approx (1 + \beta/\alpha_0)^2)^{1/2} + \alpha_0 \quad (4.84)$$

ecuación en la que

$$\beta_{K,L} = \frac{0.40(Z_{ps}/c)^2}{\alpha_0^2 \xi_{K,L}} \quad (4.85)$$

$$\beta_{L_2,L_3} = \frac{0.15(Z_{ps}/c)^2}{\xi_{L_2,L_3}} \quad (4.86)$$

mientras que β es un parámetro que varía lentamente, del orden de 1.2 para el intervalo de interés en ξ_0 .

El cambio para el cálculo de la sección eficaz consiste, entonces, en transformar la variable ξ_0 en $[m_{K,L}^R(\xi_0)]^{1/2} \xi_0$, o bien pasar de η_0 a $m_{K,L}^R \eta_0$, de forma tal que:

$$\sigma_{K,L}^{PSSR} = \sigma_{K,L}^{PSSA} ([m_{K,L}^R(\xi_0)]^{1/2} \xi_0, \theta_0) \quad (4.87)$$

A pesar de que este resultado se obtuvo para velocidades bajas, es válido también para velocidades intermedias ($\xi_0 \sim 1$).

A velocidades tales que $\xi_0 \geq 1$, aparece dentro del estudio de la ionización por medio de la teoría PSS un nuevo efecto. En el intervalo de velocidades ya dicho, las mayores contribuciones a la sección de ionización directa de una capa S ocurren a distancias del proyectil mayores que el radio de esta capa. La partícula perturba los estados electrónicos del átomo blanco, dando como efecto neto una polarización de este último. Cuando los parámetros de impacto son mayores que un valor $\rho_0 \sim \alpha_{ps}$, estos efectos de polarización dan términos aditivos proporcionales a Z_{ps}^2 , lo cual resulta en valores más grandes para la sección eficaz de ionización [76].

La polarización puede tomarse en cuenta para el cálculo de la sección de ionización mediante un factor que multiplicará a σ_0 en la misma forma que el factor para el efecto de ligadura. Se encuentra que dicho término es [77]:

$$f_{K,L}(\xi_0, \theta_0; c_k) = 1 + (2Z_{ps}/Z_{ps}\theta_0) [g_{K,L}(\xi_0; c_k) - h_{K,L}(\xi_0; c_k)] \quad (4.88)$$

donde $c_k = \rho_0/\alpha_{ps}$ es una constante de corte del orden de uno ($c_K = c_{L_1} = 3/2$, $c_{L_2} = c_{L_3} = 5/4$). Además:

$$g_K(\xi_0; c_K = 1.5) = (1+\xi)^{-10} (1+9\xi+31\xi^2+98\xi^3+12\xi^4+25\xi^5 + 4.2\xi^6+0.515\xi^7) \quad (4.89)$$

$$g_{L_1}(\xi_0; c_{L_1} = 1.5) = (1+\xi)^{-10} (1+9\xi+31\xi^2+49\xi^3+162\xi^4 + 33\xi^5+16\xi^6+1.97\xi^7) \quad (4.90)$$

$$g_{L_2,L_3}(\xi_0; c_{L_2,L_3} = 1.25) = (1+\xi)^{-10} (1+10\xi+45\xi^2+102\xi^3 + 331\xi^4+0.7\xi^5+58\xi^6+7.8\xi^7+0.888\xi^8) \quad (4.91)$$

$$h_{K,L}(\xi_0; c_k) = (2n_s/\theta_0 \xi_0^2) (1/c_k \alpha_{ps}/\xi_0) \quad (4.92)$$

donde [7a]:

$$I(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} \pi \left[\ln \frac{1}{x} - 1 \right] & 0 \leq x \leq 0.035 \\ e^{-0.2x} (0.031 + 0.210x^{1/2} + 0.003x - 0.069x^{3/2} + 0.324x^2)^{-1} & 0.035 \leq x \leq 3.1 \\ 2e^{-0.2x} / x^{1.6} & 3.1 \leq x \leq 11 \end{cases} \quad (4.93)$$

Para valores de x mayores que 11, $I(x) = 0$. El término en la ec. (4.93) de σ_0 se debe al efecto de ligadura, mientras que el factor de A_0 tiene su origen en el de polarización.

Si esta corrección se introduce en la expresión relativista, se obtiene:

$$\sigma_0^R = [A_0^R (\zeta / C_0)]^{1/2} \sigma_0 \quad (4.94)$$

la cual es para la sección eficaz de ionización, tomando en cuenta también el efecto de repulsión coulombiana:

$$\sigma_0^{ECPSR} = C_0 (e q_0 C_0) \sigma_0^{PVSA} (\zeta_0^R / C_0, C_0 \theta_0) \quad (4.95)$$

El superíndice CPSSR indica que se han considerado los efectos de deflexión coulombiana, relativista, y los estados estacionarios perturbados.

4.5.4 PERDIDA DE ENERGIA.

En una colisión inelástica, el proyectil pierde una cantidad de energía:

$$E_i - E_f = (M/2)(v_i^2 - v_f^2) = (1/2M)(h_i^2 - h_f^2) \quad (4.96)$$

El cambio mínimo de momento es entonces:

$$q_{\min} = h_i - h_f = 2q_0 [1 + (1 - \Delta)^{1/2}]^{-1} \quad (4.97)$$

donde $\Delta = (E_i - E_f)/E_i$. Asimismo, para el cambio máximo:

$$q_{\max} = h_i + h_f = 2q_0 [1 - (1 - \Delta)^{1/2}]^{-1} \quad (4.98)$$

Cuando la pérdida de energía es ignorable ($\Delta = 0$), la mínima transferencia de momento está dada por la ec. (4.51). Normalmente, en la PMA se efectúan integraciones desde una $q_{\min} = q_0$ hasta una q_{\max} que puede ser exacta [6a], o bien $q_{\max} = \infty$ [6b]. Sin embargo, para colisiones lentas ($\zeta \ll 1$), la pérdida de energía relativa Δ

no puede despreciarse, principalmente porque en este intervalo de velocidades las secciones eficaces son proporcionales a potencias grandes de q .

Una forma práctica de considerar la pérdida de energía del proyectil dentro del cálculo de secciones eficaces de ionización, consiste en modificar el argumento de la función de deflexión coulombiana de la aproximación CPSSR, ec. (4.95), tal como lo sugieren Brandt y Lapicki [79]. El factor de deflexión coulombiana con pérdida de energía resulta:

$$C^E = C \left[\frac{2dq_0}{(1-\Delta)^{1/2} [1 + (1-\Delta)^{1/2}]} \right] \quad (4.99)$$

La modificación total para la sección eficaz en la teoría ECPSSR resulta entonces, incorporando la ec. (4.99) en la ec. (4.95):

$$\sigma_0^{ECPSR} = C_0 \left[\frac{2dq_0 C_0}{2_0 (1 + 2_0)} \right]^{1/2} (z_0) \sigma_0^{PVSA} (\zeta_0^R / C_0, C_0 \theta_0) \quad (4.100)$$

ecuación en la que

$$z_0^R = 1 - \zeta_0 A_0 = 1 - \frac{A_0}{\pi C_0 \theta_0} \left[\frac{C_0}{\zeta_0} \right]^2 \quad (4.101)$$

y

$$f_s(z) = 2^{-\nu} (\zeta - 1)^{-1} [(vz-1)(1+z)^\nu + (vz+1)(1-z)^\nu] \quad (4.102)$$

donde $\nu = 0$ para $s = K, L_1$, y $\nu = 1$ si $s = L_2, L_3$.

La figura 4.7 muestra una comparación de la sección eficaz de ionización calculada mediante la ec. (4.100), con datos experimentales. Esta figura muestra una concordancia entre teoría y experimento dentro de un 10%. Adicionalmente, en el apéndice 2 puede encontrarse un ejemplo del cálculo de sección eficaz de ionización aplicando esta aproximación.

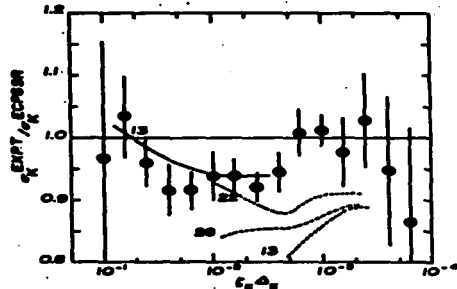


Fig. 4.7. Constantes de secciones eficaces de ionización de capa K experimentales y calculadas en la teoría ECPSB, como función de la pérdida de energía del proyectil, $(E_1 - E_2)$. Las curvas representan razones entre secciones calculadas con la PVSA, usando funciones de onda hidrogenoides y de Hartree-Slater. La curva continua proviene de la ref. [81], mientras que las discontinuas son de la ref. [77]. Los números al lado de las curvas representan el número atómico del elemento para el cual fueron calculadas [79].

4.6 APROXIMACION DE ENCUENTRO BINARIO (BEA)

La Aproximación de Encuentro Binario (BEA) es un modelo clásico para el proceso de ionización. El empleo de métodos clásicos en estas circunstancias está fundamentado en el hecho de que las secciones eficaces diferenciales en el sistema centro de masa, para la dispersión coulombiana, son idénticas tanto en la descripción clásica como en la cuántica.

La BEA supone que la interacción dominante para producir la ionización de una capa interna es un intercambio directo de

energía entre el proyectil y el electrón atómico a expulsar. De esta forma, se lleva a cabo una transformación clásica al sistema de laboratorio, con el fin de obtener una sección diferencial $d\sigma/d\Delta E$ para un intercambio de energía ΔE entre las dos partículas cargadas. Hecho esto, se integra sobre todos los posibles intercambios de energía, desde la energía de ligadura del electrón, hasta la energía del proyectil, promediando después sobre la distribución de velocidades del electrón. Además, puede considerarse una corrección para el efecto de la repulsión coulombiana del núcleo sobre el proyectil.

La sección eficaz, en el sistema de laboratorio, para el intercambio de energía ΔE entre el proyectil incidente, con velocidad v_1 , y un electrón con velocidad v_2 , que se promedia con una distribución de direcciones de v_2 de simetría esférica, está dada por Gerjuoy [83], y puede integrarse para dar [84]:

$$\int_{\Delta E}^{\infty} \frac{d\sigma}{d\Delta E} d\Delta E = \begin{cases} \frac{\pi(Z_1 e^2)^2}{3v_1^2 v_2} \left[-\frac{2v_1^2}{(\Delta E)^2} - \frac{(av_1/m_e)}{\Delta E} \right] & 0 < \Delta E < b \\ \frac{\pi(Z_1 e^2)^2}{3v_1^2 v_2} \left[3 \frac{(v_1/m) - (v_2/m) (v_1^2 - v_2^2) - (v_1^2 - v_2^2)^2}{(\Delta E)^2} \right] & b < \Delta E < a \\ \frac{\pi(Z_1 e^2)^2}{3v_1^2 v_2} \left[-\frac{2v_1^2}{(\Delta E)^2} \right] & \Delta E > a \text{ y } 2m_1 v_2 > (m_1 - m_2) v_1 \\ 0 & \Delta E > a \text{ y } 2m_1 v_2 < (m_1 - m_2) v_1 \end{cases} \quad (4.103)$$

donde

$$a = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \left[E_1 - E_2 + v_1 v_2 (m_1 - m_2)/2 \right], \quad (4.104)$$

$$b = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \left[E_1 - E_2 - v_1 v_2 (m_1 - m_2)/2 \right], \quad (4.105)$$

$$v_1 = (v_1^2 - 2\Delta E/m_1)^{1/2}, \quad (4.106)$$

$$v_2 = (v_2^2 + 2\Delta E/m_2)^{1/2}. \quad (4.107)$$

Para obtener la sección eficaz de reacción de un electrón con energía de ligadura u , con velocidad v_2 , se utiliza la ec. (4.103), con límites inferior y superior u y E_1 , respectivamente:

$$\sigma_i = \int_{u_0}^{E_0} \frac{d\sigma}{dE} dE. \quad (4.108)$$

A continuación, se procedía esta última expresión, con una distribución de velocidades del electrón ligado, y sumando sobre todos los electrones en la subcapa:

$$\sigma_i = N_i \int_0^{\infty} \sigma_i(v_0, v_0) f(v_0) dv_0. \quad (4.109)$$

donde N_i es el número de electrones en la subcapa, y $f(v_0)$ es la distribución de velocidades. Empleando un conjunto microcanónico, se encuentra una distribución de velocidades que coincide con el resultado cuántico, para un átomo hidrogenoide [84]:

$$f(v_0) = 32\pi^{-3} v_0^{-3} [v_0^2 / (v_0^2 + v_0^2)]^2. \quad (4.110)$$

teniendo $v_0 = (Ze^2/m)^{1/2}$.

La corrección por la deflexión coulombiana y la reducción de la energía cinética por la repulsión se incorporan al resultado final mediante la expresión:

$$\sigma_i(E_0) = \sigma_i(E_0') \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{2E_0'E_0}{E_0 \sigma(E_0')} \left[1 - \left(1 - \frac{\sigma(E_0')}{\pi} \right)^{1/2} \right] \right\}^{1/2} \right]^2. \quad (4.111)$$

donde $\sigma_i(E_0')$ es la sección eficaz (4.109) a una energía $E_0' = E_0 - (e^2/E)$.

El uso de las distribuciones hidrogenoides tiene una consecuencia importante [85]. La sección eficaz obedece una ley de escalamiento, que dice que el producto del cuadrado de la energía de ligadura y la sección eficaz, es una función universal de la energía de incidencia expresada en unidades de la energía de ligadura, es decir:

$$u^2 \sigma_i = Z_1^2 F(E_0/\lambda u, \lambda). \quad (4.112)$$

donde λ es la masa del proyectil expresada en unidades de masa electrónica. Así, una gráfica de $u^2 \sigma_i / Z_1^2$ vs. $E_0/\lambda u$ debería ser una misma curva para todos los átomos blancos. Esta función universal para la BEA es análoga a la función $f_0(\eta_0, \theta_0)$ de la FWBA, ec. (4.42). De hecho, lo que comúnmente se grafica es $Z_1^2 \sigma_i / Z_1^2$ vs. η_0 . Es posible notar que:

$$\theta_0^2 (Z_1^2 \sigma_i / Z_1^2) = u^2 \sigma_i / Z_1^2. \quad (4.113)$$

CAPÍTULO 4

30

$$\eta_0 \theta_0 = (m_0/m_1)(E/u_0) = E/\lambda u_0. \quad (4.114)$$

Es factible relacionar la BEA con la FWBA, partiendo de la ec. (4.29). Si el electrón es emitido del átomo con energía cinética grande, se puede aproximar el estado final por una onda plana de momento k . La sección eficaz diferencial para ionización a un intervalo de momentos k y $k + dk$, y una transferencia de momento q , es:

$$d\sigma = 4\pi^2 (e^2/v)^2 |\theta_0(k-q)|^2 (dq/q^2) d\phi^2 d\Omega_0. \quad (4.115)$$

θ_0 es la función de onda en espacio de momentos. Al sumar sobre todos los subestados de una subcapa, se reemplaza $|\theta_0(k-q)|^2$ por la distribución de probabilidad de la magnitud del momento en la subcapa. Con valores fijos de ϕ y λ se tiene que la sección diferencial sólo es función del ángulo entre k y q . Con la cantidad $p = k - q$, se obtiene, después de integrar sobre las direcciones relativas de k respecto a q :

$$d\sigma = 8\pi Z_1^2 (e^2/v)^2 |\theta_0(p)|^2 \text{ por } k \text{ por } dk (dq/q^2) d\phi. \quad (4.116)$$

Recordando que $f(v_0)$ es la distribución de probabilidad de la velocidad del electrón en el estado atómico inicial, se tiene:

$$f(v_0) = (4\pi/m) |\theta_0(p)|^2 p^2. \quad (4.117)$$

y se llega finalmente a:

$$d\sigma = 4\pi Z_1^2 (e^2/v)^2 f(v_0) (dv_0/v_0^2) dE (dq/q^2). \quad (4.118)$$

Con el uso de la sección eficaz diferencial de Rutherford:

$$(d\sigma/d\Omega)_{\text{Ruth}} = 4\pi Z_1^2 e^4/q^4. \quad (4.119)$$

se puede escribir:

$$d\sigma = (\pi/m^2 v^2) dE dq [f(v_0)/v_0] dv_0 (d\sigma/d\Omega)_{\text{Ruth}}. \quad (4.120)$$

resultado que sugiere de inmediato el uso de un modelo para la ionización consistente en una colisión binaria, de Rutherford, entre el proyectil y el electrón, modelo que es justamente la BEA, como ya se ha explicado.

Cuando el proyectil es lento, es de suponer que la ligadura atómica no pueda ignorarse. En este caso, aproximar el estado final coulombiano por una onda plana es incorrecto. Sin embargo, a

CAPÍTULO 4

31

velocidades grandes, hay una cierta coincidencia con la PWBA, debido a que la BEA es una aproximación de impulso.

La BEA es inadecuada para predecir la sección eficaz de ionización de subcapas, además de que, por ser clásica, no se puede aplicar en regiones en las que los efectos cuánticos son importantes, como es el caso de velocidades bajas del proyectil.

5

**LA SECCION
EFICAZ DE
IONIZACION EN
LA MEDICION DE
ESPESORES**

Una vez descritas las teorías existentes para el cálculo de la sección eficaz de ionización, es forzoso averiguar cuál de todas ellas es la más apropiada para su utilización en PIXE a bajas energías. Esto debe hacerse de dos maneras: la primera consiste en la comparación de las predicciones de cada modelo con los resultados experimentales para la sección eficaz de ionización; y la segunda se basa en la manera que cada forma de cálculo afecta la adición de espesores. Esta evaluación se efectuará en el presente capítulo.

5.1 VALIDEZ DE LAS EXPRESIONES PARA EL CÁLCULO DE LA SECCIÓN EFICAZ DE IONIZACIÓN.

Como se explicó en el capítulo 4, existen cuatro teorías importantes para el cálculo de la sección eficaz de ionización:

- 1.- Aproximación de Onda Plana de Born (PWBA);
- 2.- Aproximación Semiclásica (SCA);
- 3.- Aproximación de Encuentro Binario (BEA);
- 4.- PWBA con corrección por pérdida de Energía, deflexión Coulombiana, efectos Relativistas, y Perturbación de Estados Estacionarios (ECPSR).

La validez de cada uno de estos modelos desde el punto de vista teórico, además, ya fue discutida en el capítulo correspondiente. Solo resta, entonces, estudiarla en su aspecto de concordancia con el experimento. Para realizar esta labor, es necesario señalar que, aparte de las cuatro teorías arriba mencionadas, existen expresiones obtenidas a partir de los valores experimentales existentes.

Entre estos ajustes sobresalen, por la gran aplicación que han tenido, los polinomios obtenidos por Johansson y Johansson [28], quienes se basan en el escalamiento de la BEA para la sección eficaz de ionización, y de esta manera el resultado es una curva universal para la sección de ionización de capas K, y otra para capas L (figura 5.1). Debe notarse que en este último caso se trata de la sección total de la capa L, y no de las subcapas L_1 , L_2 y L_3 . Además, los proyectiles son protones.

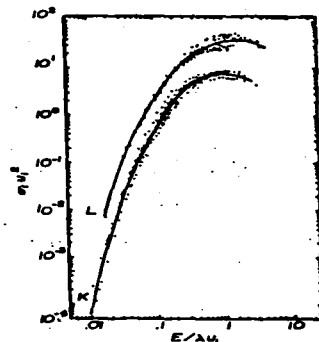


Fig. 5.1. Sección Eficaz de Ionización de acuerdo al escalamiento de la BEA. Se muestran los datos experimentales usados por Johansson y Johansson [28], para obtener los polinomios que aquí se muestran.

La forma de estos polinomios es la siguiente:

$$\ln(I_0 I) = \sum_{n=0}^3 b_n x^n \quad (5.1)$$

donde $x = \ln(CE/\lambda u)$, u es la energía de ionización en eV, E es la energía de incidencia del protón, y λ es el cociente de la masa del protón a la del electrón. Los coeficientes b_n son:

$$b_0 = 2.0471; \quad b_1 = -6.590 \times 10^{-2}; \quad b_2 = -0.47448; \\ b_3 = .09919; \quad b_4 = .046063; \quad b_5 = 6.0853 \times 10^{-3}.$$

Para la sección de ionización de capa K, mientras que para capa L son:

$$b_0 = 3.6082; \quad b_1 = 0.37123; \quad b_2 = -0.36971; \\ b_3 = -7.8593 \times 10^{-2}; \quad b_4 = 2.5063 \times 10^{-2}; \quad b_5 = 1.2613 \times 10^{-3}.$$

La energía de ionización u_L se define como:

$$u_L = \frac{1}{2} (u_{L_1} + u_{L_2} + u_{L_3}) \quad (5.2)$$

Además de esta expresión semiempírica, existen ajustes polinomiales de un cierto grado a los datos experimentales. Un ejemplo es el de Khan y Karimí [86]. Ellos ajustan polinomios de la forma:

$$\ln \sigma_{\text{e}} = \sum_{i=0}^n b_i (\ln E)^i \quad (5.3)$$

ecuación en la que σ_{e} es la sección eficaz en barns ($1 \text{ barn} = 10^{-28} \text{ cm}^2$), y E es la energía del protón en MeV. Los coeficientes b_i se presentan en una tabla de la ref. [86]. Es indispensable aclarar que para cada elemento se tiene un polinomio, y que solo se refieren a capas K.

Para el cálculo de las secciones de acuerdo a cada uno de los modelos teóricos existen tablas. Aun más, para la BEA, como se obtiene una curva universal. Reuter et al. [55] han presentado un ajuste polinomial a los valores obtenidos por García et al. [87]. El polinomio es:

$$\log_{10} \left[\frac{U_{\text{e}}^2 \sigma_{\text{e}}}{Z_1^2} \right] = \sum_{n=0}^7 \left[\log_{10} \frac{E}{\Lambda U_{\text{e}}} \right]^n A_n \quad (5.4)$$

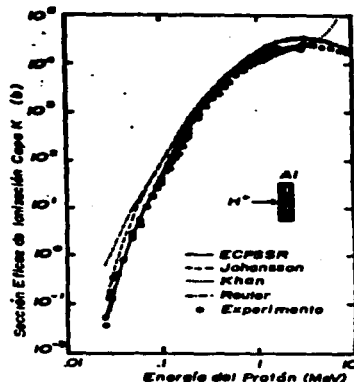
donde, Z_1 es la carga del proyectil, U_{e} es la energía de ionización en keV, E es la energía del proyectil en keV, y σ_{e} es la sección de ionización de capa K en cm^2 . Los coeficientes A_n son:

$$A_0 = -19.04; A_1 = 0.03028; A_2 = -1.11; A_3 = 0.3771; \\ A_4 = 0.1923; A_5 = -0.07459; A_6 = -0.05084; A_7 = -0.005949.$$

No existe una expresión semejante para ionización de capas L. Para la BEA se han publicado las tablas de Hansteen et al. [88], mientras que para la teoría ECPSSR se dispone de las tablas de Condon y Harrison [89]. Como ya se dijo en el capítulo 4, para la PMBA existen las tablas de Benka y Kroef [66]. Sin embargo, puesto que ya se hizo ver que la PMBA no reproduce fidedignamente los resultados experimentales, no se hará una mayor discusión sobre ella, aunque es preciso apuntar que sigue siendo fundamental para el cálculo de la sección de acuerdo a la teoría ECPSSR.

En primer lugar, se hará la comparación entre las expresiones y datos experimentales para ionización de capa K. Como ejemplo

Fig. 5.2. Comparación entre diversas formas de cálculo de la sección eficaz de ionización por protones en la capa K de aluminio. Los círculos muestran resultados experimentales.



inicial, se utilizará el aluminio. En la fig. 5.2 pueden observarse las curvas para ECPSSR, BEA (Reuter), Johansson y Khan. De dicha figura se concluye que para un intervalo de energías 0.1-1.0 MeV, todos los modelos se aproximan a los datos experimentales. Sin embargo, fuera de él hay variaciones importantes para dos de ellos. A energías bajas, la expresión de Reuter predice secciones que son mayores que las experimentales por un orden de magnitud. En cambio, a energías superiores a aquella en la cual se presenta el máximo, la curva de Khan presenta un comportamiento totalmente anormal. La causa es que estas energías quedan fuera del intervalo de validez del polinomio ajustado por Khan y Karimí. En cuanto a las curvas de Johansson y ECPSSR, se tiene que en todo el intervalo mostrado caen dentro del error experimental de los datos graficados.

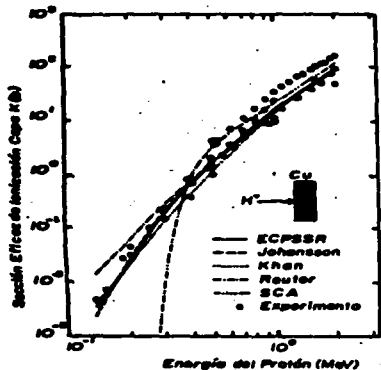


Fig. 5.3. Comparación entre diversas formas de cálculo de la sección eficaz de ionización de capa K de cobre por protones. Los círculos representan resultados experimentales.

La fig. 5.3 muestra los cálculos hechos para cobre. Además de los modelos ejemplificados en el aluminio, aparecen los resultados obtenidos con la SCA. Claramente se advierte para este modelo un comportamiento anómalo en la región de bajas energías, aunque en la de energías próximas a 1 MeV se ajusta bien a los datos experimentales.

De nueva cuenta, la curva Reuter da secciones mayores que los datos experimentales, por otra parte, tanto las curvas de Johansson, como la de Khan y la de ECPSSR reproducen los resultados experimentales con buena exactitud, aunque a energías bajas Johansson parece desviarse. No obstante, el bajo número de datos experimentales no permite extraer una conclusión definitiva.

Finalmente, en la fig. 5.4 se presenta la comparación de Reuter, Khan, Johansson y ECPSSR con los datos experimentales, a

energías comprendidas entre .1 y .7 MeV, para plata. Nuevamente, se encuentra que Reuter predice secciones mucho más altas en la región de energías más bajas. Un efecto semejante ocurre con la curva de Khan, aunque no es tan pronunciado.

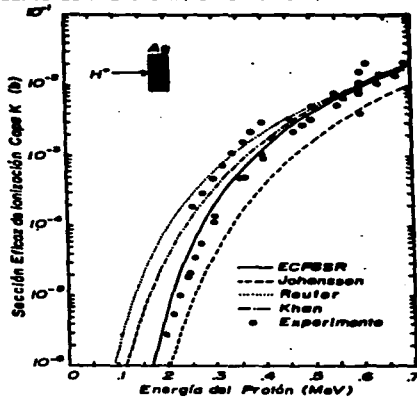


Fig. 5.4. Secciones Eficaces de ionización de la capa K de plata de acuerdo a varias expresiones para su cálculo. Se muestran además datos experimentales.

Es de notar, asimismo, que la curva de Johansson cae sistemáticamente por debajo de los puntos experimentales. Esto podría, en principio, explicarse porque para la plata las energías mostradas están fuera del intervalo de validez de la curva universal de Johansson (fig. 5.1). Por último, resta la curva obtenida con ECPSSR. Como puede verse en la fig. 5.4, es la que sigue más de cerca el comportamiento de los puntos experimentales, y aunque no está representado en la figura, queda dentro del error experimental.

Una vez señalados los resultados para la capa K, puede hablarse de la capa L y sus tres subcapas. Como ya se dijo en el capítulo anterior, la cantidad que finalmente se utiliza en PIXE es la sección eficaz de producción de rayos X. Como se puede ver en la ec. (4.3), para pasar de la sección de ionización a la de producción de rayos X sólo se requiere de un factor. Sin embargo, para las líneas L el problema es diferente. Se puede usar la línea L_{α} como ejemplo. De la ec. (4.4) se tiene para la sección eficaz de producción de rayos X L_{α} :

$$\sigma_{PI, L_{\alpha}} = \left(\sigma_{L_{\alpha}}^{I, 1} + \sigma_{L_{\alpha}}^{I, 2} + \sigma_{L_{\alpha}}^{I, 3} + \sigma_{L_{\alpha}}^{I, 4} \right) \omega_{L_{\alpha}} F_{\alpha} \quad (5.5)$$

Todas las cantidades fueron definidas previamente. El cálculo de la $\sigma_{PI, L_{\alpha}}$ requiere, como ya se explicó, de un conocimiento de las secciones de ionización de cada subcapa, por separado. De aquí que una expresión como la de Johansson en principio es inaplicable al cálculo de la sección de producción de rayos X. No obstante, como también ya fue discutido, se le puede dar vuelta al problema, definiendo una fluorescencia promedio $\bar{\omega}_L$ y una intensidad relativa F_{α} , para poder escribir:

$$\sigma_{PI, L_{\alpha}} = \sigma_{L_{\alpha}}^{I, T} \bar{\omega}_L F_{\alpha} \quad (5.6)$$

Aquí, $\sigma_{L_{\alpha}}^{I, T}$ es la sección de ionización total. El obstáculo principal a esta fórmula es que la intensidad relativa F_{α} no es una constante, como lo es en el caso de las líneas K. En la fig. 5.5 puede apreciarse que dicha cantidad es una función de la ener-

gía de incidencia del proyectil. Los datos para esta figura fueron obtenidos por Cohen y Harrigan [90].

De aquí, lo deseable es que se pudiesen tener expresiones para las secciones de ionización de cada subcapa. Por otra parte, existen limitaciones en cuanto a la cantidad de expresiones disponibles para el cálculo de secciones de ionización de capas L, totales o por subcapa. Las únicas a las que se tiene acceso es a la ECPSSR (que sí permite obtener secciones por subcapa), y la de Johansson.

Por lo anterior, se busca ampliar las opciones. Para ello, se sugiere un ajuste a datos experimentales, en la forma presentada por Khan y Karimi. También, debido a que los límites de validez del polinomio de Johansson no son muy amplios, se aconseja un nuevo ajuste a un mayor número de datos experimentales.

Si siguiendo esta línea, se ajusta un polinomio de segundo grado a secciones experimentales de rayos X L_{α} , para tungsteno, que se usará como ejemplo. Los coeficientes para este polinomio son:

$$b_0 = 1.739; \quad b_1 = 2.557; \quad b_2 = -0.4972. \quad (5.7)$$

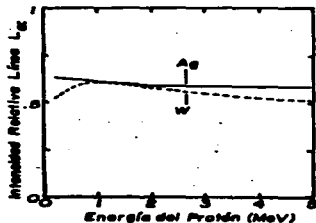
Del mismo modo, se efectúa el ajuste a un nuevo conjunto de datos experimentales de sección de ionización total de capas L, y haciendo el escalamiento propuesto en la BEA, se obtienen para un polinomio tipo Johansson los coeficientes:

$$\begin{aligned} b_0 &= 3.6577; & b_1 &= 0.045137; & b_2 &= -0.63061; \\ b_3 &= 0.063195; & b_4 &= 0.070456; & b_5 &= 0.011256 \end{aligned} \quad (5.8)$$

El número de puntos usados es 1124, a diferencia de los 158 que emplean Johansson y Johansson. La comparación entre su ajuste y el aquí mostrado se aprecia en la fig. 5.6. Puede notarse que el intervalo de validez de la curva de Johansson, señalado por las flechas, se amplía hacia arriba y hacia abajo en el nuevo ajuste.

Con estos resultados es posible efectuar la comparación sobre las predicciones que cada una de las fórmulas hace de las secciones de producción de rayos X L_{α} de tungsteno. Para los polinomios tipo Johansson, se requieren como datos la fluorescen-

Fig. 5.5. Intensidad relativa de la línea L_{α} de plata y tungsteno, de acuerdo a los resultados obtenidos por Cohen y Harrigan [90].



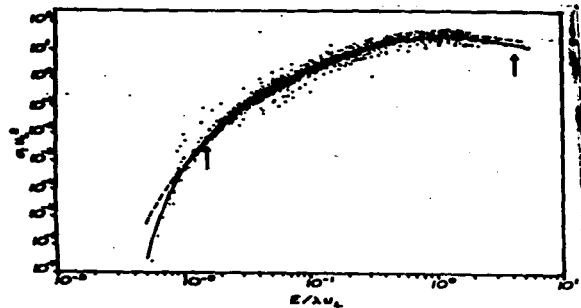


Fig. 5.6. Comparación entre el polinomio de Johansson (líneas discontinuas) y el obtenido con un nuevo ajuste a un mayor número de datos experimentales, con los coeficientes de la eq. (5.6) (líneas continuas). Las flechas indican el límite de validez del polinomio de Johansson.

cia promedio $\bar{\sigma}_L$, y la intensidad relativa. La primera se toma de la tabla publicada por Cohen [91], mientras que para la segunda se usan las tablas de Johnson y White [92]. Por otra parte, para pasar de las secciones de ionización por subcapa de la teoría ECPBSR, a la sección de producción de rayos X, se necesitan las fluorescencias y probabilidades de Coster-Kronig (tomadas de la tabla de Krause [93]), y la probabilidad de llenado de la subcapa ionizada, F_{ion} , que se obtiene de las tablas de Scofield [94]. La fig. 5.7 presenta el resultado de la comparación. En este caso, todos los modelos tienen una buena coincidencia con el experimento, excepto el polinomio tipo Khan en la región de más bajas energías. Esto se debe a que los datos experimentales de ese intervalo, y que se señalan en la fig. 5.7 con círculos negros, no fueron considerados en el ajuste, por ser publicados posteriormente a la realización del ajuste.

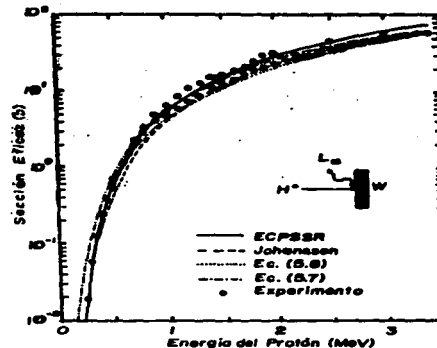


Fig. 5.7. Comparación de varias expresiones para el cálculo de la sección de producción de rayos X en la capa L de tungsteno por protones, con datos experimentales para esta magnitud.

De todo lo anterior, pueden deducirse puntos importantes sobre cada una de las expresiones para el cálculo de la sección, ya sea de ionización o de producción de rayos X. En primer lugar, se tiene que la expresión de Reuter et al., y por tanto la BEA, predice secciones eficaces mayores en la región de bajas energías. Segundo, los polinomios de Khan son fuertemente dependientes del intervalo de validez que poseen. Tercero, la SCA es totalmente inadecuada en la región de bajas energías. El polinomio de Johansson predice bien la sección eficaz para elementos ligeros, y no para elementos pesados, tratándose de la capa K, no así para el caso de la capa L, donde parece dar resultados aceptables. Finalmente, la teoría ECPBSR en todos los casos mostrados sigue regularmente el comportamiento de los datos experimentales.

Es posible advertir, como punto aparte, que la sección eficaz para la región de energías del proyectil menores que 1 MeV, tiene una muy fuerte variación con la energía. De aquí que pueda

pensarse que el empleo de FIXE con protones de estas energías pueda dar información sobre los perfiles de concentración, y por tanto, sobre medición de espesores, de acuerdo a los métodos discutidos en el capítulo 3.

En resumen, puede decirse que entre todos los modelos presentados aquí, el más confiable es el ECPSSR. Por tanto, las discusiones que en adelante se hagan, tomarán como referencia los resultados obtenidos con esta teoría, a menos que se indique lo contrario.

5.2 EL PODER DE FRENAMIENTO.

La otra cantidad fundamental en el análisis FIXE a bajas energías es el poder de frenamiento. La forma en que esta cantidad sea evaluada podría influir en los resultados obtenidos. Es, por tanto, necesario dedicar al menos unas cuantas líneas para discutir la validez de las expresiones existentes para calcular el poder de frenamiento. No se hará un análisis tan extenso como en el caso de la sección eficaz de ionización, ya que esto fue llevado a cabo por Schulz y Shchuchinsky [95].

Se pueden comparar aquí tres formas para el cálculo del frenamiento. La primera es la debida a Andersen y Ziegler [96], la segunda la desarrollada por Janni [97], y la última es la fórmula universal presentada por Montenegro et al. [98]. A esta última se le identificará por MCV. Los resultados de Schulz y Shchuchinsky permiten limitar la discusión a las expresiones de Janni y MCV, pues son casos extremos. Los valores dados por Janni se presentan en tablas, las cuales se obtuvieron con ajustes por mínimos cuadrados, con pesos estadísticos apropiados, a datos experimentales para el frenamiento. Por otro lado, la fórmula semiempírica MCV está fundamentada en el concepto de carga efectiva.

La fig. 5.8 muestra una comparación de los poderes de frenamiento para algunos elementos típicos, como son aluminio, cobre, plata, tungsteno y oro. Es fácil advertir que la

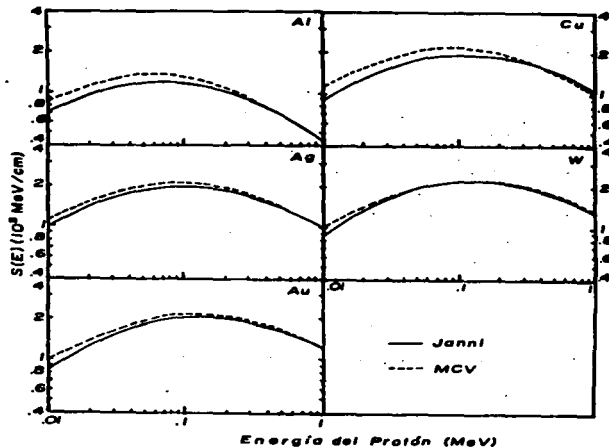


Fig. 5.8. Comparación de los valores del poder de frenamiento, dados por Janni [97], y la fórmula universal MCV [98], para los elementos aluminio, cobre, plata, tungsteno y oro.

concordancia es relativamente buena en todos los casos, excepto para el aluminio y el cobre en bajas energías. Sin embargo, es importante tener en cuenta que esta diferencia no debe influir para el análisis FIXE, puesto que se presenta en la región donde la sección eficaz de ionización es muy pequeña, y por tanto la producción de rayos X no debe quedar afectada en gran medida. Sin embargo, esta aseveración queda aún por demostrar, ya en la aplicación de FIXE en la medición de espesores.

5.3. INFLUENCIA DE LA SECCION EFICAZ DE IONIZACION Y EL PODER DE FRENAMIENTO EN LA MEDICION DE ESPESORES CON PIXE.

Para poder efectuar una comparación válida de la influencia que las magnitudes físicas ya descritas, el frenamiento y la sección eficaz de ionización, tienen sobre la medición de espesores con PIXE, es necesario referirse a un método particular.

Las características que debe presentar el método que con tal fin se usará, pueden ser entre otras:

- No depender de la eficiencia del sistema de detección;
- No depender de la dosis empleada en el análisis;
- No tener grandes complicaciones matemáticas.

De estas tres condiciones, la más importante para lo que se busca es quizás la última, ya que un complejo análisis matemático puede enmascarar la influencia tanto del frenamiento como de la sección de ionización.

Por tanto, de todos los métodos explicados en el capítulo 3, el más conveniente es el desarrollado por Rickards [54]. Puede recordarse que la técnica consiste en tomar la razón de rayos X producidos por la muestra de interés, a la cantidad de rayos X producidos en otra muestra patrón. En un caso particular, se puede tener como muestra de interés un sustrato de composición conocida, y una película evaporada en él. El patrón sería tan sólo un blanco con la misma composición que el sustrato. Así, se tendría para dicho cociente R :

$$R = \frac{N_{M,M}}{N_{P,P}} = \frac{\int_0^x n_{M,M}(x) \sigma_{M,M}(E) \exp(-\mu_{M,M} x \cos \theta) dx}{\int_0^x n_{P,P}(x) \sigma_{P,P}(E) \exp(-\mu_{P,P} x \cos \theta) dx} \quad (5.9)$$

Los subíndices M y P se refieren a la muestra y el patrón, respectivamente. Todas las cantidades fueron definidas en la ec. (3.1). Como se explicó en su momento, es preciso efectuar primero las integraciones de la ec. (5.9), y a partir de los valores obtenidos con ellas, calcular el espesor de la película por comparación de los resultados experimentales con los cálculos

teóricos.

Debe añadirse que en la ec. (5.9) se da la sección eficaz como función de la energía que lleva el proyectil a la profundidad en la cual se produce la radiación. Para calcular la relación entre dicha energía y la profundidad, se tiene la ecuación:

$$E(x) = E_0 - \int_0^x \frac{dSE}{dx} dx \quad (5.10)$$

Como ya se dijo, SE es el frenamiento, y el ángulo θ se definió en la fig. 3.1. E_0 es la energía de incidencia del proyectil.

Un punto fundamental en el método usado está en la necesidad de realizar las integrales por completo, sin recurrir a aproximación alguna. Esto se debe a que las energías utilizadas son bajas, y como puede observarse en la fig. 5.6, el frenamiento en este intervalo es máximo. Por ello, aun tratándose de una película delgada, la pérdida de energía en ella puede ser importante, siendo necesario entonces tratarla como blanco grueso.

Es factible aplicar el método a un sistema binario, consistente en una película de un elemento puro, sobre un sustrato de un elemento también puro. Esto facilita grandemente la apreciación de los efectos. La fig. 5.9 muestra las curvas de la razón R como función de la energía de incidencia del protón, para varios espesores de una película de aluminio depositada sobre un sustrato de tungsteno. La línea embleada es la L_{α} de tungsteno. Aparecen además resultados experimentales. El programa de computadora usado se puede ver en el apéndice 3.

La expresión para el cálculo de la sección eficaz de ionización que se usó para obtener las curvas de la fig. 5.9, es el polinomio tipo Khan con los coeficientes dados por (5.7). Por otra parte, la fórmula para el frenamiento es la MCV. Como puede apreciarse, los puntos experimentales siguen el comportamiento general de las curvas.

De la fig. 5.9 se nota fácilmente que la resolución del método es mayor a energías menores. Las causas de esto son,

primero, el mayor frenamiento del protón y segundo, la fuerte

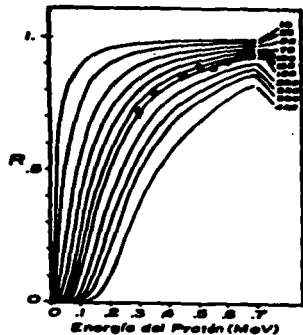


Fig. 5.9. Razón de Rayos X R La producidos por un sustrato de tungsteno con una película de aluminio, e los producidos por un sustrato de tungsteno limpio, como función de la energía de incidencia del protón. El espesor de la película, en nm , se muestra a la derecha de las curvas.

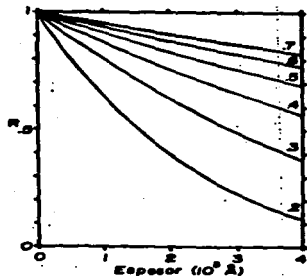


Fig. 5.10. Razón de Rayos X R La producidos por un sustrato de tungsteno con una película de aluminio, e los producidos por un sustrato de tungsteno limpio, como función del espesor de la película. La energía de incidencia del protón, en MeV, se muestra junto a cada una de las curvas.

caída de la sección de ionización con la energía, en estos intervalos. Una mejor apreciación de este cambio en la resolución se logra a través una modificación en la manera de presentar estos resultados. La fig. 5.10 muestra la misma razón R , pero ahora como función del espesor de la película. A energías bajas, la pendiente de las curvas es mayor, lo cual permite tener incertidumbres menores al momento de comparar con los datos experimentales. Esto ocurre aún con espesores muy pequeños.

de Janni, bien, debe estudiarse cuál es el efecto de cambiar la

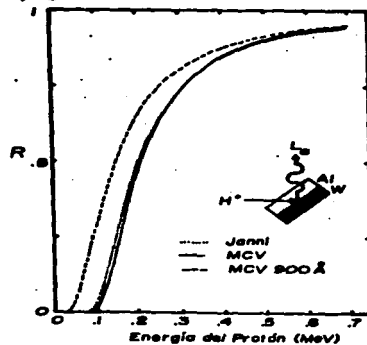


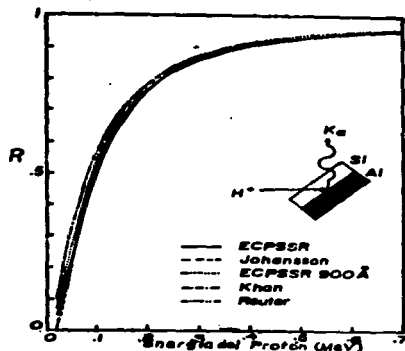
Fig. 5.11. La razón R para el sistema aluminio-tungsteno, como función de la energía de incidencia del protón. Se comparan los resultados obtenidos con el frenamiento según Janni y MCV, para una película de 300 Å. Se muestra también la curva de 300 Å para MCV.

expresión para el poder de frenamiento. En la fig. 5.11 se muestran las curvas R para dos espesores distintos (300 y 1000 Å), usando MCV, y la curva de 1000 Å con los valores de Janni. En este caso, la sección de ionización empleada es la ECPSSR. Es evidente que el error producido por una u otra expresión es ignorable. Este hecho está de acuerdo con la aseveración hecha al final de la sección anterior, donde se dijo que las diferencias importantes en los valores del frenamiento ocurren en una región donde la producción de rayos X es mínima, y por tanto, no influye en los cálculos. Se tiene, entonces, una gran libertad en cuanto a la selección de la fórmula para la evaluación del poder de frenamiento.

Es necesario ahora referirse a la intervención que presenta la sección eficaz de ionización en la cuantificación de los espesores. Es preciso, de nueva cuenta, recurrir a ejemplos específicos, pero que sean lo suficientemente representativos.

Se empezará por cotejar los modelos existentes para la ionización de capas K, excepto la Aproximación Semiclásica (SCA), pues como se vio en la sección 5.1, no da resultados confiables, principalmente a bajas energías. Como primer ejemplo, se mostrará

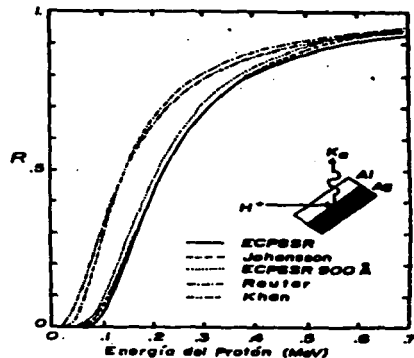
Fig. 5.12. Función R para el sistema silicio sobre aluminio. Se dan las curvas para varias expresiones de cálculo de la sección eficaz de ionización de capa K. Los espesores de las películas son de 1000 Å y, como comparación, de 900 Å con ECPSSR.



el sistema silicio-aluminio. La fig. 5.12 presenta los resultados para una película de 1000 Å de silicio. La referencia usada para estos cálculos es la sección ECPSSR, ya que se da también la curva de 900 Å obtenida con esta teoría. Se advierte que la resolución del método en este sistema no es muy buena. Esto es atribuible a la gran cantidad de rayos X K_{α} que se producen en el aluminio, y a la poca absorción que sufren tanto en la película como en el mismo sustrato. Sin embargo, es posible reparar en que la curva correspondiente a la BEA (Reuter), da un error mayor al 10% en el cálculo del espesor, en la región de bajas energías. La diferencia, sin duda, es causada porque la BEA predice secciones de ionización mayores en esta región de energías. Por otro lado,

las otras expresiones (Johansson y Khan), no dan resultados muy distintos a los de ECPSSR. Esto no es sorprendente, ya que las secciones eficaces de ionización predichas por estos tres modelos son muy semejantes para este elemento.

Fig. 5.13. Función R para el sistema aluminio sobre plata. Se dan las curvas para varias expresiones de cálculo de la sección eficaz de ionización de capa K. Los espesores de las películas son de 1000 Å y, como comparación, de 900 Å con ECPSSR.



El segunda sistema por examinar es el aluminio-plata (fig. 5.13). De nuevo, el punto de comparación es la teoría ECPSSR. En este caso, la absorción no juega un papel determinante, ya que esta es muy pequeña para los rayos X K_{α} de la plata en aluminio y en la misma plata es muy pequeña. Esto se refleja en la poca separación existente entre las curvas de 1000 Å y 900 Å. El efecto importante aquí será, entonces, la muy rápida variación de la sección eficaz al disminuir la energía. Como las expresiones de Reuter y de Khan pronostican secciones mayores que las dadas por ECPSSR (y por tanto, de las experimentales), las curvas de la función R se desvían muy apreciablemente de la ECPSSR. Un efecto curioso se presenta con la curva obtenida con la sección de

Johansson, puesto que se acerca mucho a la ECPSSR, y de hecho coincide prácticamente en el intervalo de mayor resolución del método (.2-.4 MeV). En esta región (véase la fig. 5.4), Johansson predice secciones eficaces sistemáticamente menores. La explicación a esta coincidencia podría encontrarse en el hecho de que el cociente de la ec. (5.9) absorbe estas diferencias.

Una situación que debe ser señalada en los cálculos de las curvas R , es que, cuando se miden líneas K como en los casos arriba descritos, la sección eficaz de producción de rayos X en la ec. (5.9) puede sustituirse por la sección eficaz de ionización, de acuerdo a la ec. (5.6), y por el cociente, desaparecen tanto la fluorescencia como la intensidad relativa, que son constantes. En principio esto no puede hacerse con líneas L , ya que su intensidad relativa, como se mostró en la sección 5.1, es una función de la energía. Por esta razón, dicha intensidad relativa debería permanecer dentro de las integrales de la ec. (5.9) cuando se utiliza una expresión para la sección eficaz de ionización total, como es el caso del polinomio de Johansson, y el nuevo ajuste presentado en la sec. 5.1.

Si se construyen las curvas de la función R para un sistema que requiere de la medición de una línea L , como es el aluminio-tungsteno, se puede apreciar mejor el efecto que tal estado de cosas puede crear. La fig. 5.14 presenta la comparación entre las secciones L descritas en la sección 5.1, siendo aquí el centro de referencia el nuevo ajuste a la sección de ionización total. Como puede observarse, las curvas tienen diferencias menores al 10% entre sí, excepto para el ajuste de la sección L_{α} de la ec. (5.7), puesto que coincide con la curva de 900 Å de la fig. 5.14. Hay que aclarar que las curvas de Johansson y del nuevo ajuste fueron calculadas siguiendo el procedimiento con el cual se obtuvieron las correspondientes secciones eficaces de la fig. 5.7, y con ello se eliminan las fluorescencias y las intensidades relativas al tomar los cocientes. El efecto no es muy importante para este sistema, según se desprende de los resultados.

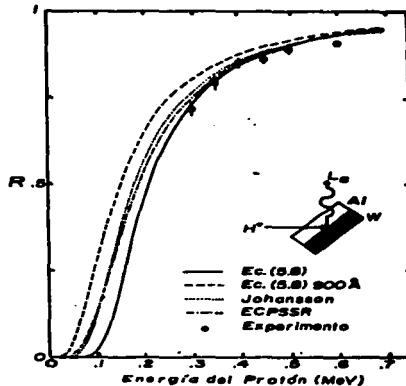


Fig. 5.14. Comparación del cociente de intensidades de rayos X L_{α} de un sustrato de tungsteno con y sin película de aluminio, calculada con varias expresiones para la sección eficaz de ionización. La curva de 900 Å obtenida con la ec. (5.7) coincide con la curva de 900 Å de la ec. (5.6).

En resumen, se tiene que las diferencias producidas por el uso de una u otra expresión para el cálculo de secciones eficaces de ionización, con el fin de aplicarlas a la medición de espesores, son altamente dependientes del sistema particular que se está estudiando. Por ello, debe tenerse en cuenta que los resultados más realistas se obtendrán con la expresión que mejor se ajuste a las secciones eficaces experimentales, siendo ésta la obtenida por medio de la teoría ECPSSR, ya que ofrece buenos resultados tanto para la ionización de capas K como de capas L . De estas últimas, además, se obtienen secciones de ionización por subcapas, lo cual permite a su vez el cálculo de secciones eficaces de producción de rayos X L . Con ella, entonces, se pueden tener cálculos consistentes.

6

**USO DE LA
DEPENDENCIA DE
LA SECCION
EFICAZ DE
IONIZACION CON
LA ENERGIA
DEL PROYECTIL**

La discusión del capítulo 5 trajo como conclusión el que se eligiera como "mejor" forma de cálculo de la sección eficaz de ionización a la teoría ECPBSR, y que para el cálculo del poder de frenamiento se puede emplear indistintamente la fórmula universal MCV, o las tablas de Janni.

Por otro lado, se observó que en las regiones de bajas energías (1-7 MeV), la sección de ionización varía bruscamente con la energía del proyectil. Esta dependencia, por ejemplo, hace que en el método usado en el capítulo anterior, la resolución más alta se presente a energías más bajas.

El propósito de este capítulo será, pues, proponer diferentes aplicaciones de esta súbita variación al decrecer la energía del proyectil, y justificar teórica y experimentalmente estos nuevos usos al comparar con algunas de las técnicas presentadas en capítulos anteriores.

6.1 PROPUESTA DE UN NUEVO METODO PARA MEDIR ESPESORES CON PIXE.

Se dijo en el capítulo 3 que existen diversas formas de extraer información sobre perfiles de profundidad, al variar ciertas magnitudes, como es la energía de incidencia del proyectil, el ángulo de incidencia, la naturaleza de los proyectiles, etc. El método del capítulo 5 radica en el cambio de la energía de incidencia de los protones. Debe tenerse en cuenta que esta técnica tiene la desventaja de requerir de un patrón, aunque no dependa de la eficiencia del sistema de detección. La necesidad del patrón es una seria limitación cuando la muestra de interés es única. Por tanto, sería ventajoso encontrar una técnica en la cual dicho patrón no sea indispensable, y que además pueda prescindir del conocimiento de la eficiencia del detector.

Pensando en lo anterior, y buscando aprovechar la variación de la sección eficaz de ionización a energías bajas, se ha encontrado un nuevo método que permitirá cuantificar el espesor de una película delgada con la técnica PIXE.

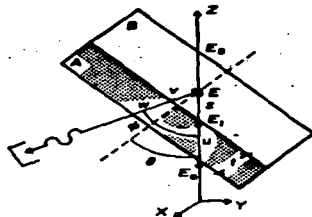


Fig. 6.1. Geometría para el establecimiento de un nuevo método de medición de espesores de películas delgadas con PIXE.

Para explicar este método se hará uso de la fig. 6.1. En ella, un haz de protones con energía inicial E_0 , incide sobre un blanco consistente en una película de un elemento A, depositada sobre un sustrato grueso de un elemento B (o de espesor mayor al alcance del proyectil dentro del material que lo forma). La dirección original del haz forma un ángulo θ con la normal a la superficie del blanco. Los protones, al atravesar la película de espesor t , pierden energía, y entran al sustrato con energía E_1 , después de recorrer una distancia efectiva w :

$$w = t / \cos \theta. \quad (6.1)$$

A partir de este momento, comienzan a excitar los átomos del sustrato, y a producir rayos λ característicos del elemento o elementos que componen el sustrato. Luego de seguir una distancia z dentro del sustrato, llevan una energía E . Si en este punto se produce un fotón característico del sustrato, para que sea detectado debe recorrer una distancia v dentro del sustrato, que está dada por:

$$v = z \cos \theta / \cos |\phi - \theta|. \quad (6.2)$$

Aquí, ϕ es el ángulo entre la dirección original del haz y la dirección en la cual se halla el detector. Después, tiene que recorrer una distancia u en la película:

$$u = t / \cos |\phi - \theta|. \quad (6.3)$$

Si se aplica la ec. (3.1) a este sistema para calcular el

número de rayos λ producidos en el sustrato, se tendrá:

$$N_{MB} = \frac{Q}{2N} \iint P(x, y) n(x, y, z) e_{\lambda}^{-\mu_A x - \mu_B z} dx dy dz, \quad (6.4)$$

donde μ_A y μ_B son los coeficientes de absorción de masa de la línea de rayos λ de interés en los elementos A y B, respectivamente. Si el haz es uniforme en su sección transversal, y la distribución atómica del blanco es uniforme, puede escribirse:

$$P(x, y) dx dy = P, \quad (6.5)$$

$$n(x, y, z) = N/V. \quad (6.6)$$

En la ecuación (6.4), N es el número total de átomos, V el volumen que resulta irradiado por el haz. La ec. (6.5) solo representa una normalización al número total de partículas incidentes. Si además se definen las cantidades:

$$a = \mu_A / \cos|\theta - \phi|, \quad (6.7)$$

$$b = \mu_B \cos\phi / \cos|\theta - \phi|, \quad (6.8)$$

la ec. (6.4) se transforma en:

$$N_{MB} = \frac{Q}{2N} \iint \frac{N}{V} e^{-ax} e^{-bz} dz. \quad (6.9)$$

ecuación en la que z_0 representa la profundidad a la cual ya no se producen rayos λ . A esta profundidad el proyectil debe llevar una energía tal que la máxima energía transferida sea igual a la energía de ligadura del electrón a expulsar. En forma burda, podría tomarse como la energía de ligadura del electrón, puesto que a estas energías la sección eficaz de ionización es muy pequeña, y no habrá diferencia con el valor exacto. Además, puede definirse una constante:

$$A = \frac{Q}{2N} \frac{PN}{V}, \quad (6.10)$$

para resultar:

$$N_{MB} = A e^{-a^2} \int_0^{z_0} e^{-bz} dz. \quad (6.11)$$

A continuación se efectúa un cambio de variable, de distancia a energía. Para ello puede usarse la relación:

$$z = - \int_{E_1}^E \frac{dE}{(dE/dx)_B} = \int_{E_1}^E \frac{dE}{(dE/dx)_B} - \int_0^E \frac{dE}{(dE/dx)_B} = R_B(E_1) - R_B(E), \quad (6.12)$$

donde $\langle dE/dx \rangle_B = S_B(E)$ es el poder de frenamiento en el elemento B, y $R_B(E)$ es el alcance del proyectil en el mismo elemento, como función de su energía de incidencia. Con esto se puede escribir:

$$dz = - \frac{dR_B(E)}{dE} dE. \quad (6.13)$$

Por otro lado, como

$$R_B(E) = \int_0^E \frac{dE'}{S_B(E')}, \quad (6.14)$$

resulta

$$\frac{dR_B}{dE} = \frac{1}{S_B(E)}, \quad (6.15)$$

es decir

$$dz = -dE/S_B(E). \quad (6.16)$$

Utilizando las ecs. (6.16) y (6.12) en la ec. (6.11), se obtiene:

$$N_{MB} = A e^{-a^2} \int_{E_1}^{E_0} \frac{e^{-bR_B(E)}}{S_B(E)} dE, \quad (6.17)$$

donde se ha usado la definición

$$AR_B(E_1, E) = R_B(E_1) - R_B(E). \quad (6.18)$$

El interés se centra ahora en la variación que la ec. (6.17) presenta con respecto al ángulo de incidencia del haz, θ . Para ello se define la variable angular

$$l = \sec\theta, \quad (6.19)$$

y se averigua la dependencia de la ec. (6.17) con l . Se observa que la energía E_1 es una función de esta variable angular:

$$E_1 = E_0 - \int_0^{l-1} S_A(E) dz. \quad (6.20)$$

En esta ecuación, $S_A(E)$ es el poder de frenamiento de la película. Con el fin de estudiar a fondo la relación de N_{MB} con l , se toma su derivada:

$$\frac{\partial N_{MB}}{\partial I} = \frac{\partial N_{MB}}{\partial A} \frac{\partial A}{\partial I} + \frac{\partial N_{MB}}{\partial b} \frac{\partial b}{\partial I} + \frac{\partial N_{MB}}{\partial E_i} \frac{\partial E_i}{\partial I}. \quad (6.21)$$

Se puede calcular:

$$\frac{\partial A}{\partial I} = \frac{\mu_A \cos \theta}{\cos |\theta - \phi|} \frac{\tan(\theta - \phi)}{\tan \theta} \quad (6.22)$$

$$\frac{\partial b}{\partial I} = \frac{\mu_B \cos^2 \theta}{\cos |\theta - \phi|} \left[\frac{\tan(\theta - \phi)}{\tan \theta} - 1 \right] \quad (6.23)$$

$$\frac{\partial E_i}{\partial I} = -t \epsilon_A(E_i). \quad (6.24)$$

Usando estas ecuaciones en la ec. (6.21), se obtiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_{MB}}{\partial I} = & -A e^{-\mu_A t} \left\{ \frac{t \cos \theta}{\cos |\theta - \phi|} \left[\mu_A \frac{\tan(\theta - \phi)}{\tan \theta} - \mu_B \frac{E_A(E_i)}{E_0(E_i)} \right] I_0(E_i) \right. \\ & \left. + \mu_B \frac{\cos^2 \theta}{\cos |\theta - \phi|} \left[\frac{\tan(\theta - \phi)}{\tan \theta} - 1 \right] I_1(E_i) + t \frac{E_A(E_i)}{E_0(E_i)} \phi_N(E_i) \right\}. \end{aligned} \quad (6.25)$$

ecuación en la que

$$I_1(E_i) = \int_{E_i}^{E_0} \frac{\phi_N(E)}{E} e^{-\mu_B(E-E_i)} [A_0(E_i, E)]^2 dE. \quad (6.26)$$

Definiendo las funciones:

$$f_1(\theta) = \frac{t}{\cos |\theta - \phi|} \left[\mu_A \frac{\tan(\theta - \phi)}{\tan \theta} \right] \quad (6.27)$$

$$f_2(\theta) = \mu_B \frac{\cos \theta}{\cos |\theta - \phi|} \left[\frac{\tan(\theta - \phi)}{\tan \theta} - 1 \right]. \quad (6.28)$$

y multiplicando por -1 la ecuación (6.25), esta se puede modificar ligeramente para escribir:

$$\begin{aligned} -1 \frac{\partial N_{MB}}{\partial I} = & A e^{-\mu_A t} \left\{ \left[f_1(\theta) - \frac{t \mu_B}{\cos |\theta - \phi|} \frac{E_A(E_i)}{E_0(E_i)} \right] I_0(E_i) + f_2(\theta) I_1(E_i) \right. \\ & \left. + \frac{t}{\cos \theta} \frac{E_A(E_i)}{E_0(E_i)} \phi_N(E_i) \right\}. \end{aligned} \quad (6.29)$$

El estudio de esta función puede proporcionar información acerca del espesor de la película. Para ello, es preciso recurrir a formas analíticas del frenamiento y del alcance en los elementos

de la película y sustrato. Debe recordarse que en el capítulo 5 se discutió la posibilidad de usar dos fórmulas para el frenamiento, aunque hay que aclarar que, para utilizar los valores de Janni, se requiere ajustar alguna curva a los valores tabulados, tanto para el frenamiento como para el alcance. En el caso de MCV, en cambio, deben calcularse primero los alcances, mediante integración numérica. No obstante, las diferencias entre ambas opciones no son importantes. Así pues, a modo de ejemplo, se usarán los valores de Janni, ajustándoles un polinomio de la forma:

$$\ln S(E) = s_0 + s_1 \ln E + s_2 (\ln E)^2, \quad (6.30)$$

para el frenamiento, mientras que para el alcance se usa:

$$R(E) = r_0 + r_1 E + r_2 E^2. \quad (6.31)$$

Los ajustes se efectúan con mínimos cuadrados pesados, y se halla que los polinomios reproducen los valores tabulados con un error del orden del 1%.

Hecho lo anterior, es posible aplicar estos resultados a un sistema binario particular. Como ejemplo, se empleará el sistema oro sobre tungsteno. En la fig. 6.2 se aprecian gráficas de la cantidad $-1 \frac{\partial N_{MB}}{\partial I}$ como función del ángulo de incidencia, para diversos espesores de la película y energías de incidencia del protón. Es necesario resaltar varios puntos:

- 1.- Las curvas presentan máximos en algunos casos, que se van desplazando hacia ángulos menores conforme aumenta el espesor.
- 2.- Estos máximos se recorren hacia ángulos mayores si la energía de incidencia aumenta, con un espesor fijo.
- 3.- Siguiendo el comportamiento para un espesor dado, por ejemplo 1000 Å, se advierte que a 200 keV la curva siempre decrece, a 250 y 300 keV presenta máximos, y a 350 keV aumenta invariablemente.
- 4.- A energías mayores, los máximos son más pronunciados, cuando se presentan.

Estos resultados confirman la aseveración hecha anteriormente, en el sentido de que la función $-1 \frac{\partial N_{MB}}{\partial I}$ da información sobre el espesor de la película, ya que dada una energía, el máximo en esta función $-1 \frac{\partial N_{MB}}{\partial I}$ corresponde a un espesor determinado.

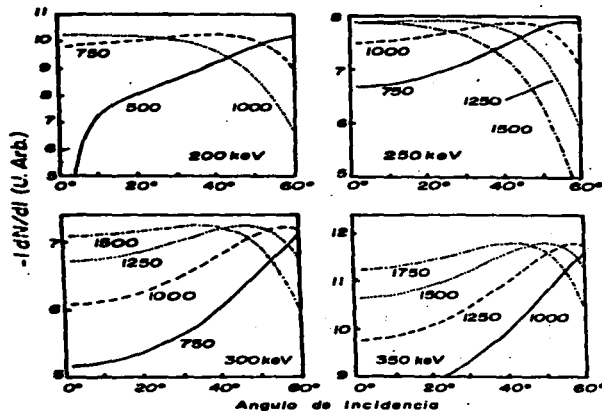


Fig. 2.2. Gráficas de la función $-t \frac{dN}{dt}$ como función del ángulo de incidencia del haz para el sistema ^{235}U sobre tungsteno. El espesor de la película, en angstroms, aparece junto a cada curva. Cada cuadro corresponde a la energía de incidencia del positón mostrada en él. Las curvas se obtienen con el programa del apéndice 2.

Es necesario tener en cuenta que la medición de espesores pequeños requiere, inevitablemente, el empleo de energías bajas, pues de lo contrario el máximo no ocurre, aunque tampoco deben usarse energías demasiado bajas, por la misma causa.

Ahora bien, si experimentalmente se lograra obtener una curva que presenta un máximo, debe encontrarse una relación entre dicho máximo y el espesor, con el fin de poder cuantificar este último. Esta relación podría obtenerse de dos maneras, a saber: la

primera, tener una tabla o gráfica de la posición del máximo como función del espesor; y la segunda, obtener una expresión matemática, conseguida a partir de la ec. (2.29), que abra la posibilidad de calcular el espesor.

Si se escoge la segunda posibilidad, el proceso lógico sería calcular el máximo de la función $-t \frac{dN}{dt}$, por medio del cálculo de su derivada. Dado que t es una función monótona creciente de θ en el intervalo $[0, \pi/2]$, el máximo puede obtenerse derivando con respecto a θ o a t . Siguiendo la segunda opción, se obtiene para dicha derivada:

$$\frac{d}{dt} \left[-t \frac{dN}{dt} \right] = \left[F_0(E_s, \theta) 1_0(E_s) + F_1(E_s, \theta) 1_1(E_s) + F_2(E_s, \theta) 1_2(E_s) \right. \\ \left. + t(1-2f_1(\theta)) \frac{t}{\cos^2 \theta} S_A(E_s) \left\{ \mu_s \frac{\cos \theta}{\cos^2 \theta} - \theta S_B(E_s) \right\} \right] \quad (6.32) \\ - \frac{d}{dE_s} \left[\ln \left[\frac{S_A(E_s)}{S_B(E_s)} \sigma_N(E_s) \right] \right] \Big] t e^{-t}.$$

donde

$$F_0(E_s, \theta) = \frac{t \mu_s \cos \theta (1 + f_1(\theta))}{\cos^2 \theta - \theta | \sigma_N(E_s) |} - \frac{\cos \theta [f_1(\theta)]^2 S_B(E_s)}{\sigma_N(E_s) S_A(E_s)} + \frac{g_1(\theta) S_B(E_s)}{\sigma_N(E_s) S_A(E_s)} \\ - \frac{t f_1(\theta)}{\sigma_N(E_s)} + \frac{t^2 \mu_s S_A(E_s)}{\sigma_N(E_s) S_A(E_s) \cos^2 \theta} \left[\frac{d}{dE_s} \left[\ln \left[\frac{S_A(E_s)}{S_B(E_s)} \right] \right] \right] \\ - \frac{t^2 \mu_s^2 \cos^2 \theta S_B(E_s)}{\cos^2 \theta - \theta | \sigma_N(E_s) | S_B(E_s)} - \frac{t f_1(\theta)}{\sigma_N(E_s)} \quad (6.33)$$

$$F_1(E_s, \theta) = \frac{g_1(\theta) S_B(E_s)}{\sigma_N(E_s) S_A(E_s)} + \frac{f_1(\theta) f_2(\theta) S_B(E_s) (1 - \cos \theta)}{\sigma_N(E_s) S_A(E_s)} \\ + \frac{t \mu_s \cos \theta f_2(\theta)}{\cos^2 \theta - \theta | \sigma_N(E_s) |} \quad (6.34)$$

$$F_2(E_s, \theta) = - [f_2(\theta)]^2 \cos \theta \frac{S_B(E_s)}{\sigma_N(E_s) S_A(E_s)} \quad (6.35)$$

$$I_{\alpha}(\theta) = \frac{M_{\alpha} \cos^2 \theta}{\cos^2 \theta - \theta^2} \left[\frac{1 + \sin^2(\theta - \phi)}{\cos^2 |\theta - \phi| \tan \theta} - \frac{\tan(\theta - \phi)}{\sin^2 \theta} \right], \quad (6.34)$$

$$I_{\beta}(\theta) = \frac{M_{\beta} \cos^2 \theta}{\cos^2 \theta - \theta^2 \tan^2 \theta} \left[\frac{1 + \sin^2(\theta - \phi)}{\cos^2 |\theta - \phi| \tan \theta} - \frac{\tan(\theta - \phi)}{\sin^2 \theta} \right] + \tan \theta - 2 \tan(\theta - \phi). \quad (6.37)$$

La ecuación (6.32) aún depende del espesor t . Sin embargo, usando una expresión semejante a la ec. (6.12), se tiene para el espesor:

$$t = R_{\Delta}(E_{\alpha}) - R_{\Delta}(E_{\beta}) = \Delta R_{\Delta}(E_{\alpha}, E_{\beta}), \quad (6.38)$$

en que $R_{\Delta}(E)$ es el alcance del protón en el material que forma la película. Para el ángulo en el cual ocurre el máximo, se tiene que la ec. (6.32) debe ser igual a cero. Sustituyendo la ec. (6.38) en las ecs. (6.32)-(6.34), el resultado es:

$$F_{\alpha}(E_{\alpha}, \theta) I_{\alpha}(E_{\alpha}) + F_{\beta}(E_{\beta}, \theta) I_{\beta}(E_{\beta}) + F_{\gamma}(E_{\gamma}, \theta) I_{\gamma}(E_{\gamma}) + \Delta R_{\Delta}(E_{\alpha}, E_{\beta}) \cos \theta (1 - 2 \tan^2 \theta) + [\Delta R_{\Delta}(E_{\alpha}, E_{\beta})]^2 \cos \theta S_{\Delta}(E_{\alpha}, E_{\beta}) - \left[\frac{M_{\alpha} \cos \theta}{\cos^2 \theta - \theta^2 \tan^2 \theta} - \frac{\theta}{E_{\alpha}} \ln \left[\frac{S_{\Delta}(E_{\alpha}, E_{\beta})}{E_{\beta}(E_{\alpha})} \right] \right] = 0. \quad (6.39)$$

Esta ecuación se ve realmente compleja. A pesar de esto, con ayuda de un programa de computadora (Apéndice D), se puede resolver sin mayores dificultades, para obtener el valor de E_{β} pues en la ec. (6.39) el ángulo θ es igual a θ_{MAX} , el ángulo del máximo. Después de calcular E_{β} , el espesor se puede conocer por medio de la ec. (6.38).

La ventaja que reporta el uso de las ecs. (6.38) y (6.39), es que la eficiencia del sistema de detección ha desaparecido, al igual que el número de proyectiles incidentes en el blanco. Además, el método no requiere de una muestra patrón.

La técnica que se ha sugerido en las páginas anteriores exige, no obstante, una corroboración experimental, proceso que será descrito en la siguiente sección.

6.2 DESARROLLO EXPERIMENTAL DEL METODO.

La técnica establecida teóricamente en la sección 6.1 tiene características especiales que hacen impredecibles, para su aplicación, ciertas propiedades del dispositivo experimental, las cuales difieren en algunos aspectos de las habituales en un sistema para el desarrollo de PIXE.

En un sistema común de PIXE, el detector de Si(Li) se encuentra a un ángulo de 90° con la dirección del haz, mientras que la muestra forma un ángulo fijo de 45° con la misma dirección. Esto se hace con la finalidad de tener el detector lo más cerca posible de la muestra de interés. El método propuesto, por otra parte, no permite esta ubicación de los elementos, sino que el detector se encuentra lo más cerca posible de la dirección de incidencia del haz de protones. De lo contrario, habría un bloqueo para la detección de los fotones producidos.

Además, generalmente el blanco se halla fijo, mientras que este método tiene como requerimiento fundamental el que la muestra pueda girar alrededor de un eje perpendicular al plano definido por la dirección del haz y la de detección. Adicionalmente, la precisión en el ángulo de incidencia debe ser buena.

Se mencionó en el capítulo 3 que las mejores resoluciones en PIXE se logran con energías del proyectil de 1-3 MeV. El nuevo método necesita energías que son del orden de cientos de keV. Esto hace ideal para el desarrollo de la técnica al acelerador Van de Graaf de 0.7 MeV del Instituto de Física, si el orden de espesores que desean medirse es de 1000-2000 Å.

Los párrafos anteriores hacen ver la necesidad que se tiene de una cámara de análisis especial, de la cual no se disponía originalmente. Por tanto, se procedió a realizar un diseño que incluyera todas las características descritas. En las figuras 6.3 a 6.5 se muestran los planos de la cámara de análisis, que fue construida en acero inoxidable.

Fig. 6.3. Vista superior de la cámara de análisis PMS. La ventana del espectro es de Nylon, y se halla a un ángulo de 20° con la dirección de incidencia del haz. Existe además un colimador de 8 mm de diámetro.

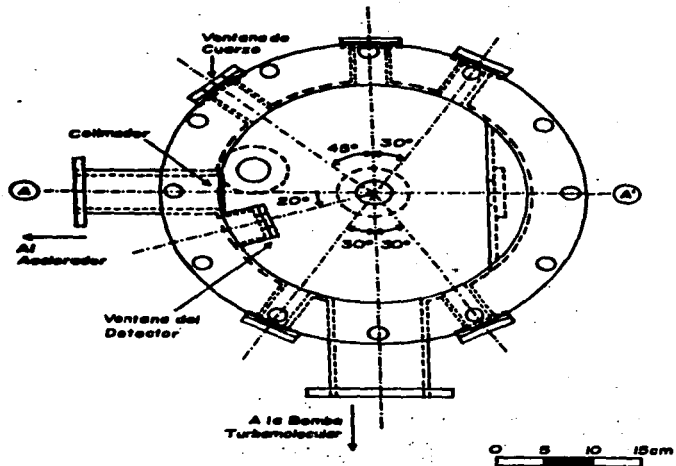


Fig. 6.4. Corte lateral de la cámara de análisis PMS, a lo largo del eje AA' de la fig. 6.3. En la parte central se aprecia el portamuestras, que está fijo a un goniómetro que da un precisión en el giro de 0.01° . Además, puede moverse verticalmente con la ayuda de un fusillo, que se encuentra en la parte de unión del goniómetro con la tapa de la cámara. El dedo frío puede utilizarse para colocar un detector de barrera superficial, y realizar también análisis con SBS.

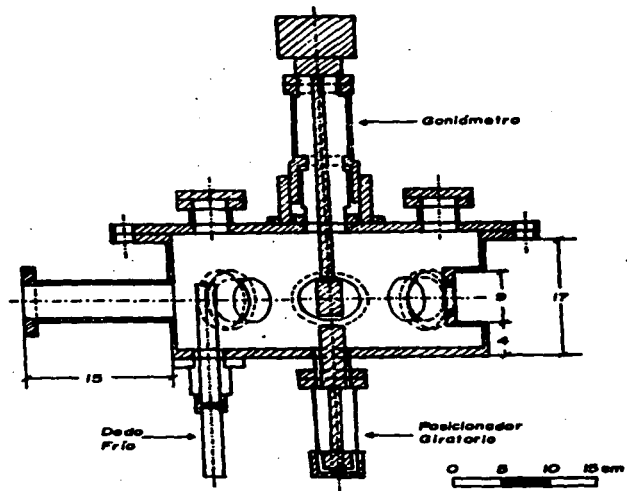
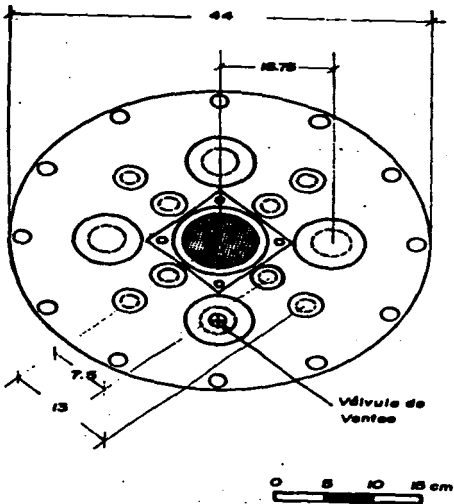


Fig. 2.9. Vista superior de la tapa de la cámara de análisis PISE. La zona sombreada en el centro corresponde al goniómetro. Aparecen también ocho bocas pequeñas, que no se muestran en la fig. 2.8.



El detector de Si(Li) se halla a un ángulo de 20° con la dirección de incidencia del haz. Esta ubicación del detector tiene además la ventaja de que la radiación de fondo debida al *Bremsstrahlung* se ve fuertemente disminuida con respecto a una colocación perpendicular. Este hecho fue demostrado por Folkmann et al. [99]. La ventana de la cámara hacia el detector es de Mylar. El portamuestras, construido de aluminio, está montado sobre un goniómetro que da una precisión en los ángulos de $20.5''$. Este, desde luego, se encuentra en el eje de la cámara.

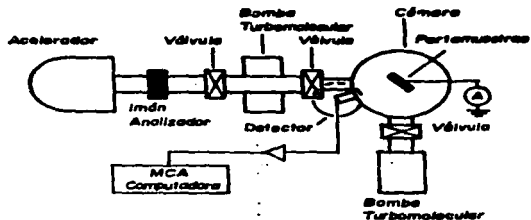


Fig. 2.8. Representación esquemática del dispositivo experimental. El analizador multicanal está incluido dentro de un computador personal, para efectuar el análisis de los espectros, y que pueden ser grabados en discos flexibles.

En la fig. 2.9 aparece el dispositivo experimental completo. Esquémicamente, fuese apreciarse que el vacío en la cámara de dispersión se hace con una bomba turbomolecular (de una velocidad de bombeo de 270 l/s). Esto permite tener vacíos limpios y rápidos. En la línea que conecta al acelerador con la cámara, y que también es de acero inoxidable, existe igualmente una bomba turbomolecular. Las válvulas que separan la cámara de las bombas son electro-neumáticas.

La señal producida por el detector, después de ser procesada por su amplificador adjunto, pasa a un amplificador, el cual le da forma y tamaño adecuados para ser colectados en un analizador

multicanal (MCA), el cual está contenido en una microcomputadora. En el MCA se obtiene el espectro, que puede ser grabado en disco para ser analizado posteriormente. Por otro lado, en el periscopio se hace conexión con un integrador de corriente, que permite conocer la dosis aplicada.

Con el dispositivo experimental listo para su operación, fue preciso escoger algunos sistemas binarios para demostrar la validez del método. Se eligieron tres sistemas, que consisten en una película de oro sobre tres sustratos distintos: cobre, plata y tungsteno.

La preparación de las muestras se efectuó con evaporación de alambre de oro de alta pureza (99.99%), utilizando un filamento de tungsteno, y en un vacío de 4×10^{-6} torr. Fue posible hacer una estimación del espesor de las películas, utilizando la ec. (2.5). Si se evaporó una masa de 30521 mg de oro, y estando los sustratos a una distancia de 1021 cm del filamento, se tendría un espesor de 1240260 Å.

Los sustratos requirieron una preparación previa, distinta en cada caso. El cobre fue pulido inicialmente con alúmina (Al_2O_3), hasta tener un aspecto de espejo. El tungsteno solo se limpió con una solución de acetona y agua, sometido a ultrasonido; una limpieza semejante se le dio al sustrato de cobre, después de ser pulido. El sustrato de plata requirió de un baño en una solución de ácido nítrico en agua, al 30%. Por otro lado, dentro de la cámara de evaporación, a los sustratos se les colocó sobre una platina de vidrio. Esto permitiría posteriormente una medición del espesor de la película depositada en el vidrio con un perfilómetro.

Después de preparadas las muestras, se procedió a realizarlos, experimentos. Se utiliza un colimador para el haz con un diámetro de 3 mm. Las muestras se sujetaron al portablancos con pintura de plata, lo cual garantizó un buen contacto eléctrico, que facilita la interacción de la corriente. Es importante señalar que éste muestra una variación conforme se modificaba el ángulo de

incidencia del haz. Esta variación se atribuye a que al cambiar

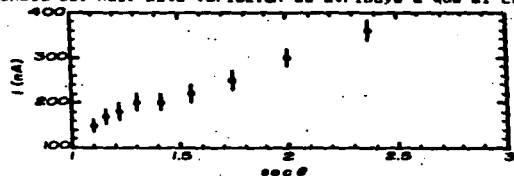


Fig. 6.7. Variación de la corriente medida en el periscopio, como función de la oscante del ángulo de incidencia del haz de protones. Se observa un comportamiento aproximadamente lineal.

el ángulo, cambia el área irradiada, y se producen más electrones secundarios. Se observa (fig. 6.7), que la corriente varía linealmente con $\sec \theta$. De aquí que sea necesario hacer una corrección a la corriente integrada en cada espectro, multiplicando por $\sec \theta$ al número de cuentas dentro del pico de interés. El vacío en la cámara durante los experimentos fue del orden de 1.5×10^{-6} torr.

Al efectuar el análisis con la muestra oro-plata, se encontró la primera limitación del método. Las energías de los protones deben ser del orden de 250-350 keV; en este intervalo, la sección eficaz de ionización de capa K de la plata es muy baja (fig. 5.4), mientras que el frenamiento en oro es grande (fig. 5.8). Por tanto, el uso de protones de 350 keV no permitió detectar rayos $X_{K\alpha}$ de la plata, al menos en cantidad significativa estadísticamente. Como consecuencia, no fue posible aplicar el método al sistema oro-plata.

No obstante, se obtuvieron los espectros para los sistemas oro-cobre y oro-tungsteno. La energía usada en el primero fue de 300 keV, y en el segundo se tuvieron energías de 325 y 350 keV. Las incertidumbres en estos valores de las energías son menores al 1%. Las dosis aplicadas oscilaron entre 150 y 1300 μC , con el fin de tener incertidumbres pequeñas en las áreas de los picos.

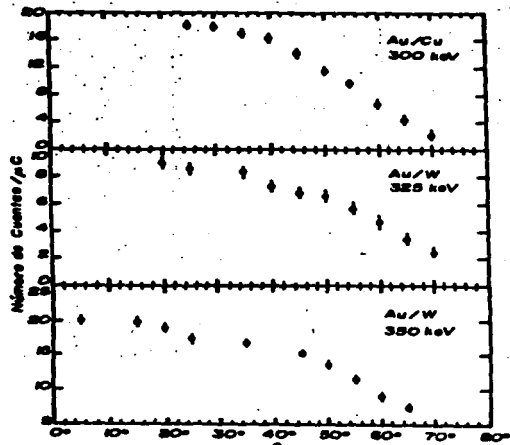


Fig. 5.5. Número de cuentas dentro del pico de interés, por microcoulomb de dosis incidente, como función del ángulo de incidencia del haz. La línea usada para el sistema oro-cobre fue la de Cu , mientras que para el oro-tungsteno fue la de W . En la figura se indican las energías de incidencia del haz.

En la fig. 5.6 se observan los resultados para los tres casos descritos en el párrafo anterior, donde se presenta el número de cuentas por microcoulomb, ya corregidas por el efecto de electrones secundarios, como función del ángulo de incidencia. Se advierte en ellas un comportamiento regular, y congruente con lo esperado. A continuación, con el fin de obtener la función $\text{I} \cos^2 \theta$, se precisó del ajuste de una curva a los datos experimentales. Se encontró que la mejor forma de hacerlo era

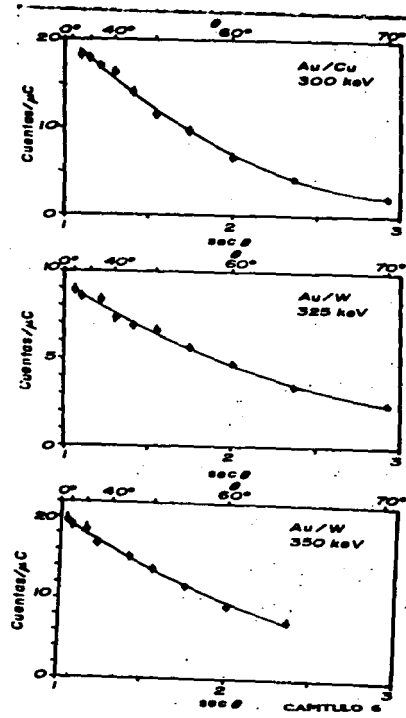


Fig. 5.6. Comparación de los datos experimentales de la fig. 5.5 con los polinomios de la forma (5.6), para los sistemas oro-cobre y oro-tungsteno. Las energías de incidencia se muestran en la figura.

mediante un polinomio de la forma:

$$N_{\text{exp}} = n_0 + n_1 \theta + n_2 \theta^2 \quad (6.40)$$

con $\theta = \text{sen}^2 \theta$, y dando los coeficientes n_i se calculan con mínimos cuadrados pesados. En la fig. 6.9 se muestra la comparación de los polinomios ajustados con los respectivos datos experimentales. Los coeficientes en cada caso son:

Oro/Cobre 300 keV:

$$n_0 = 43.2 \pm 1.7; \quad n_1 = -26.8 \pm 1.2; \quad n_2 = 4.38 \pm 0.19.$$

Oro/Tungsteno 325 keV:

$$n_0 = 16.23 \pm 0.78; \quad n_1 = -8.12 \pm 0.35; \quad n_2 = 1.17 \pm 0.053.$$

Oro/Tungsteno 350 keV:

$$n_0 = 34.8 \pm 3.7; \quad n_1 = -17.4 \pm 0.78; \quad n_2 = 2.43 \pm 0.11.$$

Conocidos los coeficientes, es posible calcular la función $-I \frac{dN}{dI}$. Esta se encuentra graficada en las figuras 6.10-6.12. Resulta de inmediato que en todos los casos la función presenta un máximo. Además, se compara en las mismas figuras la curva

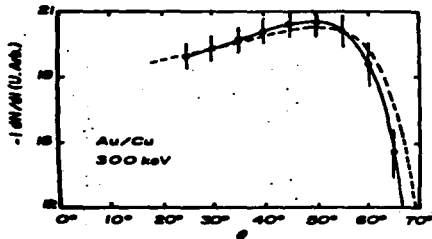


Fig. 6.10. La función $-I \frac{dN}{dI}$ para el sistema oro-cobre, a una energía de 300 keV. La línea continua es la curva experimental, y la discontinua es una curva teórica para un espesor de 1500 Å.

experimental con algunas curvas teóricas. En el caso del sistema oro-cobre, la curva teórica corresponde a un espesor de 1500 Å, y para el oro-tungsteno, el espesor de la curva teórica es de 1250 Ångstroms, y se observa que caen dentro de los errores experimentales de las primeras. Sin embargo, el máximo de ambas curvas no coincide exactamente. Para cada curva, dicho máximo está en los siguientes ángulos, que se obtienen con los coeficientes dados más

Fig. 6.11. La función $-I \frac{dN}{dI}$ para el sistema oro-tungsteno, a una energía de 325 keV. La curva continua es experimental, mientras que la discontinua es una curva teórica para un espesor de 1250 Å.

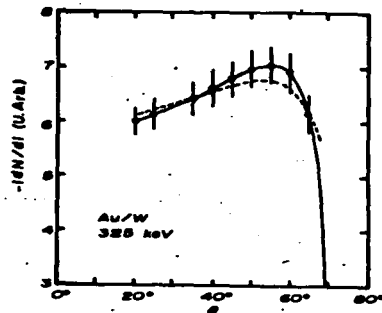
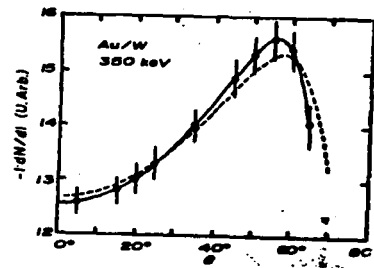


Fig. 6.12. La función $-I \frac{dN}{dI}$ para el sistema oro-tungsteno, a una energía de 350 keV. La curva continua es experimental, mientras que la discontinua es una curva teórica para un espesor de 1250 Å.



arriba:

Oro/Cobre 300 keV:	$\theta_{MAX} = 49^\circ \pm 4'$
Oro/Tungsteno 325 keV:	$\theta_{MAX} = 55^\circ \pm 5'$
Oro/Tungsteno 350 keV:	$\theta_{MAX} = 56^\circ \pm 5'$

La sustitución de estos ángulos en la ec. (4.39), y la consecuente resolución de ésta, da como valores para E_1 :

Oro/Cobre 300 keV:	$E_1 = 261 \pm 3$ keV
Oro/Tungsteno 325 keV:	$E_1 = 278 \pm 3$ keV
Oro/Tungsteno 350 keV:	$E_1 = 301 \pm 2$ keV

A su vez, la subsiguiente sustitución de estos valores en la ec. (4.38) arroja los siguientes valores para el espesor:

Oro/Cobre 300 keV:	$t = 1410 \pm 150$ Å
Oro/Tungsteno 325 keV:	$t = 1170 \pm 160$ Å
Oro/Tungsteno 350 keV:	$t = 1270 \pm 130$ Å

Estos resultados muestran una concordancia con el valor calculado para la evaporación, excepto el del sistema oro-cobre, aunque quedan dentro de los intervalos de incertidumbre. A pesar de esto, es necesario llevar un poco más allá la discusión sobre la validez de estos resultados, lo cual se hará por medio de la comparación con otros métodos para medir espesores.

6.3. CONFRONTACION DEL NUEVO METODO CON OTRAS TECNICAS PARA MEDICION DE ESPESORES.

Los resultados obtenidos con el método discutido en las secciones anteriores han probado tener una buena concordancia con las predicciones hechas con la determinación de la geometría de la fuente de evaporación, sobre todo en el caso del sistema oro-tungsteno. Aunque para los dos sistemas estudiados, los valores caen dentro de los intervalos de incertidumbre, se hará una comparación con algunas de las técnicas mencionadas en otros capítulos.

La primera, por ser más directa, se efectúa con un perfilómetro. El equipo usado es el perfilómetro DeAlch, de la Sloan

Technology Corp., Sta. Barbara, California. Este aparato permite medir espesores de hasta 100 Å, con una resolución máxima de 10 Å.

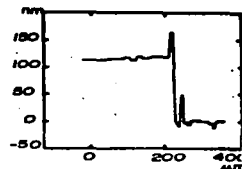


Fig. 6.13. Perfil de una película de oro evaporada sobre una platina de vidrio.

El perfil medido es el que se obtuvo en el vidrio sobre el cual se colocaron los sustratos durante la evaporación. El resultado puede apreciarse en la fig. 6.13, donde se muestra el escalón, cuyo tamaño es de 1150 ± 100 Å. Ahora bien, debido al espesor de los sustratos, se espera que el de las películas sobre ellos sea ligeramente mayor, en unos 30-50 Å. Es de notar que este valor cae de nuevo dentro de las incertidumbres.

La siguiente prueba se efectúa por medio de la Retrodispersión de Rutherford. Para ello, se utiliza el dispositivo experimental de la fig. 2.24. Dado que las películas son de un elemento más pesado que el del sustrato, es posible medir el ancho del pico debido a la retrodispersión en el oro. Utilizando la técnica descrita por Rickards [100] para tomar en cuenta la resolución del sistema de detección, fue posible obtener los siguientes espesores, después de analizar los espectros resultantes de irradiar las muestras con protones de 500, 600 y 700 keV:

Oro/Cobre:	$t = 1310 \pm 110$ Å
Oro/Plata:	$t = 1300 \pm 100$ Å
Oro/Tungsteno:	$t = 1310 \pm 110$ Å

Los valores usados para el frenamiento son los de Jenni. De nueva cuenta, los valores están dentro de los intervalos de error experimental.

Como tercer método de comparación, se utiliza el referente a

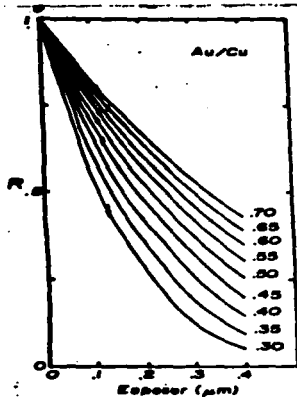


Fig. 6.14. Curvas de la función R vs. esp. en μm , como función del espesor de la película, para el sistema oro-cobre. Las energías de incidencia de los protones aparecen a la derecha de las curvas.

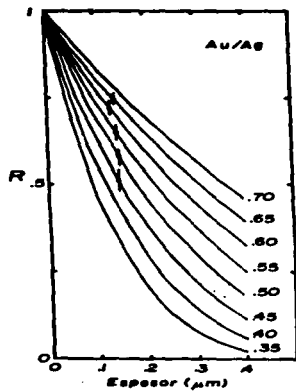


Fig. 6.15. Curvas de la función R vs. esp. en μm , como función del espesor de la película, para el sistema oro-plata. Las energías de incidencia de los protones aparecen a la derecha de las curvas.

PIAE, utilizando el cociente de intensidades con y sin película, que ya fue ampliamente discutido en el capítulo 5. Utilizando el frenamiento de Janni, y la sección eficaz de ionización calculada con la teoría ECPBSK, es posible dibujar las gráficas de R como función del espesor de la película de oro, para los tres sistemas de interés. Dichas gráficas aparecen en las figuras 6.14 a 6.16, para oro-cobre, oro-plata, y oro-tungsteno, respectivamente. Se aparecen en ellas los resultados experimentales, utilizando diferentes energías en cada caso. Cada punto de un espesor, y al tomar un promedio para cada sistema, da como resultado para esta

magnitud:
 Oro/Cobre: $t = 1210 \pm 95 \text{ \AA}$
 Oro/Plata: $t = 1390 \pm 102 \text{ \AA}$
 Oro/Tungsteno: $t = 1258 \pm 61 \text{ \AA}$.

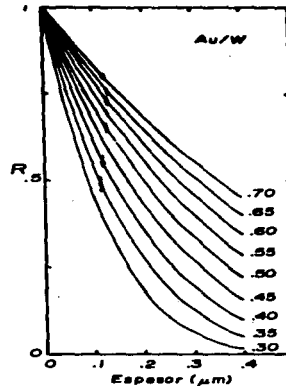


Fig. 6.16. Curvas de la función R vs. esp. en μm , como función del espesor de la película, para el sistema oro-tungsteno. Las energías de incidencia de los protones aparecen a la derecha de las curvas.

Las líneas medidas para cobre y Plata fueron las K_{α} , mientras que para el tungsteno se usó la L_{α} . Una vez más los resultados son relativamente congruentes.

Otro método de comparación es el de la razón β/α , sugerido por Ahlberg [51], ya descrito en el capítulo 3. Para ello también es factible calcular curvas de esta cantidad como función del espesor de la película. Lamentablemente, la técnica no puede aplicarse al sistema oro-tungsteno, ya que la línea L_{α} de oro interfiere con la línea L_{β} de tungsteno, y esto hace imposible efectuar la integración para esta última línea. No obstante, si es posible aplicarla a los sistemas oro-cobre y oro-plata. Las curvas

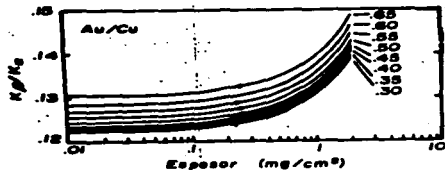
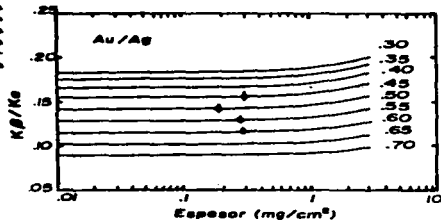


Fig. 6.17. Cociente $K\beta/K\alpha$ para el sistema oro-cobre, como función del espesor de la película. La energía de incidencia del protón, en eV, aparece a la derecha de las curvas.

Fig. 6.18. Cociente $K\beta/K\alpha$ para el sistema oro-plata, en función del espesor de la película. La energía de incidencia del protón se muestra a la derecha de las curvas.



se muestran en las figs. 6.17 y 6.18. Junto con los puntos experimentales. Como en este caso se requiere de la calibración del sistema de detección, se emplea la curva de eficiencia obtenida por Montenegro et al. [101] para el sistema usado. El programa de computadora usado para calcular las curvas puede verse en el apéndice e. Este programa utiliza el método sugerido por Faul [102] para calcular las secciones eficaces de ionización ECPBA, que solo es aplicable a capas K. La geometría del dispositivo experimental es la misma que la del método de la función R (ángulo de incidencia y detección de 45°). Debe notarse que en las figs. 6.17 y 6.18 el espesor se da en unidades de mg/cm^2 . Para pasar a cm, sólo hay que dividir el espesor entre la densidad del elemento. El comportamiento de las curvas es radical-

mente distinto en ambos casos, situación debida a la autoabsorción de las líneas β y α en los sustratos. En el cobre la línea $K\beta$ se absorbe menos que la $K\alpha$, mientras que en la plata es a la inversa. Esto hace que en el cobre el cociente β/α aumente al aumentar la energía de incidencia, y en la plata disminuya dicho cociente. Los resultados para los espesores son:
 Oro/Cobre: $t = 1219 \pm 1e0$ Å
 Oro/Plata: $t = 1374 \pm 2e5$ Å.

Como es fácil concluir, se tienen de nuevo resultados dentro de los intervalos de incertidumbre de los otros casos.

6.4. DISCUSION.

En las secciones 6.2 y 6.3 se obtuvo una serie de mediciones de los espesores de películas de oro evaporadas en sustratos de cobre, plata y tungsteno. La tabla 6.1 resume estos resultados.

TABLA 6.1. COMPARACION DE ESPESORES MEDIDOS CON VARIAS TECNICAS.

Sistema	Evaporación*	Dektak*	RBS	Función K	β/α	-1 dn/dl
Au/Cu	1290±60	1200±130	1310±110	1213±95	1219±1e0	1410±150
Au/Ag	1270±60	1190±110	1300±100	1394±102	1370±270	----
Au/W	1270±60	1180±110	1310±110	1240±60	----	1170±1e0 1270±130

* Con corrección por el espesor del sustrato.

Los números que aparecen en la tabla 6.1 permiten ver que hay una buena concordancia entre todos los métodos utilizados, y se puede decir que es excelente en el caso del sistema oro-tungsteno. Es conveniente ahora, por ello, hablar de las ventajas y desventajas prácticas cada una de ellas presentes, ya que todas ellas parecen dar buenos resultados.

El uso de la geometría de la fuente de evaporación responde a una aproximación muy burda, que es aproximar al filamento por una fuente puntual. Por tanto, no es conveniente usarla como una medida absoluta, sino sólo como una referencia en cuanto a órdenes de magnitud.

La utilización del perfilómetro en esta ocasión requirió de la corrección por la geometría durante la evaporación, pues lo que se midió en él fue el espesor de la película depositada sobre el vidrio, el cual, además presentaba una superficie rugosa. Todo esto oscurece los resultados, pero podrían mejorarse sustancialmente teniendo el escalón sobre la misma muestra, y que el sustrato estuviera pulido previamente. Aparte de esto, los resultados son confiables, sin dejar de señalar que al aguja del perfilómetro daña la muestra irreversiblemente.

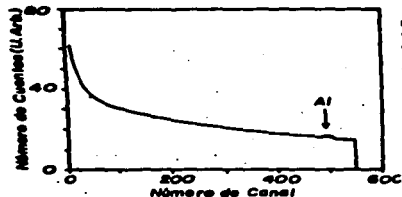


Fig. 5.19. Simulación por Computadora de un espectro de RBS para una película de aluminio de 1000 Å en un sustrato de tungsteno. Se usan protones de 400 keV, incidiendo a 45° de la normal, y detectados a un ángulo de 100° con la dirección de incidencia.

Los espesores medidos con RBS son congruentes entre sí, y quedan contenidos dentro de los intervalos de incertidumbre del resto de las técnicas. Esto reafirma la bondad de este procedimiento para medir espesores de películas pesadas sobre sustratos ligeros. Debe señalarse, sin embargo, que en las energías a las cuales se está trabajando, las películas ligeras en sustratos pesados no pueden medirse muy confiablemente, a pesar de que exista la posibilidad de medir el corrimiento en la energía, tal como se explicó en la sección 2.4.3. En la fig. 5.19 se muestra un espectro por RBS para una película de aluminio en un sustrato de tungsteno, obtenido mediante una simulación por computadora, por L. Rodríguez [29]. En el espectro aparece señalado el pico debido a la dispersión en el aluminio, y puede notarse que es sumamente pequeño, por lo cual se ve que es necesario recurrir al corrimiento de la energía de los iones dispersados en el tungsteno. La dificultad aparece a energías bajas, donde la determinación de

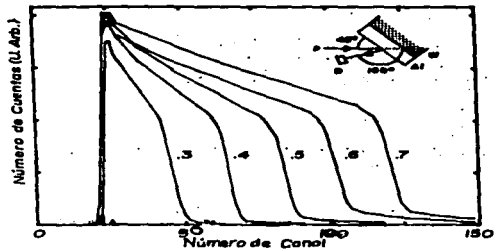


Fig. 5.20. Espectros experimentales por RBS para una película de aluminio en un sustrato de tungsteno. La energía de incidencia de los protones se muestra junto a cada espectro, al igual que la geometría del experimento.

esta energía es prácticamente imposible, como puede verse en la fig. 5.20, que presenta espectros experimentales del sistema ya dicho.

El sistema aluminio-tungsteno ya había sido estudiado en el capítulo 5, en el cual se demostró que PIXE da buenos resultados en cuanto a la medición del espesor de la película, usando el método de la función R . Este último método también ha sido probado con otros sistemas -los que se han presentado en este capítulo- y da buenos resultados. Como ya se mencionó, el procedimiento tiene la ventaja de no depender de la eficiencia del sistema de detección, aunque requiere del uso de patrones. Además, las mejores resoluciones se alcanzan a energías bajas, y es aplicable a todo tipo de sistema, siempre y cuando la línea de rayos α característica del sustrato (o al menos la de un elemento presente en él), sea detectable.

Un método que no tiene la desventaja de necesitar un patrón es el del cociente β/α , pues ambas líneas se producen en la misma muestra. Aparte de esto, si exige el conocimiento de la curva de

eficiencia del sistema de detección. A causa de esto, el método puede tener serias complicaciones, dado que dicha curva de eficiencia podría tener variaciones importantes al transcurrir el tiempo. Otro fuerte problema, ya señalado por Ahlberg [51], es que el método es sumamente sensible a los errores experimentales. Esto se entiende mejor al observar las figs. 4.17 y 4.18, puesto que la pendiente de las curvas es sumamente pequeña, cosa que provoca una gran incertidumbre en la determinación del espesor. Por otra parte, mientras el método de la función R sólo hace uso de una línea, el de la razón β/α emplea dos, y si ocurren interferencias, como en el caso del sistema oro-tungsteno, el método no es aplicable.

El nuevo método, propuesto en el presente trabajo, tiene una serie de ventajas. Como en el caso de la función R , sólo necesita una línea y no depende de la eficiencia. Además, no precisa de un patrón, ventaja que comparte con la razón β/α . No obstante, también tiene desventajas. La más evidente es debe a la gran complejidad matemática, que de ninguna manera debe subestimarse, puesto que obviamente eleva los errores experimentales. La segunda dificultad radica en el hecho de que la energía usada debe escogerse de acuerdo al orden de magnitud de los espesores. En este trabajo, gracias a la determinación de la geometría de la fuente de evaporación, fue factible escoger el orden de magnitud de las energías a usar. Pero cuando no se conoce a priori cuál es el orden de magnitud del espesor, sería necesario usar una serie de valores para la energía, y hacer el análisis para cada uno de ellos. Por otro lado, cuando los espesores por medir son pequeños, tienen que usarse energías del ion muy bajas, lo cual tiene como consecuencia poca producción de rayos X , y un aumento subsiguiente en el error relativo. El extremo aparece cuando la línea de rayos X no puede siquiera ser detectada, como ocurrió en el sistema oro-plata. Además, los tiempos de conteo se hacen incommensurablemente largos.

Un punto que no puede dejar de señalarse es la fluorescencia secundaria. Como ha sido posible notar a lo largo de todo este trabajo, no se ha considerado la manera en que esta excitación

secundaria puede afectar los cálculos realizados. El estudio de estos efectos deberá hacerse en trabajos posteriores, ya que puede complementar y aclarar algunos de los resultados presentados aquí.

6.5. CONCLUSIONES.

Los resultados alcanzados con FIXE como método de medición de espesores son alentadores. Se ha encontrado que los valores que se obtienen con esta técnica coinciden, dentro de un cierto intervalo de error, con los medidos a través de otros procedimientos.

En ciertas situaciones, FIXE ofrece mejores respuestas, como en el caso de RES a bajas energías aplicado a sistemas binarios de elementos ligeros en sustratos pesados. Por esto, FIXE queda establecido como un método alternativo, pues resulta ser más universal, enfatizando que se habla de bajas energías.

Por otra parte, al comparar las variantes que exhibe FIXE para medir espesores, con gran parte de los métodos que se discutieron en el capítulo 2, se encuentra que casi siempre FIXE es una opción para obtener buenos resultados, sin dejar de pensar en que sigue mostrando limitaciones. Estos obstáculos, sin embargo, deben tratar de superarse con trabajos futuros, encaminados a depurar la riqueza que FIXE presenta por sí misma.

En la diversidad de formas que FIXE se usa con el fin de cuantificar espesores, se ha podido percibir que el factor principal para poder llevar al cabo esta acción es la variación que muestra la sección eficaz de ionización a energías bajas. Si esta dependencia con la energía del proyectil fuera menos acentuada, FIXE difícilmente podría ser usada con tal fin.

Es por esto que el objetivo que se estableció al principio de este trabajo -encontrar aplicaciones a la variación de la sección eficaz de ionización, a energías bajas del proyectil- ha quedado cumplido satisfactoriamente.

APENDICES

APENDICE I.

FORMA ANALITICA DE LAS FUNCIONES $|F_{\nu\mu}(Q)|^2$.

M. A. Beths [e1] calcula la función $|F_{\nu\mu}(Q)|^2$ para transiciones de la capa K al continuo en términos de funciones elementales:

$$|F_{\nu\mu}(Q)|^2 d\omega = 2^{\nu} (1 - e^{-2\pi\nu/k}) (Q [(Q + \frac{1}{2}k^2 + \frac{1}{2}) / ((Q - k^2 + 1)^2 + 4k^2)^{\frac{1}{2}}])^{\nu} \times \exp(-2/k \arctan[2k/(Q - k^2 + 1)]) d\omega \quad (A1.1)$$

donde $\nu = A^2 + 1/2$. Asimismo, Choi et al. [e2], obtienen las correspondientes a las capas L1

$$|F_{\nu L_1}(Q)|^2 = A(Q, k) (Q^3 - (\frac{16}{3} + \frac{16}{3}k^2)Q^2 + (\frac{16}{3}k^2 + \frac{16}{3}k^4)Q^2 + (\frac{16}{3} - \frac{16}{3}k^2 - \frac{16}{3}k^4 - 2k^2)Q^2 + \frac{67}{330} - \frac{16}{3}k^2 - \frac{16}{3}k^4) \times (\frac{16}{3} - \frac{16}{3}k^2 - \frac{16}{3}k^4 - 2k^2) \quad (A1.2)$$

$$|F_{\nu L_2}(Q)|^2 = |F_{\nu L_1}(Q)|^2 = A(Q, k) (\frac{16}{3}Q^4 - (\frac{16}{3} - 2k^2)Q^3 + (\frac{16}{3} - \frac{16}{3}k^2 - \frac{16}{3}k^4)Q^2 + (\frac{16}{3}k^2 - \frac{16}{3}k^4)Q + (\frac{16}{3} - \frac{16}{3}k^2 + \frac{16}{3}k^4 + \frac{16}{3}k^2) \quad (A1.3)$$

$$A(Q, k) = \frac{2^{\nu} \exp(-2/k \arctan[k/(Q - k^2 + 1/2)])}{(1 - e^{-2\pi\nu/k}) [(Q - k^2 + 1/2)^2 + k^2]^{\nu}} \quad (A1.4)$$

en las cuales $\nu = A^2 + 1/2$. Para la capa L completa, Walske [e4] obtiene:

$$|F_{\nu L}(Q)|^2 d\omega = 2^{\nu} (1 - e^{-2\pi\nu/k})^{-1} (Q [Q^3 - (\frac{16}{3}k^2 + \frac{16}{3})Q^2 + (\frac{16}{3}k^4 - \frac{16}{3}k^2 + \frac{16}{3})Q + (\frac{16}{3}k^2 - \frac{16}{3}k^4 + \frac{16}{3})])^{\nu} \times \exp(-2/k \arctan[k/(Q - k^2 + 1/2)]) d\omega \quad (A1.5)$$

Así también $\nu = A^2 + 1/2$. En el caso de capas N, se tiene:

$$|F_{\nu N}(Q)|^2 = (2^{\nu}/3^{\nu}) Q \exp(-2/k \arctan[\frac{2k}{Q - k^2 + 1/2}]) \times (1 - e^{-2\pi\nu/k})^{-1} [(Q - k^2 + 1/2)^2 + k^2]^{-\nu} \sum_{l=0}^{N-1} C_l^{(N)} k^l Q^l \quad (A1.6)$$

donde $\nu = A^2 + 1/2$ y $N = 3s, 3p, 3d$. Los coeficientes $C_l^{(N)}$ se encuentran en las tablas A1.1 - A1.3. Para la capa N completa, la

expresión es:

$$|F_{\nu N}(Q)|^2 = (2^{\nu}/3^{\nu}) Q \exp(-2/k \arctan[\frac{2k}{Q - k^2 + 1/2}]) \times (1 - e^{-2\pi\nu/k})^{-1} [(Q - k^2 + 1/2)^2 + k^2]^{-\nu} \quad (A1.7)$$

$$\times [Q^3 + f_1(k)Q^2 + f_2(k)Q^2 + f_3(k)Q + f_4(k)] \quad (A1.7)$$

$$f_1(k) = -43/3^{\nu} - (11/3)k^2 \quad (A1.8)$$

$$f_2(k) = 516/3^{\nu} + (412/3^{\nu})k^2 + (14/3)k^4 \quad (A1.9)$$

$$f_3(k) = -442/3^{\nu} - (310/3^{\nu})k^2 - (122/3^{\nu})k^4 - 2k^6 \quad (A1.10)$$

$$f_4(k) = 1743/3^{\nu} + (1460/3^{\nu})k^2 + (290/3^{\nu})k^4 + (4/3)k^6 - (1/3)k^8 \quad (A1.11)$$

$$f_5(k) = \frac{377}{3^{2\nu}} + \frac{2431}{3^{2\nu}}k^2 + \frac{1750}{3^{\nu}}k^4 + \frac{60}{3^{\nu}}k^6 + \frac{71}{3^{\nu}}k^8 + \frac{1}{3^{\nu}}k^{10} \quad (A1.12)$$

Estos resultados fueron obtenidos por Choi [e3].

TABLE A11. C₁⁽¹⁹⁾ $i_{\max} = j_{\max} = 9$.

$j \setminus i$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0	$\frac{49}{3^{10}}$	$\frac{3073}{3^{10}}$	$\frac{3100}{3^{10}}$	$\frac{5324}{3^{10}}$	$\frac{17054}{3^{10}}$	$\frac{1294}{3^9}$	$\frac{1e74}{3^9}$	$\frac{1300}{3^7}$	$\frac{59}{3^4}$	$\frac{1}{3}$
1	$\frac{433}{3^8}$	$\frac{925e}{5 \cdot 3^{17}}$	$\frac{-4828}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{-140008}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{-1e7942}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{-33e5e}{5 \cdot 3^9}$	$\frac{-3103e}{5 \cdot 3^7}$	$\frac{-29e}{3^4}$	$\frac{-5}{3}$	
2	$\frac{17e44}{5 \cdot 7 \cdot 3}$	$\frac{8908}{3^8}$	$\frac{e251e}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{194444}{5 \cdot 7 \cdot 3^{18}}$	$\frac{e095e}{5 \cdot 3^9}$	$\frac{21524}{5 \cdot 3^7}$	$\frac{7e}{3^8}$	$\frac{4}{3}$		
3	$\frac{1444}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{e72e8}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{328148}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{3e0992}{5 \cdot 3^9}$	$\frac{1e81e4}{5 \cdot 3^7}$	$\frac{1544}{3^8}$	$\frac{28}{3}$			
4	$\frac{-1036}{3^{18}}$	$\frac{-5e1554}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{-1e84e8}{3^9}$	$\frac{-40e87e}{5 \cdot 3^7}$	$\frac{-4910}{3^8}$	$\frac{-28}{3}$				
5	$\frac{2954}{5 \cdot 3^9}$	$\frac{158e1e}{3^9}$	$\frac{45e844}{5 \cdot 3^7}$	$\frac{248}{3}$	$\frac{154}{3}$					
6	$\frac{-4588}{3^7}$	$\frac{-1e348}{3^9}$	$\frac{-492e}{3^8}$	$\frac{-140}{3}$						
7	$\frac{5e60}{3^9}$	$\frac{1910}{3^8}$	$\frac{7e}{3}$							
8	$\frac{-103}{3^9}$	$\frac{-23}{3}$								
9	$\frac{1}{3}$									

TABLE A12. C₁⁽¹⁹⁾ $i_{\max} = j_{\max} = 8$.

$j \setminus i$	0	1	2	3	4	5	6	7	8
0	$\frac{152}{3^{10}}$	$\frac{2992}{3^{10}}$	$\frac{2800}{3^{10}}$	$\frac{145e}{3^{10}}$	$\frac{12320}{3^{10}}$	$\frac{784}{3^9}$	$\frac{784}{3^7}$	$\frac{400}{3^6}$	$\frac{8}{3^5}$
1	$\frac{448}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{97e0}{3^{10}}$	$\frac{7945e}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{e7e48}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{327e8}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{8992}{5 \cdot 3^9}$	$\frac{224}{3^8}$		
2	$\frac{2384}{5 \cdot 7 \cdot 3^{18}}$	$\frac{-82984}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{-27e608}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{-2098910}{5 \cdot 7 \cdot 3^{18}}$	$\frac{-592}{5 \cdot 3^9}$	$\frac{-577e}{3^8}$	$\frac{132}{3^8}$		
3	$\frac{25864}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{407e8}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{255808}{5 \cdot 3^{18}}$	$\frac{19705e}{5 \cdot 3^9}$	$\frac{3528}{3^8}$	$\frac{128}{3^8}$			
4	$\frac{14048}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{25744}{3^{10}}$	$\frac{529e}{3^9}$	$\frac{-e5e}{3^8}$	$\frac{80}{3^8}$				
5	$\frac{-1088}{3^7}$	$\frac{-32e08}{3^9}$	$\frac{-1153e}{3^8}$	$\frac{-25e}{3^8}$					
6	$\frac{4880}{3^7}$	$\frac{10e40}{3^8}$	$\frac{800}{3^8}$						
7	$\frac{-320}{3^4}$	$\frac{-128}{3^8}$							
8	$\frac{8}{3}$								

TABLA A13. C_{ij}¹⁰⁰ i_{max} = j_{max} = 7.

j \ i	0	1	2	3	4	5	6	7
0	$\frac{170}{3^{10}}$	$\frac{8810}{3^{10}}$	$\frac{6800}{3^{10}}$	$\frac{2800}{3^{10}}$	$\frac{17080}{3^{10}}$	$\frac{2288}{3^{10}}$	$\frac{10}{3^9}$	$\frac{80}{3^7}$
1	$\frac{37804}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{473804}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{263448}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{660544}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{283328}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{18784}{5 \cdot 3^9}$	$\frac{3616}{5 \cdot 3^7}$	
2	$\frac{656}{7 \cdot 3^{10}}$	$\frac{490382}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{318688}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{-218912}{5 \cdot 7 \cdot 3^{10}}$	$\frac{-70928}{7 \cdot 5 \cdot 3^9}$	$\frac{-7184}{5 \cdot 3^7}$		
3	$\frac{3968}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{-124096}{3^{10}}$	$\frac{-579392}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{-33344}{3^9}$	$\frac{-7744}{5 \cdot 3^8}$			
4	$\frac{-87952}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{222224}{5 \cdot 3^{10}}$	$\frac{297776}{5 \cdot 3^9}$	$\frac{16496}{5 \cdot 3^7}$				
5	$\frac{5032}{5 \cdot 3^8}$	$\frac{-24464}{3^8}$	$\frac{6176}{5 \cdot 3^7}$					
6	$\frac{208}{3^7}$	$\frac{-16}{3^6}$						
7	$\frac{512}{3^6}$							

APENDICE 2.
EJEMPLO DE CALCULO DE SECCION EFICAZ DE IONIZACION POR MEDIO DE LA
TEORIA ECPSSR

Se calculará la sección de ionización para capas L de plata.
por protones de 0.09 MeV. Se emplean unidades atómicas.

$$Z_1 = 1 \quad Z_2 = 47$$

$$Z_{BL} = Z_2 - 4.15 = 42.85$$

$$M_1 = 1 \text{ uma} = 1822.887 \text{ Unidades Atómicas (UA)}$$

$$M_2 = 107.87 \text{ uma} = 196633 \text{ UA}$$

$$M = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} = 1806.143 \text{ UA}$$

$$v_{BL} = Z_{BL} v = 21.425 \text{ UA}$$

$$E_1 = 0.09 \text{ MeV} \quad E_2 = 3307.413 \text{ UA} \quad (1 \text{ UA} = 27.2116 \text{ eV})$$

$$U_{BL1} = 3805.8 \text{ eV} = 139.9 \text{ UA} \quad U_{BL2} = 3523.7 \text{ eV} = 129.5 \text{ UA}$$

$$U_{BL} = 3381.1 \text{ eV} = 123.1 \text{ UA}$$

$$v_1 = 137.036 = [1 - (1 + E_1(\text{MeV})/931.498 M_1(\text{uma}))^{-2}]^{1/2} = 1.905 \text{ UA}$$

$$\eta_L = 0.00197a \quad \eta_L = 2E_1 / (M_2 Z_{BL}^2)$$

$$\sigma_{OL} = 2.1 \times 10^{-22} \quad \text{Ec. (4.42)}$$

$$\sigma_{L1} = 0.0094; \quad \sigma_{L2} = 0.5442; \quad \sigma_{L3} = 0.5306$$

$$\sigma_L = 2n^2 U_{BL}^2 / Z_{BL}^2$$

$$\epsilon_{L1} = 0.2918; \quad \epsilon_{L2} = 0.3152; \quad \epsilon_{L3} = 0.3314$$

$$\text{Ec. (4.7)}$$

$$d = 7.17 \times 10^{-8} \quad d = 2.2 / (Mv_1^2)$$

$$q_{OL1} = 73.42; \quad q_{OL2} = 47.98; \quad q_{OL3} = 64.65$$

$$\text{Ec. (4.51)}$$

$$C_{L1} n_2 / \epsilon_{L1} = 10.28; \quad C_{L2} n_2 / \epsilon_{L2} = 7.93; \quad C_{L3} n_2 / \epsilon_{L3} = 7.54$$

$$h_{L1} = 1.5e-8; \quad h_{L2} = 2.1e-8; \quad h_{L3} = 4.5e-8$$

$$\text{Ecs. (4.92), (4.93)}$$

$a_{L_1} = 0.87871$ $a_{L_2} = 0.97931$ $a_{L_3} = 0.9752$
 Ec. (4.87)-(4.91)
 $C_{L_1} = 1.04731$ $C_{L_2} = 1.08101$ $C_{L_3} = 1.0848$
 Ec. (4.88)
 $y_{L_1} = 0.04701$ $y_{L_2} = 0.04651$ $y_{L_3} = 0.443$
 Ec. (4.85), (4.86)
 $a_{L_1}^2 = 1.07431$ $a_{L_2}^2 = 1.05171$ $a_{L_3}^2 = 1.0493$
 Ec. (4.84)
 $z_{L_1} = 0.98111$ $z_{L_2} = 0.97841$ $z_{L_3} = 0.9794$
 Ec. (4.101)
 $2nd_{BL} C_{L_1} / z_{L_1} (1+z_{L_1}) = 1.8170$
 $2nd_{BL} C_{L_2} / z_{L_2} (1+z_{L_2}) = 1.7109$
 $2nd_{BL} C_{L_3} / z_{L_3} (1+z_{L_3}) = 1.6304$
 $C_{BL_1}^2 = 0.1441$ $C_{BL_2}^2 = 0.1371$ $C_{BL_3}^2 = 0.150$
 Ec. (4.85), (4.99)
 $a_{L_1}^2 (z_{L_1} / C_{L_1}) \eta_{L_1} / (C_{L_1} \phi_{L_1})^2 = .00137$
 $a_{L_2}^2 (z_{L_2} / C_{L_2}) \eta_{L_2} / (C_{L_2} \phi_{L_2})^2 = .00163$
 $a_{L_3}^2 (z_{L_3} / C_{L_3}) \eta_{L_3} / (C_{L_3} \phi_{L_3})^2 = .00187$
 $C_{L_1} \phi_{L_1} = 0.25041$ $C_{L_2} \phi_{L_2} = 0.25041$ $C_{L_3} \phi_{L_3} = 0.2504$
 $\phi_{L_1}^2 \text{PVB} (a_{L_1}^2 (z_{L_1} / C_{L_1}) \eta_{L_1} / (C_{L_1} \phi_{L_1})^2) = 5.33 \times 10^{-28} \text{ cm}^2$
 $\phi_{L_2}^2 \text{PVB} (a_{L_2}^2 (z_{L_2} / C_{L_2}) \eta_{L_2} / (C_{L_2} \phi_{L_2})^2) = 5.14 \times 10^{-27} \text{ cm}^2$
 $\phi_{L_3}^2 \text{PVB} (a_{L_3}^2 (z_{L_3} / C_{L_3}) \eta_{L_3} / (C_{L_3} \phi_{L_3})^2) = 1.70 \times 10^{-28} \text{ cm}^2$
 $\phi_{L_1}^2 \text{PVB} = .00779 \text{ b1}$ $\phi_{L_2}^2 \text{PVB} = .00125 \text{ b1}$
 $\phi_{L_3}^2 \text{PVB} = .00509 \text{ b}$

APENDICE 3. PROGRAMA PARA CALCULO DE LA FUNCION R.

```

rayosX:      'Programa RAYOSX
CLS
OPEN "aidatos1.dat" FOR INPUT AS #1      'Lee Datos.
OPEN "aidatos2.dat" FOR INPUT AS #2
INPUT "¿Elemento de la Película?": pel;
INPUT "¿Elemento del Sustrato?": sus;
WHILE NOT EOF(1)
  INPUT #1, elem1, z, ro, na, ze, ka, ip, uk, u11, u12, u13
  INPUT #2, elem2, z0, #1, #2, #0, r1, r2, sig0, sig1, sig2
  IF pel = elem1 THEN GOSUB datpel1
  IF sus = elem1 THEN GOSUB datsus1
  IF pel = elem2 THEN GOSUB datpel2
  IF sus = elem2 THEN GOSUB datsus2
  IF z1 <> 0 AND z2 <> 0 THEN 5
WEND
IF z1 = 0 THEN PRINT "No Hay Información Para el "; pel; END
IF z2 = 0 THEN PRINT "No Hay Información Para el "; sus; END
5 CLOSE

INPUT "¿Qu Línea Va a Utilizar (K, L, M)": line
IF (line = "K") THEN
  u = uk2 / 1000000!
  ELSEIF (line = "L") THEN
  u = u12 / 1000000!
  ELSEIF line = "M" THEN
  PRINT "No Hay Información Sobre Líneas M": END
END IF
PRINT "¿Coeficiente de Absorción de Línea "; line; " de ";
PRINT sus; " en "; pel;
PRINT " (cm²/g)":
INPUT mua
PRINT "¿Coeficiente de Absorción de Línea "; line; " de ";
PRINT sus; " en "; sus;
PRINT " (cm²/g)":
INPUT mub
mua = mua * ro1; mub = mub * ro2
l = 1836; pi = 3.141592; e0 = 1; ih = 13.6 * .000001
INPUT "¿Qu Fórmula Para el Frenamiento Usará (Janni, MCV)": fren;
IF fren = "Janni" THEN nren = 1 ELSE nren = 2
IF fren = "MCV" THEN GOSUB parcv
6 INPUT "¿Ángulos de Incidencia y Salida (°)": ti, ts
ti = ti * pi / 180; ts = ts * pi / 180
INPUT "¿Tamaño del Intervalo de Integración (cm)": ds;
INPUT "¿Unidad de los Archivos de Resultados": unis;
INPUT "¿Nombre de los Archivos de Resultados": nom;
      'Define frenamiento Janni.
DEF fnej(z) = EXP(is0 * sa1 * LOG(z)) + sa2 * LOG(z) ^ 2;
DEF fnej(z) = EXP(is0 * sb1 * LOG(z)) + sb2 * LOG(z) ^ 2;

```



```

fac = 1 / (1 + ih); a0 = 5.3E-09      'Define frenamiento MCV.
DEF fnsm (k, ip, ze, z, re, y)
  STATIC a, b, c, d, ee, f, g, beta
  a = 8*pi*a0^2*ih; b=asih/ip; c=asb; d=ka/a + b / 2 + ze / (0 + z)
  ee=8*2*d/(z^1.4+b*d^2*d^2); f = c + ee ^ 3 / d
  beta = a / (0.5616 + z); g = 2 * beta / (3 + c)
  mev1=SQRT((f+e)*EXP(-SQRT(fac*y)))+asLOG(1 + b + yfac) / (y + fac)
  mev2=-a/(1+d*y+fac) + f + y ^ 2 + fac ^ 2 / (1 + ee + fac + y) ^ 3
  mev3=-beta+(f+fac*y)^1.5/(0 + b ^ 2 + (1 + g + fac + y) ^ 4)
  fnsm = (mev1 + mev2 + mev3) * da = .000001
END DEF

DEF fnsc (z) = EXP(sig0 + sig1 * LOG(z) + sig2 * LOG(z) ^ 2)

7 READ e0, e0e      'Comienza cálculo de
IF e0 = 0 THEN END 'la función R.
arsh = unio + nese + e0e + ".dat"
OPEN arsh FOR OUTPUT AS #3
PRINT #3, peio; "/"; suse.
PRINT peio; "/"; suse.
PRINT #3, USING "EO = 0.000 MeV "; e0
PRINT USING "EO = 0.000 MeV "; e0
FOR thkn = 250 TO 5000 STEP 250
  thk = thkn * 1E-09; dx = thk / 250; en = e0
  FOR k = 0 TO thk STEP dx
    IF nfrn=1 THEN se=fnsc(jen) ELSE se=fnsc(ka1, ip1, ze1, z1, re1, en)
    en = en - se * dx / COS(ang)
  NEXT k
  e = en; ipat = 0
  FOR sp = 0 TO .05 STEP dx
    IF nfrn=1 THEN se=fnsc(jen) ELSE se=fnsc(ka2, ip2, ze2, z2, n2, e)
    at = EXP(-sub * sp / COS(ts))
    ipat = ipat + at * fnsc(e)
    e = e - se * dx / COS(ti)
    IF sp = 0 THEN fi = ipat
    IF e < u THEN fg = at * fnsc(e)
    IF e < u THEN EXIT FOR
  NEXT sp
  intp = (ipat - (fi + fg) / 2) * dx
  e = e0; ipat = 0
  FOR spt = 0 TO .05 STEP dx
    IF nfrn=1 THEN se=fnsc(jen) ELSE se=fnsc(ka2, ip2, ze2, z2, n2, e)
    at = EXP(-sub * spt / COS(ts))
    ipat = ipat + at * fnsc(e)
    e = e - se * dx / COS(ti)
    IF sp = 0 THEN fip = ipat
    IF e < u THEN fsp = at * fnsc(e)
    IF e < u THEN EXIT FOR
  NEXT spt
  intpat = (ipat - (fip + fsp) / 2) * dx
  r = intp / intpat
  PRINT #3, USING " t = 0000 A "; thkn * 1E+09
  PRINT USING " t = 0000 A "; thkn * 1E+09;
  PRINT #3, USING " R = 0.000 "; r
  PRINT USING " R = 0.000 "; r
NEXT thkn
CLOSE #3
IF e0 <> 0 THEN 7

```

APENDICE 3

```

END      'Fin del cálculo.

'Subrutinas de lectura de datos.
datpe11:
s1=z; ro1=r0; n1=n0; ze1=ze; ka1=ka; ip1=ip; uk1=uk; ul1=ul1
ul21 = ul2; ul31 = ul3; ul = (ul1 + ul2 + 2 * ul3) / 4
RETURN 1

datpe12:
sa0 = a0; sa1 = s1; sa2 = s2; ra0 = r0; ra1 = r1; ra2 = r2
sig0 = sig0; sig1 = sig1; sig2 = sig2
RETURN 3

datasu1:
z2=z; ro2=r0; n2=n0; ze2=ze; ka2=ka; ip2=ip; uk2=uk; ul2=ul1
ul22 = ul2; ul32 = ul3; ul2 = (ul1 + ul2 + 2 * ul3) / 4
RETURN 2

datasu2:
sb0 = s0; sb1 = s1; sb2 = s2; rb0 = r0; rb1 = r1; rb2 = r2
sig0 = sig0; sig1 = sig1; sig2 = sig2
RETURN 4

Parmov:
s1=8*pi*a0^2*ih; b1=asih/ip1; c1=a1+b1; d1=ka1/c1+b1/2+ze1/(0+ze1)
e1=8*pi*a0^2*d1/(z1^1.4+b1*d1^2*d1^2); f1=c1+e1^3/d1
beta1 = a1 / (0.5616 + z1); g1 = 2 * beta1 / (3 + c1)
a2=8*pi*a0^2*ih; b2=asih/ip2; c2=a2+b2; d2=ka2/c2+b2/2+ze2/(0+ze2)
e2=8*pi*a0^2*d2/(z2^1.4+b2*d2^2*d2^2); f2=c2+e2^3/d2
beta2 = a2 / (0.5616 + z2); g2 = 2 * beta2 / (3 + c2)
RETURN 6

DATA .700,700k,.850,850k,.900,900k,.950,950k,.950,950k,.950,950k,.950,950k
DATA .400,400k,.350,350k,.300,300k,0,0k

```

APENDICE 3

APENDICE 4. PROGRAMA PARA CALCULO DE LA FUNCION --1 AN/d1.

piethk: 'Programa PIETHK

```

die 'Lee los datos para el cálculo
dia ea(5),eb(5),sig(5),sigb(5),ra(5),rb(5)
input "¿Unidad de los Archivos de Datos?";arve
archi1=arve+"datos1.dat" ; archi2=arve+"datos2.dat"
open archi1 for input as f1
open archi2 for input as f2
input "Elementos Película, Sustrato";pele,suse
while not eof(1)
  input01, elem10,x,ze,na,ze,ka,ip,uk,u11,u12,u13 'Lee parámetros
  'de frenamiento
  if pele = elem10 then gosub datpele1 'de según Jenni y
  1 if suse = elem10 then gosub datpele1 'MCV, sección
  2 input02, elem20,e0,s1,s2,r0,r1,r2,sig0,sig1,sig2 'de ionización
  3 if suse = elem20 then gosub datpele2 'ECPSSR.
  4 if z1<>0 and z2<>0 then 5
wend
if z1=0 then print "No Hay información para el ";pele : end
if z2=0 then print "No Hay información para el ";suse : end
5 else

print "Coeficiente Absorción en ";pele; 'Lee coeficien-
input sue 'tes de absor-
sue = sue + r01 'ción.
print "Coeficiente Absorción en ";suse;
input sub
sub = sub + r02
input "Angulo entre Mag y Detector";fi 'Parámetros
input "¿Usa línea va a Utilizar (K,L)";line 'del experimen-
if line="k" or line="L" then u=uk2/1e6 else u=uib/1e6 'to.
pi=3.141592 : e0 = 1

def fnf(an,en)
a = sue*cos(abs(fi-an)) 'Define la
b = sub*cos(an)/cos(abs(fi-an)) 'función por
stepb = exp(-a(1)+a(1)*log(en)+a(2)*log(en)^2) 'calcular.
stepb = exp(-a(0)+a(1)*log(en)+a(2)*log(en)^2)
sigma = exp(-a(0)+a(1)*log(en)+a(2)*log(en)^2)
delrb = (rb(1)*(e1-en)+rb(2)*(e1^2-en^2))*e1e-4
stua = exp(-a(0)+a(1)*log(u)+a(2)*log(u)^2)
stub = exp(-a(0)+a(1)*log(u)+a(2)*log(u)^2)
sigu = exp(-a(0)+a(1)*log(u)+a(2)*log(u)^2)
sigb = exp(-a(0)+a(1)*log(u)+a(2)*log(u)^2)
delrub = (rb(1)*(en-u)+rb(2)*(en^2-u^2))*e1e-4
int0 = 0 : inti = 0 : de = en/250
for ev = u to en step de
stbi = exp(-a(0)+a(1)*log(ev)+a(2)*log(ev)^2)
sigi = exp(-a(0)+a(1)*log(ev)+a(2)*log(ev)^2)
drbi = (rb(1)*(en-ev)+rb(2)*(en^2-ev^2))*e1e-4
int0 = int0 + sigi*exp(-b*drbi)/stbi
inti = inti + sigi*exp(-b*drbi)*drbi/stbi
next ev

```

```

10 = (int0 - (sigma*exp(-b*delrb)/stob)
+sigu*exp(-b*delrub)/stub)/2;ede
i1 = (inti - (sigma*exp(-b*delrb)*delrb/stob)
+sigu*exp(-b*delrub)*delrub/stub)/2;ede
f1 = t=i0*(mu+sgn(an-fi)*tan(abs(fi-an))/tan(an)
-mu+stopa/stopp)/cos(abs(fi-an))
f2 = sub*f1*cos(an)
+((tan(abs(fi-an))*sgn(an-fi)/tan(an)-1)/cos(abs(fi-an))
f3 = testopa=sigma/(cos(an)*stob) : fnf = exp(-ast)*(f1+f2+f3)
end def

```

```

6 if e0 = 0 then end else 7 'Coeficiencia el
on error goto fin 'cálculo de
7 input "Nombre del Archivo de Resultados";arche 'la función.
open arche for output as f1
input "Espesor de la Película (cm)";it
input "Energía de Incidencia (MeV)";ie0
print01, pele;"/";suse;:print01, using " 9999 A "it;ie0;
print01, using " 9.999 MeV";ie0
dx=t/250 : f1 = sig0/1e0
for theta=2 to 90 step 2
e = e0 : thetar = theta*pi/180
for x=0 to t step dx
sta = exp(a(0)+a(1)*log(e)+a(2)*log(e)^2)
e = e - sta*dx/cos(thetar)
next x
e1 = e
print using "99.9";thetar.
print using " 9.999";:fnf(thetar,e1)
print01, using "99.9";thetar.
print01, using " 9.999";:fnf(thetar,e1)
next theta
close01
beep : beep
goto 6
fin:
end
datpele1:
z1=z : r01=r0 : n1=na : ze1=ze : ka1=ka : ip1=ip : uk1=uk : u11=u11
u12=u12 : u131 = u13 : u1a=(u11+u12+u13)/4
return 1 'Subrutinas
'de lectura
'de datos.
datpele2:
sa(0)=e0 : sa(1)=s1 : sa(2)=s2 : ra(0)=r0 : ra(1)=r1 : ra(2)=r2
sig(0)=sig0 : sig(1)=sig1 : sig(2)=sig2
return 2
datpele3:
z2=z : r02=r0 : n2=na : ze2=ze : ka2=ka : ip2=ip : uk2=uk : u12=u11
u122=u12 : u132=u13 : u1b=(u12+u122+u132)/4
return 3
datpele4:
sb(0)=e0 : sb(1)=s1 : sb(2)=s2 : rb(0)=r0 : rb(1)=r1 : rb(2)=r2
sigb(0)=sig0 : sigb(1)=sig1 : sigb(2)=sig2
return 4

```

APENDICE 5. PROGRAMA PARA CALCULO DE LA ENERGIA E₁
Programa F1A6.

```

sig
dim e(3)
open "aidatos1.dat" for input as #1
open "aidatos2.dat" for input as #2
input "Elemento de la Pelicula":ipele
input "Elemento del Sustrato":isus
while not eof(1)
  input#1, elem1,x,ro,na,ze,ka,ip,uk,u11,u12,u13
  if ip10 = elem1 then gosub datpe11
  1 if sus0 = elem1 then gosub datsus1
  2 input#2, elem2, e0, e1, e2, r0, r1, r2, sig0, sig1, sig2
  if pe10 = elem2 then gosub datpe12
  3 if sus0 = elem2 then gosub datsus2
  4 if z1 > 0 and z2 > 0 then 5
wend
if #1=0 then print "No Hay Información Para el ":ipele : end
if #2=0 then print "No Hay Información Para el ":isus : end
elsee

input "¿Qu Línea Va a Utilizar (K, L, M)":line
if (line="K") then
  u=uk/1e6
elseif (line="L") then
  u=ul/1e6
elseif line="M" then
  print "No Hay Información Sobre Líneas M" : end
end if
print "¿Coeficiente de Absorción de Línea ":line;
print = de "isus" en "ipele";
print = (cm/g)";
input sus
print "¿Coeficiente de Absorción de Línea ":line;
print = de "isus" en "isus";
print = (cm/g)";
input sub
sus=sus*ro1 : sub=sub*ro2
i=1e30 : pi=3.141592 : e0 = 1 : ih=13.6*1e-6 : label1 = 1 : label2 = 1
input "¿Qu Fórmula Para el Frenamiento Usará (Janni, HCV)":ifren
if ifren="Janni" then nfrren = 1 else nfrren = 2
if ifren="HCV" then gosub paracv
6 input "¿Angulo de Detección (°)":fi : fi = fi*pi/180

def fnsaj(z) = exp(ksa0+sa1*log(z)+sa2*log(z)^2) 'Define fren-
def fnsbj(z) = exp(ksb0+sb1*log(z)+sb2*log(z)^2) 'amiento Janni.

```

```

fac=1.41418 : a0=.53e-6
def fnsam(k,ip,ze,z,ro,y)
  static a,b,c,d,ec,f,g,beta
  a=3*pi*a0/2*ih : b=asih/ip : c=asb : d=ka/a*b/2+se/(p#z)
  ee=3b*c*d/ze : e=abd*2*b*2*d*2 : f=ecoc*3/d
  beta=a/(0.5816*ze) : g = 2*beta/(3*ec)
  mcv1=k*sqrt(facy)*exp(-sqrt(facy))+a*log(1-beyfac)/(y*fac)
  mov2=-c/(1+d*y*fac)+f*y*2*fac*2/(1+ec*facy)*3
  mov3=-beta*(g*facy)^1.5/(6*b*(1+g*facy)^a)
  fnsam = (mov1+mov2+mov3)*ero1e-6
end def

```

```

7 def fnfuna(x)
  ae=sua/cos(fi-a) : b=subscosta/cos(fi-a)
  delra=ra1e(e0-ex)+ra2e(e0^2-ex^2):sie-a
  thk = cosa*delra
  fi=thk*(muastan(a-fi)/tan(a))/cos(fi-a)
  f2=subscosta+tan(a-fi)/tan(a)-1/cos(fi-a)
  g1=thk*muascosta)^2*(1+sin(a-fi)^2)/(cos(fi-a)^3*tan(a))
  g2=(1+sin(a-fi)^2)/(cos(fi-a)^2)/cos(fi-a)
  g3=(1+sin(a-fi)^2)/(cos(fi-a)^2)*tan(a)
  g4=-sin(a-fi)/sinta+tan(a)-2*tan(a*fi)
  g5=subscosta)^3*g2/(cos(fi-a)*sin(a))
  sa=exp(ksa0+sa1*log(x)+sa2*log(x)^2)
  sb=exp(ksb0+sb1*log(x)+sb2*log(x)^2)
  sig=exp(sig0+sig1*log(x)+sig2*log(x)^2)
  rb=(r0+r1*exp(rb2*ex^2):sie-a
  de=ex/100
  i0=0 : i1=0 : i2=0
  diab=isa1 - sb1 + 2*(sa2-sb2)*log(x))/ex
  dicoc=(sa1+sig1-sb1+2*(sa2+sig2-sb2)*log(x))/ex
  for ev = u to ex step de
    delrbv=(rb1*(ex-ev)+rb2*(ex^2-ev^2):sie-a
    sigbv=exp(sig0+sig1*log(ev)+sig2*log(ev)^2)
    i0=i0+sigbv*exp(-delrbv)*delrbv*(sig2-sb2)*log(ev)^2)
    i1=i1+sigbv*exp(-delrbv)*delrbv
    i2=i2+sigbv*exp(-delrbv)*delrbv^2
  next ev
  int0=(i0-(sig/sb)/2)*de
  int1=i1*de
  int2=i2*de
  coc=00 : thk=subscosta):(1+fi)/(cos(fi-a)+sig)
  coef01=g1*sb/(sig*a)+thk*subscosta)*tan(a-fi)/(cos(fi-a)*tan(a)+sig)
  coef02=thk*2*subscosta)/sig*cos(fi-a)
  coef03=thk*2*subscosta)*sa/(cos(fi-a)*sig*sb)+thk*fi2/sig
  coef10=g2*sb/(sig*sa)+f2*fi*sb/(1-costa)/(sig*sa)
  coef11=thk*subscosta)+f2/(cos(fi-a)*sig)
  coef20=f2*2*costa)*sb/(sig*sa)
  sum3=thk*(1-2*fi)+thk*2*subscosta)/(cos(fi-a)*sb)-thk*2*sa*dicoc/costa)
  sum0=(coef00+coef01+coef02-coef03)*int0
  sum1=(coef10+coef11)*int1
  sum2=coef20*int2
  fnfun=exp(-ae*thk)=(sum0+sum1+sum2+sum3)
end def

```

'Comienza a resolver la ecuación.

```

while e0
input "¿Nombre del Archivo de Resultados ":arch
input "¿Energía de Incidencia (MeV)":e0

```

```

input "Ángulo del Máximo (");amax
while label1
input "Límites inferior, Superior del intervalo";einf,esup
if esup<einf then swap einf, esup
e1 = sgn(Infun(amax,einf))
e2 = sgn(Infun(amax,esup))
if e1<e2 then 12
if e1<e2 then 10
for i = 1 to 1000
se = einf + rnd(2)*(esup-einf)
se1 = sgn(Infun(amax,se))
if se1 = 0 then 13
if e1<se1 then e
next i
print "No se Halló Cambio de Signo"
wend

9   esup = se
10  d(2 - e1) = einf
    d(2 - e1) = esup

11  while label2
ye = (d(1) + d(3))/2
ye1 = sgn(Infun(amax,ye))
if ye1 = 0 then 13
d(2 + ye1) = ye
if abs(d(1)-d(3))/abs(d(1)+abs(d(3)))<1e-11 then 13
wend

12  if e1 = 0 then ye = einf else ye=esup

13  print using "E1 0.0000 MeV "ye
    then = eos(amax):(ra1+le0-e1) + ra2*(e0^2-e1^2)
    print using " l = 0000 A ";thkn1ea
    input "Cálculo Cálculo (E/M)";resp
    if resp = "M" or resp="n" then end
    class 63
wend
end

datp01:
s1=a : ra1=r0 : n1=na : se1=xe + ka1*ka
ip1=ip : uk1=uk : u11=u1
u121=u12 : u131=u13 : u11=(u11+u12+2*u13)/4
return 1

datp02:
sa0=s0 : sa1=s1 : sa2=s2 : ra0=r0 : ra1=r1 : ra2=r2
siga0=sig0 : sig1=sig1 : sig2=sig2
return 3

datp03:
s2=s : ra2=r0 : n2=na : se2=xe : ka2=ka
ip2=ip : uk2=uk : u12=u11
u122=u12 : u132=u13 : u12=(u11+u12+2*u13)/4
return 2

```

```

datos2:
sb0=s0 : sb1=s1 : sb2=s2 : rb0=r0 : rb1=r1 : rb2=r2
sigb0=sig0 : sigb1=sig1 : sigb2=sig2
return 4

paramov:
a1=2*beta0^2*x1 : b1=2*x1/|p1 : c1=a1*b1 : d1=ka1/c1+b1/2+se1/(E0*x1)
e1=3*b1^2*d1/(x1^1.4)+b1*d1^2+b1^2*d1^2 : f1=c1+e1^3/d1
beta1=a1/(0.5616*x1) : g1 = 2*beta1/(3*c1)
a2=2*beta0^2*x2 : b2=2*x2/|p2 : c2=a2*b2 : d2=ka2/c2+b2/2+se2/(E0*x2)
e2=3*b2^2*d2/(x2^1.4)+b2*d2^2+b2^2*d2^2 : f2=c2+e2^3/d2
beta2=a2/(0.5616*x2) : g2 = 2*beta2/(3*c2)
return 6

```

APENDICE 6. PROGRAMA PARA CALCULO DE LA RAZON K₀/K_a.

'Programa para Calcular Razones K₀/K_a en Películas Delgadas.

```

kbeta1:
dim a(7,6),b(10)          'Lee coeficientes para la sección
for j=1 to 6              'eficaz de ionización.
for i=1 to 7
read a(i,j)
next i
next j

input "¿Unidad del Archivo de Datos" :uni0      'Lee datos.
archi0=uni0+".dat"
open archi0 for input as #1
input "¿Elementos Película, Sustrato" :ipe0,sus0

while not eof(1)
input #1, elem0,z,ro,na,ze,ka,ip,uk,ul1,ul2,ul3
if pe0=elem0 then gosub date01
1 if sus0=elem0 then gosub date02
2 if z<=0 and z1<=0 then 3
wend
if z2<=0 then print "No Hay Información Para " :ipe0 : end
if z1<=0 then print "No Hay Información Para " :ius0 : end
3 close #1
gosub coef0

a ih=13.6*ie-6:rl=1030:fac=1/(1+ih):ra0=.53e-8
pi=3.1415926:thk=1:nusa=6.022e23

input "¿Razón K0/Ka Teórica" :kbka
print "¿Coeficiente de Absorción de Ka en " :ius0:
input mu2alfa
print "¿Coeficiente de Absorción de Ka en " :ipe0:
input mu1alfa
print "¿Coeficiente de Absorción de K0 en " :ius0:
input mu2beta
print "¿Coeficiente de Absorción de K0 en " :ipe0:
input mu1beta
print "¿Masa Atómica de " :ipe0:
input ma1
print "¿Masa Atómica de " :ius0:
input ma2

def fsec(z,an)          'Define la sección eficaz.
a1=a0-.0203*an/(z-.3)^2
theta=.313078+.102231*z-5.5e082e-6*z^2+3.7093e-6*z^3/(1+.166608*z)
cst=2*sqrt(a1)/theta
y=log(cst)/log(10)

```

```

if z/e and z<30 then
if y>-.76 and y<-.59 then sc=-1.26247-7.58e02*y-8.45e48*y^2
if y>-.59 and y<-.06 then sc=0.072089-.00870993*cos(1e*(y-.30))
if y>-.06 and y<.89 then sc=1.00e74+.038855e*cos(7.3*(y-.32))
end if
if z>30 then
if z<=60 then
if y<-.59 then a=12.7008*(.388963-.59):sc=.0e13033*cos(a)
-.0e13033*12.7008*(y-.59)*sin(a)+7.68892*(y-.59)^2
if y>-.59 then sc=.0e13033*cos(12.7008*(.388963-.59))
end if
if z>60 and z<=92 then
if y<-.47 then a=4.21407*(-1.4e391-.47):sc=-.167413*cos(a)
+.167413*.21407*(y-.47)*sin(a)+7.28182*(y-.47)^2
if y>-.47 then sc=-.167413*cos(4.21407*(-1.4e391-.47))
end if
end if
esec = log(en/z^2)/log(10)
x = esec/1.15+2.22
p3 = (5*x^3-3*x)/2
pa = (35*x^4-30*x^2+3)/8
p5 = (63*x^5-70*x^3+15*x)/8
p6 = (231*x^6-315*x^4+105*x^2-5)/16
f = b(1)+b(2)*(esec-b(3))^2+b(4)*p3+b(5)*pa+b(6)*p5+b(7)*p6
fsec = sc*10^-f/(z^2)
end def

def fnscv(z,ze,k,ip,ma,en)          'Define frenamiento MCV.
static a,b,c,d,ec,f,g,beta
a=0:pi=0:2*pi:ih : b=ih/ip : ca=eb : d=k/d*b/2+ze/(0*x)
ec=3*b^2*d/(z^1.4)+bed^2*b^2*d^2 : f=ccc^3/d
beta=a/(0.5616*x) : g=2*beta/(13*cc)
mcv1 = k*sqrt(fac0en)*exp(-sqrt(fac0en))*a*log(1+b*en*fac)/(en*fac)
mcv2 = -c/(1+fac)*en^2*fac^2/(1+ec*facen)^3
mcv3 = -beta*(g*fac0en)-1.5/(6*b^2*(1+g*fac0en)^4)
fnscv = (mcv1+mcv2+mcv3)*1e-6*nusa/ma
end def

'Lee parámetros.
input "¿Ángulos de Incidencia y Salida (*)" :angi,angs
angi=angi*pi/180 : angs=angs*pi/180
input "¿Número del Intervalo de Integración (g/cm2)" :dte
input "¿Nombre del Archivo de Resultados" :res0
ares = res0+".dat"
open ares for output as #3
print #3, pe0, ipe0, ius0

5 read thk          'Comienza el cálculo
if thk=0 then end 'para diferentes
print using " %.8e g/cm2 :thk 'espesores.
print #3, using " %.8e g/cm2 :thk
for ei = .300 to .705 step .05
dt = thk/100 : e = ei
for t=0 to thk step dt
stp = fnscv(z1,ze1,ka1,ip1,ma1,e)
e = e - stp*dt/cos(ang1)
next t
ei = e : nx2alfa = 0 : nx2beta = 0
for te=0 to .1 step dte
nx2alfa = nx2alfa+fnscv(z2,e)*exp(-mu2alfa*te/cos(ang2))
nx2beta = nx2beta+fnscv(z2,e)*exp(-mu2beta*te/cos(ang2))

```

```

o = o - fncos(z2,ze2,ka2,lp2,sa2,e)=dte/cos(ang1)
if e<uk2 then 0
next te

```

0 nsa = nz2alfa*dte*exp(-mu1alfa*thk/cos(ang1))
 nsb = nz2beta*dte*exp(-mu1beta*thk/cos(ang1))
 r = nsb/nsa
 print using "E = 0.000 MeV " ;e1;
 print03, using "E = 0.000 MeV " ;e1;
 print using " K0/Ka= 0.0000";r;ekbka
 print03, using " K0/Ka= 0.0000";r;ekbka
 next e1

```

goto 5
end

```

 *Termina el Programa.

```

coefas
for k=1 to 3
  b(k)=c(k,1)*c(k,2)*z2+c(k,3)*z2^2
  +c(k,4)*z2^3)/(1+c(k,5)*z2+c(k,6)*z2^2)
next k
for k=4 to 5
  b(k)=c(k,1)+c(k,2)*z2+c(k,3)*z2^2+c(k,4)*z2^3+c(k,5)*z2^4
next k
for k=6 to 7
  b(k)=c(k,1)+c(k,2)*z2+c(k,3)*z2^2+c(k,4)*z2^3
next k
return a

```

 *Subrutinas de lectura
 *de datos.

```

date1e1:
z2=ze : ze2=ze : n2=na : ze2=ze : ka2=ka
lp2=lp : uk2=uk/1e6 : ul12=ul1
ul12 = ul2 : ul32=ul3 : u21=(ul1+ul2+2*ul3)/4e6
return 1

```

```

date1e2:
z1=ze : ze1=ze : n1=na : ze1=ze : ka1=ka
lp1=lp : uk1=uk/1e6 : ul11=ul1
ul11 = ul2 : ul31=ul3 : ul1=(ul1+ul2+2*ul3)/4e6
return 2

```

 *Datos.

```

data 4.97150,-3.8827e,597012,.107e+4,.113657,.0105593,-.0306492
data -.033e507,-.883283,597010,-4.47727e-3,-8.4197e-3,7.4928e-4
data 1.00377e-3
data 4.96721e-3,-.0177272,25220.1,1.30591e-4,2.40806e-4
data -1.30258e-5,-1.68953e-5
data -.17618e-6,1.03168e-4,-37.2554,-1.9793e-6,-2.95526e-8
data 9.1862e-8,8.74937e-8
data -.0152e67,.824937,-362088,1.00964e-6,1.26726e-8,0,0
data 9.1130e-4,.011019e,-13942.3,0,0,0,0
data 1e-5,2e-5,3e-5,4e-5,5e-5,6e-5,7e-5,8e-5,9e-5
data 1e-4,2e-4,3e-4,4e-4,5e-4
data 6e-4,7e-4,8e-4,9e-4,1e-3,2e-3,3e-3,0

```

REFERENCIAS

- [1] L. Eckertova, *Physics of Thin Films* (Plenum Press, Nueva York, 1977).
- [2] H.W. Warner y R.P.H. Grant, *Rep. Prog. Phys.* 47 (1984) 221.
- [3] H. Mayer, R. Niedermayer, M. Schraden, D. Stunkel y M. Böhre, en *Vacuum Microbalance Techniques*, Vol. 1, p. 55 (Plenum Press, Nueva York, 1981).
- [4] L.G. Schulz, *J. Chem. Phys.* 17 (1949) 1153.
- [5] A.R. Walter, *J. Appl. Phys.* 36 (1965) 2377.
- [6] T.E. Hartman, *J. Vacuum Sci. Technol.* 2 (1965) 239.
- [7] A. Pizzari y E. Masetti, *Thin Solid Films* 124 (1985) 249.
- [8] N. Schwartz y R. Brown, *Proc. of the 2nd. International Vacuum Congress* (Pergamon Press, Nueva York, 1962) p. 236.
- [9] F. Loatis, *Rev. Opt.* 38 (1959) 1.
- [10] G. Sauerbrey, *Z. Phys.* 155 (1959) 206.
- [11] M. Houze, B. Nongailard, M. Gazelet, J.M. Rouvaen y C. Brunel, *J. Appl. Phys.* 55 (1984) 194.
- [12] M. Houze, B. Nongailard, J.M. Rouvaen, J.E. Lefebvre y M.G. Gazelet, *J. Appl. Phys.* 56 (1984) 732.
- [13] H. Hoffman y J. Vancea, *Thin Solid Films* 85 (1981) 147.
- [14] R.W. Berry, P.M. Hall y H.T. Harris, *Thin Film Technology* (Robert E. Krieger Pub. Co., Huntington, Nueva York, 1979).
- [15] R.M.A. Aziz y N.M. Bashara, *Ellipsometry and Polarized Light* (North Holland, Amsterdam, 1977).
- [16] H.E. Bennet y J.M. Bennet, *Physics of Thin Films* 4 (1967) 1.
- [17] D.K. Kaushik, S. Priyokumar Singh, Ch. Bhan, S.K. Chattopadhyaya y N. Nath, *Thin Solid Films* 67 (1980) 353.
- [18] R. Cirone, G.E. Gigante, G. Gualtieri, F. Picazzi y S. Santucci, *Thin Solid Films* (1982) 91.
- [19] L.G. Farratt, *Phys. Rev.* 95 (1954) 359.
- [20] J. Sauro, I. Fankuchen y N. Mainfan, *Phys. Rev.* 152 (1963) 1544.
- [21] H. Hejdoová y M. Cernák, *Phys. Stat. Sol. (a)* 72 (1982) K95.
- [22] H. Niedrig, *J. Appl. Phys.* 53 (1982) R15.
- [23] L. Reimer, *Z. Angew. Phys.* 9 (1957) 34.
- [24] M. Prutton, *Surface Physics*, 2^a Ed. (Oxford University Press, Oxford, 1983).
- [25] M.P. Seah, *J. Phys.* F3 (1973) 1539.
- [26] J.F. Smith y H.N. Southworth, *Surf. Sci.* 122 (1982) L619.

- [27] M.K. Chu, M.A. Nicolet y J.M. Mayer. *Backscattering Spectrometry* (Academic Press, Nueva York, 1978).
- [28] S.A.E. Johansson y T.B. Johansson. *Nucl. Inst. and Meth.* 137 (1976) 473.
- [29] L. Rodríguez. *Tesis Profesional* (Universidad Nacional Autónoma de México, México, 1988).
- [30] J.C. Cheang. *Tesis Profesional* (Universidad Nacional Autónoma de México, México, 1988).
- [31] F. Folkmann, *J. Phys.* E8 (1975) 429.
- [32] E. Clayton, *Appl. Surf. Sci.* 13 (1982) 13a.
- [33] W. Babynsk, S. Craseman, K.W. Fink, H.U. Freud, H. Mark, C.D. Swift, R.E. Price y P.V. Rao, *Rev. Mod. Phys.* 44 (1972) 71a.
- [34] F. Folkmann, J. Borggreen y A. Kjeldgaard, *Nucl. Inst. and Meth.* 119 (1974) 117.
- [35] F.W. Reuter y H.F. Smith, *J. Appl. Phys.* 43 (1972) 4228.
- [36] W. Fabat, *Nucl. Inst. and Meth.* 120 (1974) 543.
- [37] J. Vegh, D. Berenyi, E. Koltay, I. Kiss, S. Self el-Nasr y L. Sarkadi, *Nucl. Inst. and Meth.* 153 (1978) 55.
- [38] J. Vegh, *Atomi Bull.* 20 (1978) 229.
- [39] I. Brissaud, J.P. Frontier y P. Regnier, *Nucl. Inst. and Meth.* 812 (1985) 235.
- [40] V. Rössiger, *Nucl. Inst. and Meth.* 196 (1982) 483.
- [41] G. Brunner, *Nucl. Inst. and Meth.* 166 (1979) 503.
- [42] G. Senka, M. Geretschlager y M. Paul, *Nucl. Inst. and Meth.* 142 (1977) 83.
- [43] G. Senka, M. Geretschlager y A. Kropf, *Nucl. Inst. and Meth.* 149 (1978) 441.
- [44] M. Geretschlager, *Nucl. Inst. and Meth.* 200 (1982) 505.
- [45] J.M. Khan, D.L. Potter y R.D. Worley, *J. Appl. Phys.* 37 (1966) 504.
- [46] J.M. Khan, D.L. Potter y R.D. Worley, *Phys. Rev.* 139 (1965) A1735.
- [47] L.J. Christensen, J.M. Khan y M.F. Brunner, *Rev. Sci. Inst.* 38 (1967) 20.
- [48] R.G. Musket y W. Bauer, *J. Appl. Phys.* 43 (1972) 478a.

REFERENCIAS

- [49] L.C. Felaman, J.M. Foote, F. Ermann y S. Schwartz, *Thin Solid Films* 19 (1973) 81.
- [50] W. Fabat, *Nucl. Inst. and Meth.* 124 (1975) 143.
- [51] M. Ahlberg, *Nucl. Inst. and Meth.* 131 (1975) 381.
- [52] V. Rössiger y M. Lenk, *Nucl. Inst. and Meth.* 180 (1981) 663.
- [53] L. Torrisi, L. Calcagno, D.Z. Zhu, K.L. Shang y G. Foti, *Nucl. Inst. and Meth.* 84 (1984) 408.
- [54] J. Rickards, *Nucl. Inst. and Meth.* 812 (1985) 249.
- [55] W. Reuter, A. Lurio, F. Cardone y J.F. Ziegler, *J. Appl. Phys.* 46 (1975) 3194.
- [56] J. Rickards y E.P. Iironi, *Nucl. Inst. and Meth.* 829 (1987) 527.
- [57] M.L. Goldberger y K.H. Watson, *Collision Theory* (John Wiley and Sons, Nueva York, 1964).
- [58] J. Bang y J.M. Hansteen, *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd.* 31 (1959) No. 13.
- [59] P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* 4th Ed. (Oxford University Press, Oxford, 1958).
- [60] H.A. Bethe, *Handbuch der Physik*, A, Seelal. ed., Vol. 24, p. 273 (Springer Verlag, Berlin, 1933).
- [61] H.A. Bethe, *Ann. Phys.* 5 (1930) 325.
- [62] B.-H. Choi, E. Merzbacher y G. S. Khandelwal, *At. Data* 5 (1973) 291.
- [63] B.-H. Choi, *Phys. Rev.* A7 (1973) 2056.
- [64] M.C. Walke, *Phys. Rev.* 101 (1956) 940.
- [65] G.S. Khandelwal, B.-H. Choi y E. Merzbacher, *At. Data* 1 (1969) 103.
- [66] G. Senka y A. Kropf, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 22 (1978) 219.
- [67] D.E. Johnson, G. Sasbas y F.D. McDaniel, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 24 (1979) 1.
- [68] D.H. Madison y E. Merzbacher, en *Atomic Inner-Shell Processes*, B. Craseman, ed. (Academic Press, Nueva York, 1975), Vol. 1, p. 1.
- [69] J.M. Hansteen y O.F. Mosebekk, *Z. Phys.* 234 (1970) 281.
- [70] J.M. Hansteen y O.F. Mosebekk, *Nucl. Phys.* A201 (1973) 541.
- [71] G. Sasbas, W. Brandt y R. Laubert, *Phys. Rev.* A7 (1973) 983.
- [72] W. Brandt, R. Laubert e I. Sellin, *Phys. Rev.* 151 (1966) 5a.
- [73] G. Sasbas, W. Brandt y R. Laubert, *Phys. Lett.* 34A(1971) 277.

REFERENCIAS

[74] G. Bassas, W. Brandt y K.H. Ritchie, Phys. Rev. A7(1973) 1971.
 [75] W. Brandt y G. Lapicki, Phys. Rev. A10 (1974) 474.
 [76] G. Bassas, W. Brandt y K. Laubert, Phys. Rev. A17(1978) 1655.
 [77] W. Brandt y G. Lapicki, Phys. Rev. A20 (1979) 465.
 [78] G. Lapicki, K. Laubert y W. Brandt, Phys. Rev. A22(1980) 1889.
 [79] W. Brandt y G. Lapicki, Phys. Rev. A23 (1981) 1717.
 [80] T. Haug, J.H. Bjerregaard y B. Elbak, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 30 (1956) No. 13.
 [81] N.F. Mott y N. Massey, *The Theory of Atomic Collisions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1965).
 [82] E.C. Montenegro, *Tesis Doctoral* (Pontificia Universidade Catolica de Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 1980).
 [83] E. Gerjuoy, Phys. Rev. 148 (1966) 54.
 [84] J.D. Garcia, Phys. Rev. A1 (1970) 280.
 [85] J.D. Garcia, E. Gerjuoy y J.E. Walker, Phys. Rev. 165 (1968) 66.
 [86] Md.R. Khan y M. Karim, Nucl. Inst. and Meth. 172 (1980) 577.
 [87] J.D. Garcia, K.J. Fortner y T.M. Kavanagh, Rev. Mod. Phys. 45 (1973) 111.
 [88] J.M. Manstean, O.M. Johnsen y L. Kochosch, Atomic Data and Nuclear Data Tables 15 (1975) 305.
 [89] D.D. Cohen y M. Harrigan, Atomic Data and Nuclear Data Tables 33 (1985) 255.
 [90] D.D. Cohen y M. Harrigan, Atomic Data and Nuclear Data Tables 34 (1986) 393.
 [91] D.D. Cohen, Nucl. Inst. and Meth. 22 (1987) 55.
 [92] G.G. Johnson y E.W. White, ASTM Data Series DS 4b (1970).
 [93] M.O. Krauss, J. Phys. Chem. Ref. Data 8 (1979) 307.
 [94] J.H. Scofield, Atomic Data and Nuclear Data Tables 14 (1974) 121.
 [95] F. Schulz y J. Shchuchinsky, Nucl. Inst. and Meth. B12 (1985) 90.
 [96] H.H. Andersen y J.F. Ziegler, *Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements* (Pergamon Press, New York, 1977).
 [97] J.F. Janni, Atomic Data and Nuclear Data Tables 27 (1982) 147; 341.

REFERENCIAS

[98] E.C. Montenegro, S.A. Cruz y C. Vargas-Aburto, Phys. Lett. 92A (1982) 195.
 [99] F. Folkmann, K.H. Cramon y N. Hertel, Nucl. Inst. and Meth. B3 (1984) 11.
 [100] J. Rickards, Nucl. Inst. and Meth. 152 (1978) 585.
 [101] E.C. Montenegro, A. Oliver y F. Aldape, Nucl. Inst. and Meth. B12 (1985) 453.
 [102] H. Paul, Nucl. Inst. and Meth. B3 (1984) 5.

REFERENCIAS