

# TRANSPORTE DE ELECTRONES RAPIDOS EN SOLIDOS

W.R.Cravero\* y C.R.Garibotti\*

Centro Atómico Bariloche, Comisión Nacional de Energía Atómica,  
8400 San Carlos de Bariloche, Río Negro.

En este trabajo realizamos una comparación entre los distintos modelos utilizados habitualmente en el estudio del transporte de electrones rápidos en sólidos, tanto para el caso de penetración de un haz como para el caso de emisión electrónica en el interior del sólido. Se discuten las aproximaciones matemáticas y las hipótesis físicas realizadas en cada caso y sus rangos de validez.

## I. INTRODUCCION

El estudio del transporte de electrones rápidos en sólidos resulta de importancia en el diseño y desarrollo de detectores de radiación y es necesario tenerlo en cuenta en el estudio de emisión electrónica en sólidos así como también en las técnicas de análisis de materiales que la utilizan (XPS, AES, etc.)<sup>1,2</sup>.

La denominación de "rápidos" implica que la velocidad media de los electrones que queremos seguir es mucho mayor que alguna velocidad característica del medio que atraviesan, p.ej. la velocidad de Fermi de los electrones de conducción. Sin embargo supondremos que las velocidades son tales que podemos ignorar efectos relativistas.

Dentro de este marco, el transporte de los electrones está determinado por eventos de colisión múltiples que dan lugar a efectos de "stragglings" tanto angular como en energía. La descripción teórica de la colisión múltiple elástica e inelástica ha sido establecida hace tiempo<sup>3,4</sup> aunque las comprobaciones experimentales y los estudios detallados para el caso de electrones son escasos en la literatura<sup>5,6</sup>.

La primera consideración a realizar está relacionada con el tratamiento por separado del stragglings en energía y el stragglings angular. Esta separación está justificada por el hecho de que las velocidades consideradas aquí, el stragglings angular resulta de colisiones elásticas de los electrones con los carozos iónicos del sólido, las cuales prácticamente no cambian la energía de los electrones, en tanto la pérdida de energía proviene de la interacción de los electrones incidentes con los electrones del medio, ya sea por medio de colisiones binarias o por interacción con excitaciones colectivas (excitación de plasmones).

El trabajo está organizado de la siguiente manera:

en la sección II reproducimos los principales desarrollos de la teoría de transporte para pérdida de energía de un haz electrónico en una lámina sólida, discutimos algunas simplificaciones habituales y las comparamos con datos experimentales y con la teoría completa. La sección III contiene comparaciones de las distintas aproximaciones para colisión múltiple entre sí y con datos experimentales; por último, en la sección IV estudiamos la aplicabilidad del tratamiento simplificado al transporte de electrones emitidos en el interior del sólido, en particular para el caso de emisión convoy<sup>7</sup>. Los datos experimentales utilizados para las comparaciones<sup>6</sup> son para un haz de electrones incidiendo sobre una lámina de carbono.

## II. STRAGGLING EN ENERGIA

Consideremos la ecuación de transporte que debe satisfacer la distribución en energía de los electrones<sup>3</sup>:

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x, E) = \int_0^E w(E, \epsilon) \{ f(x, E_0 - E + \epsilon) - f(x, E) \} \quad (1)$$

donde  $f(E, x)$  es la distribución en energía de los electrones luego de haber atravesado un espesor  $x$  de material. El núcleo de transporte  $w(E, \epsilon)$  representa la probabilidad por unidad de camino recorrido de que un electrón de energía  $E$  sufra una pérdida de energía  $\epsilon$ . Habitualmente se considera que para electrones de más de 1 keV y pérdida de energía pequeña,  $w(E, \epsilon)$  es sólo función de  $\epsilon$ . Partiendo de la teoría de función dieléctrica<sup>8</sup>, se puede establecer un modelo para el núcleo de transporte que, para el carbono, muestra efectivamente una dependencia muy suave en  $E$  para  $E > 1$  keV (Fig. 1).

\* Investigador de CONICET

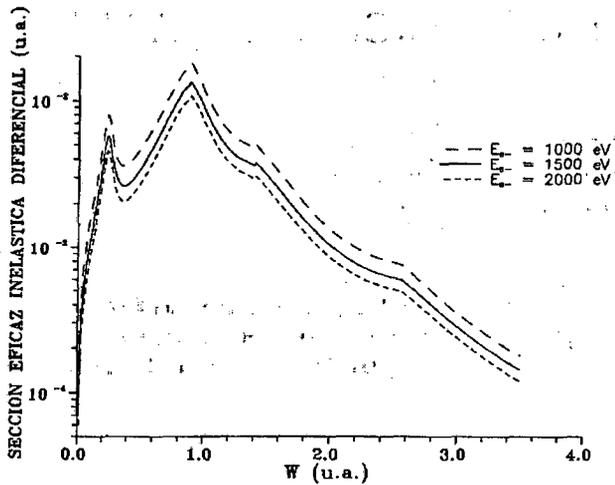


Fig.1.: Sección eficaz inelástica diferencial para electrones de 1 kev, 1.5 kev y 2 kev.

No vamos a derivar la solución formal de la ecuación (1)<sup>3</sup>, sino solamente a escribir el resultado final:

$$f(x, E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\{ ik(E_0 - E) - n x \tilde{w}(k) \} \quad (2)$$

con

$$\tilde{w}(k) = \int_0^{\infty} d\varepsilon w(\varepsilon) (1 - \exp(-k\varepsilon)) \quad (3)$$

Naturalmente para núcleos de transporte realistas las integraciones en las ecuaciones (2) y (3) deben ser realizadas en forma numérica.

Una solución aproximada de (1) se obtiene desarrollando el integrando en serie de Taylor. Quedándonos con el primer orden obtenemos la aproximación de frenado continuo (continuous slowing down approximation):

$$f(x, E) = \delta((E_0 - E) - x S) \quad (4)$$

donde

$$S = \int_0^{\infty} d\varepsilon \varepsilon w(\varepsilon) \quad (5)$$

es la pérdida media de energía (stopping power).

Una aproximación menos drástica resulta de quedarnos con el segundo orden del desarrollo de Taylor, aproximación llamada difusional (diffusional approximation):

$$f(x, E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R x}} \exp\left( -\frac{(E_0 - E - x S)^2}{2 x R} \right) \quad (6)$$

donde

$$R = \int_0^{\infty} d\varepsilon w(\varepsilon) \varepsilon^2 \quad (7)$$

es el parámetro de straggling. La precisión relativa de ambas aproximaciones aumenta para espesores y energías de incidencia mayores. De la comparación con datos experimentales de transporte de electrones en láminas delgadas de carbono<sup>6</sup> puede verse que en líneas generales el acuerdo de la aproximación difusional es bueno y mejora para espesores y energías mayores (Figs. 2 y 3).

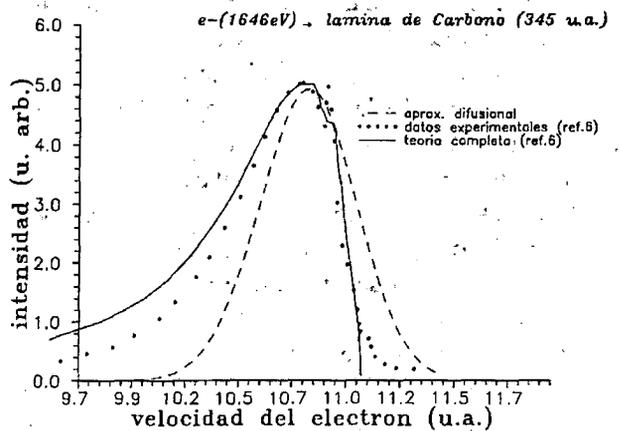


Fig. 2.: Distribución de energía de electrones experimentales y teóricas, para energía de incidencia de 1646 eV y espesor de la lámina de 345 u.a.

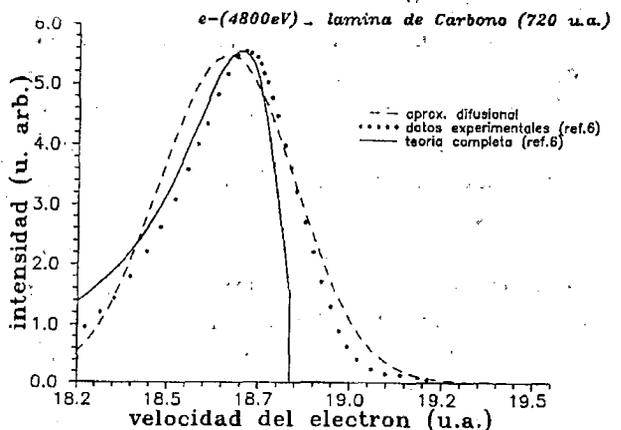


Fig.3.: Distribución de energía de electrones experimentales y teóricas, para energía de incidencia de 4800 eV y espesor de la lámina de 720 u.a.

### III. STRAGGLING ANGULAR

Para la dispersión angular del haz incidente puede utilizarse la teoría completa de Goudsmit-Saunderson<sup>4</sup> desarrollada para el caso general de scattering elástico a cualquier ángulo. Aquí partiremos de una simplificación de la teoría válida para ángulo pequeño<sup>9</sup>. En este caso la función de distribución angular resulta ser:

$$g(x, \alpha) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk k J_0(k\alpha) \exp\{-n x \tilde{q}(k)\} \quad (8)$$

donde

$$\tilde{q}(k) = 2\pi \int_0^\infty q(\vartheta) \vartheta d\vartheta \{1 - J_0(k\vartheta)\} \quad (9)$$

$q(\vartheta)$  es el correspondiente núcleo de transporte para dispersión angular. Habitualmente se utiliza un núcleo derivado de un potencial de Coulomb apantallado que representa la interacción del electrón con los carozos iónicos<sup>6,10</sup>:

$$q(\vartheta) = \frac{\pi Z^2}{2v^2 \left( \frac{\vartheta^2}{4} + y\vartheta^2 \right)^2} \quad (10)$$

con

$$y\vartheta = 1 / (2 v Z^{-1/3}) \quad (11)$$

Análogamente a lo hecho en la sección anterior, podemos definir la aproximación difusional para la distribución angular:

$$g(x, \alpha) = \frac{1}{x \pi D} \exp\left( -\frac{\alpha^2}{x D} \right) \quad (12)$$

donde  $D$  es la dispersión angular cuadrática media:

$$D = \int_0^\infty \vartheta^3 d\vartheta q(\vartheta) \quad (13)$$

como antes, esta aproximación es mejor para espesores y energías mayores. En las Figs. 4 y 5 vemos comparaciones entre datos experimentales y las distintas aproximaciones teóricas. En ambas figuras se ve que, para espesores pequeños existe un pico en la

dirección  $\vartheta = 0$  debida a los electrones que no sufrieron deflexión angular. Para realizar la comparación de los resultados teóricos, se modeló esta contribución como una delta de Dirac en la dirección  $\vartheta = 0$  convolucionada con la resolución del detector utilizado en los experimentos<sup>6</sup>.

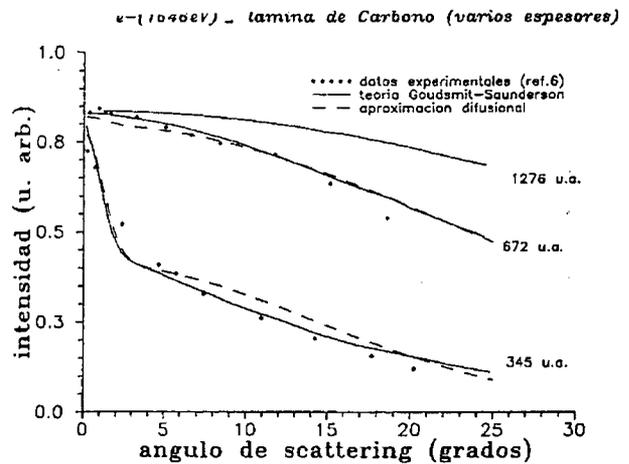


Fig.4.: Distribuciones electrónicas angulares experimentales y teóricas, para energía de incidencia de 1646 eV y varios espesores.

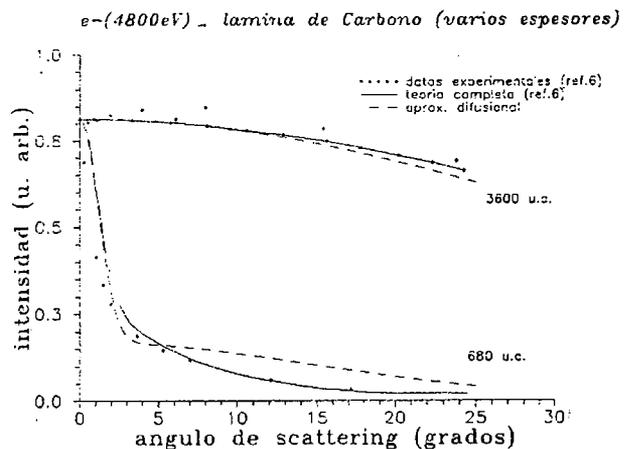


Fig.5.: Distribuciones electrónicas angulares experimentales y teóricas, para energía de incidencia de 4800 eV y varios espesores.

### IV. EMISION ELECTRONICA

Todo lo dicho hasta aquí del transporte de electrones en sólidos se debería aplicar sin problemas al caso de emisión electrónica. Si bien es así en general<sup>2</sup>, en el caso de emisión de electrones convoy algunos autores opinan que los modelos de transporte standard no son directamente aplicables<sup>11</sup>.

La emisión convoy se produce cuando un haz de átomos neutros o iones incide sobre un blanco gaseoso

o sólido. Los electrones son emitidos con velocidades muy cercanas a la de los proyectiles. La objeción para utilizar los modelos de transporte de electrones libres a electrones convoy se basa en que se estaría despreciando la influencia que tiene en el transporte la presencia del proyectil. Si bien esto puede ser cierto para los electrones que contribuyen al denominado pico convoy (centrado en la velocidad de los proyectiles), existe otra estructura (suave) en el espectro de emisión producida por electrones convoy que sufren colisiones múltiples. Estos electrones pierden correlación con el proyectil continuando el transporte dentro del sólido como electrones libres. Este lomo en el espectro se corre hacia energías mas bajas a medida que aumentamos el espesor del blanco.

Para explorar la utilidad o no de los modelos de transporte en este caso, efectuamos el cálculo de la distribución electrónica producida por emisión convoy en una lámina de Carbono. Utilizamos las aproximaciones más simples para el transporte, es decir la aproximación difusional en el stragglng angular y la de frenado continuo en energía.

El resultado se compara con datos experimentales en la Fig. 6, observándose un acuerdo general bueno para la posición y el ancho del lomo. No pretendemos con este modelo describir los detalles del espectro sino simplemente establecer la posibilidad de utilizar las teorías de transporte de electrones libres para estudiar los espectros de electrones Convoy, excepto en una pequeña zona alrededor del pico, que merece ser estudiada con detalle, donde la influencia del proyectil puede no ser despreciable en el transporte.

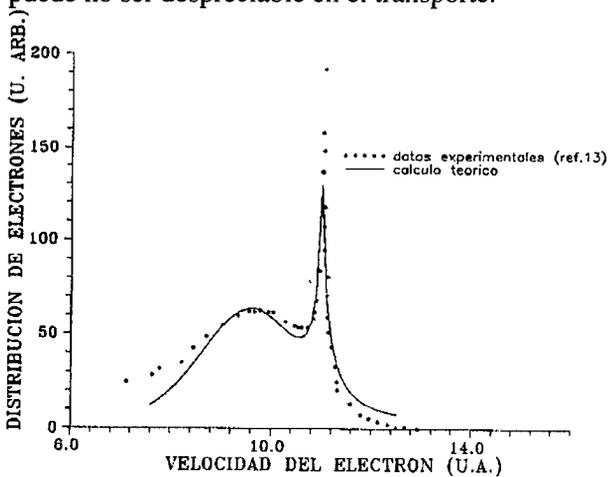


Fig. 6: Espectro experimental de emisión convoy a  $0^\circ$  (Ref. 12), y resultados de nuestro cálculo.

## V. CONCLUSIONES

Hemos presentado varias aproximaciones teóricas para estudiar el transporte de electrones rápidos en sólidos, en especial en láminas de carbono. Concluimos que en el rango de energías estudiado y para espesores de lámina mayores que algunos caminos libres medios, la aproximación difusional es aplicable dando resultados similares a las teorías completas. En cuanto al transporte de electrones convoy, puede concluirse que éste no difiere sustancialmente del de electrones libres, pudiéndose en consecuencia aplicar las mismas aproximaciones, exceptuando de esta conclusión el transporte de los electrones convoy "intrínsecos", donde la correlación del electrón con el proyectil puede ser importante. El uso de aproximaciones permite además encarar el estudio de la dependencia angular del espectro, sin necesidad de recurrir a simulaciones o a la resolución numérica de las ecuaciones de transporte.

## REFERENCIAS

- 1.H.Bichsel, Rev. Mod. Phys. **60**, 629 (1988).
- 2.S.Tougaard, *Interactions of Charged Particles with Solids and Surfaces* (NATO Asi Series, Plenum Press, 1991).
- 3.L. D. Landau, J.Phys. USSR **8**, 201 (1944).
- 4.S. Goundsmit y J.L.Saunderson, Phys. Rev., **57**, 24 (1940).
- 5.J.C.Ashley et al, Thin Solid Films **60**, 361 (1979).
- 6.S.Lencinas et al, Phys. Rev. A **41**, 1435 (1990).
- 7.W.Weckbach y P.Focke, Nucl. Instrum. Methods **B33** 255 (1988).
- 8.R.H.Ritchie, Phys. Rev. **114**, 644 (1959).
- 9.W.Bothe, Z Physik **4**, 161 (1921).
- 10.M.L.Martiarena y C.R.Garibotti, Phys. Rev. A **44**, 4386 (1991).
- 11.J. Burgdorfer, *Interactions of Charged Particles with Solids and Surfaces* (NATO Asi Series, Plenum Press, 1991).