

**Espalhamento Eletrônico: Abordagens clássica  
e quântica**

João Carlos de Oliveira Guerra

Fevereiro de 2005

# **Espalhamento Eletrônico: Abordagens clássica e quântica**

João Carlos de Oliveira Guerra

Orientador: Prof. Ronald Dickman

Co-orientadora: Profa. Karla Balzweit

Dissertação apresentada à UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS, como requisito parcial para a obtenção do grau de MESTRE EM FÍSICA.

Fevereiro de 2005

*Aos meus pais Carlos e Aparecida  
que tanto fizeram para que eu chegasse aqui  
e aos meus familiares e amigos*

# Agradecimentos

Agradeço a todos aqueles que de alguma maneira contribuíram para a minha vitória, sobretudo aos meus pais, sempre presentes, aos meus orientadores, Ron e Karla, sempre pacientes, aos meus amigos e colegas de laboratório.

# Resumo

Neste trabalho, aplicamos um algoritmo de Monte Carlo para simular as trajetórias de elétrons retroespalhados de alguns materiais-alvo, extraindo algumas propriedades estatísticas como: distribuição de distâncias radial e longitudinal e valor médio da componente Z do vetor unitário que aponta na direção de movimento instantânea do elétron.

# Abstract

In this work, we apply a Monte Carlo algorithm to simulate the trajectories of backscattered electrons in certain materials, extracting some statistical properties such as radial distance distribution and longitudinal distance distribution.

# Conteúdo

<b>Agradecimentos</b>	<b>ii</b>
<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>iv</b>
<b>1 Interação do feixe de elétrons com um espécime</b>	<b>6</b>
1.1 Introdução . . . . .	6
1.2 Espalhamento Eletrônico . . . . .	7
1.2.1 Espalhamento Elástico . . . . .	7
1.2.2 Espalhamento Inelástico . . . . .	13
1.2.3 Região de Interação . . . . .	15
<b>2 Monte Carlo</b>	<b>16</b>
2.1 Métodos de integração numérica em uma dimensão . . . . .	16
2.2 Integração numérica de integrais multidimensionais . . . . .	18
2.3 Cálculo de Monte Carlo de Integrais unidimensionais . . . . .	19
2.4 Variáveis Aleatórias . . . . .	20
2.4.1 Médias . . . . .	21
2.4.2 Distribuição de Probabilidades não-uniformes . . . . .	22
2.5 O Método de Rejeição . . . . .	24
<b>3 O Primeiro Modelo: Rutherford não-blindado</b>	<b>26</b>
3.1 Introdução . . . . .	26
3.2 O Modelo . . . . .	26
3.2.1 Algoritmo 1 . . . . .	34
3.3 Primeiros Resultados . . . . .	35
<b>4 Introdução à Mecânica Quântica do Espalhamento Eletrônico</b>	<b>41</b>
4.1 Introdução . . . . .	41
4.2 Equação de Lippmann-Schwinger . . . . .	41
4.3 A aproximação de Born . . . . .	49

4.4	Formulação dependente do tempo do espalhamento . . . . .	52
4.5	Conexão com a Teoria de Perturbação Dependente do Tempo . . . . .	55
4.6	Espalhamento Inelástico Elétron - Átomo . . . . .	58
4.7	Método de Ondas Parciais . . . . .	65
4.8	Equação de Onda relativística . . . . .	68
<b>5</b>	<b>Resultados</b> . . . . .	<b>77</b>
5.1	Das simulações . . . . .	77
5.1.1	Algoritmo 2 . . . . .	77
5.2	Resultados . . . . .	78
<b>6</b>	<b>Conclusões</b> . . . . .	<b>100</b>
6.1	Introdução . . . . .	100
6.2	Equação de Fokker-Planck multivariada . . . . .	100
6.3	O Problema . . . . .	101

# Lista de Figuras

1.1	Exemplos de espalhamento elástico e inelástico. Em a), $E_I = E_o$ , e em b), $E_I < E_o$ . Fonte: Goldstein et. al., Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis: A text of biologists, materials scientists, and geologists, 2 <sup>a</sup> ed. . . . .	9
1.2	Geometria de um evento de espalhamento. $s$ é o parâmetro de impacto, $\phi$ é o ângulo entre o vetor velocidade $\mathbf{v}$ do elétron e sua posição $\mathbf{r}$ relativamente ao núcleo de carga $+Ze$ . Fonte: Reimer, L., Scanning electron microscopy: physics of image formation and microanalysis. Berlin; New York: Springer-Verlag, c1985. . . . .	11
1.3	O conceito de uma seção de choque diferencial de espalhamento. Fonte: Goldstein et. al.: Classical Mechanics, 3 <sup>a</sup> ed. . . . .	12
1.4	Esquema da Região de Interação. Fonte: www.jeol.com . . . . .	15
2.1	A integral (2.1) fornece a área sob a curva $f(x)$ . Fonte: Gould et. al., An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems Part2. . . . .	16
2.2	A aproximação retangular para $f(x) = \cos x$ para $0 \leq x \leq \pi/2$ . Fonte: Gould et. al., An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems Part2. . . . .	17
2.3	A função $f(x)$ é definida para $a \leq x \leq b$ . Fonte: Gould et. al., An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems Part2. . . . .	19
3.1	Geometria da Simulação. . . . .	30
3.2	número de eventos versus distância radial, $E = 2.0$ keV. . . . .	36
3.3	número de eventos versus profundidade, $E = 2.0$ keV. . . . .	36
3.4	número de eventos versus distância radial, $E = 5.0$ keV. . . . .	37
3.5	número de eventos versus profundidade, $E = 5.0$ keV. . . . .	37
3.6	$\langle \cos(\theta) \rangle$ versus número de colisões. . . . .	38
3.7	$\ln \langle \cos(\theta) \rangle$ versus número de colisões. . . . .	38
3.8	Gráfico Z versus X para uma energia de 2.0 keV. . . . .	39

3.9	Gráfico Z versus X para uma energia de 5.0 keV. . . . .	40
4.1	Posicionamento do observação no fenômeno de espalhamento. Fonte: J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Revised Edition. . . . .	46
4.2	Razão $r \times \theta$ para alguns números atômicos. Fonte: Reimer, L., Scanning electron microscopy: physics of image formation and microanalysis. Berlin; New York: Springer-Verlag, 1985. .	72
5.1	$\langle \cos\theta \rangle$ para o Au e Cu e duas energias. . . . .	79
5.2	$\ln(\cos \theta)$ para o Au em 3 situações específicas. . . . .	79
5.3	número de eventos versus distância radial para o Cu, E = 2.0 keV. . . . .	82
5.4	número de eventos versus profundidade para o Cu, E = 2.0 keV.	82
5.5	número de eventos versus distância radial para o Cu, E = 5.0 keV. . . . .	83
5.6	número de eventos versus profundidade para o Cu, E = 5.0 keV.	83
5.7	número de eventos versus distância radial para o Au, E = 2.0 keV. . . . .	84
5.8	número de eventos versus profundidade para o Au, E = 2.0 keV.	84
5.9	número de eventos versus distância radial para o Au, E = 5.0 keV. . . . .	85
5.10	número de eventos versus profundidade para o Au, E = 5.0 keV.	85
5.11	número de eventos versus distância radial para o Al, E = 2.0 keV, modelo de Rutherford Blindado. . . . .	87
5.12	número de eventos versus profundidade para o Al, E = 2.0 keV, modelo de Rutherford Blindado. . . . .	87
5.13	número de eventos versus distância radial para o Al, E = 5.0 keV, modelo de Rutherford Blindado. . . . .	88
5.14	número de eventos versus profundidade para o Al, E = 5.0 keV, modelo de Rutherford Blindado. . . . .	88
5.15	número de eventos versus distância radial para o Al, E = 2.0 keV, modelo de Mott perturbativo. . . . .	89
5.16	número de eventos versus profundidade para o Al, E = 2.0 keV, modelo de Mott perturbativo. . . . .	89
5.17	$\cos \theta$ versus número de colisões. . . . .	90
5.18	$\ln(\cos\theta)$ versus número de colisões. . . . .	90
5.19	número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Al, E = 2.0 keV, modelo de Rutherford Blindado. . . .	92
5.20	número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Al, E = 5.0 keV, modelo de Rutherford Blindado. . . .	93

5.21	número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Al, $E = 2.0$ keV, modelo de Mott perturbativo. . . . .	93
5.22	número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Cu, $E = 2.0$ keV, modelo de Rutherford Blindado. . . . .	94
5.23	número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Cu, $E = 5.0$ keV, modelo de Rutherford Blindado. . . . .	94
5.24	número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Au, $E = 2.0$ keV, modelo de Rutherford Blindado. . . . .	95
5.25	número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Au, $E = 5.0$ keV, modelo de Rutherford Blindado. . . . .	95
5.26	probabilidade X número de colisões para três materiais e duas energias. . . . .	96
5.27	Gráfico Z versus X para o Al, $E = 2.0$ keV e Modelo de Rutherford Blindado. . . . .	96
5.28	Gráfico Z versus X para o Al, $E = 5.0$ keV e Modelo de Rutherford Blindado. . . . .	97
5.29	Gráfico Z versus X para o Cu, $E = 2.0$ keV e Modelo de Rutherford Blindado. . . . .	97
5.30	Gráfico Z versus X para o Cu, $E = 5.0$ keV e Modelo de Rutherford Blindado. . . . .	98
5.31	Gráfico Z versus X para o Au, $E = 2.0$ keV e Modelo de Rutherford Blindado. . . . .	98
5.32	Gráfico Z versus X para o Au, $E = 5.0$ keV e Modelo de Rutherford Blindado. . . . .	99

# Capítulo 1

## Interação do feixe de elétrons com um espécime

### 1.1 Introdução

Um feixe eletrônico quando penetra um espécime, em um experimento de microscopia eletrônica, sofre uma variedade muito rica de interações, as quais podem revelar muito das propriedades do material. Algumas destas propriedades são: composição, topografia, potencial elétrico e campo magnético local.

As interações elétron-espécime podem ser divididas em duas classes:

1) Eventos de espalhamento elástico. Nestes eventos, as trajetórias, ou momentos dos elétrons do feixe dentro do espécime, são alteradas, mas a perda de energia cinética pode ser considerada desprezível. O espalhamento elástico responde pelo contraste químico no sinal de elétrons retroespalhados em um microscópio eletrônico de varredura (MEV). O espalhamento elástico também é responsável por informações de caráter cristalográfico em um microscópio eletrônico de varredura;

2) Eventos de espalhamento inelástico. Nestes eventos, além de serem seguidamente alteradas as trajetórias dos elétrons do feixe, após cada colisão, há também transferência de energia dos elétrons para átomos do espécime, por meio da geração de elétrons secundários, produção de raios X característicos e bremsstrahlung, criação de pares elétron-lacuna em semicondutores, geração de vibrações de rede ou fônons, plásmons, entre outros processos. Voltaremos a esta lista de produtos da interação entre feixe eletrônico e espécime para dar-lhes significado. É importante listá-los e conhecê-los, uma vez que eles podem ser usados para prover informações sobre a natureza do espécime inicialmente desconhecidas.

## 1.2 Espalhamento Eletrônico

A coluna ótico-eletrônica é uma parte do microscópio eletrônico, anterior à interação do espécime com o feixe de elétrons, cuja função é o controle do feixe quanto à manipulação de três parâmetros, a saber: diâmetro, corrente e convergência. Feixes eletrônicos típicos usados em microscopia eletrônica de varredura (SEM) e microanálise consistem de elétrons cujas energias situam-se tipicamente na faixa de 1 keV a 40 keV, os quais percorrem trajetórias retilíneas proximamente paralelas (antes de penetrarem a amostra e numa direção que vamos supor sempre ser normal à superfície da amostra).

### 1.2.1 Espalhamento Elástico

Na discussão do espalhamento elástico, um conceito chave é o da seção de choque diferencial de espalhamento elástico, a qual é definida pela seguinte expressão:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} =$$

$$\frac{\text{N}^\circ \text{ de elétrons espalhados em um ângulo } d\Omega \text{ por unidade de tempo}}{\text{Intensidade incidente}} \quad (1.1)$$

onde  $d\Omega$  é um elemento de ângulo sólido na direção  $\Omega$ . Como ficará mais claro abaixo, ao se simular as trajetórias de elétrons (retroespalhados) dentro de um espécime, despreza-se a interação entre os elétrons do feixe, de maneira que a simulação é construída trajetória após trajetória. Além disso, os centros espalhadores são por sua vez randomicamente distribuídos no sólido e aproximados pelos potenciais de átomos neutros constituindo o sólido. Desde que a força de interação é supostamente central, deve haver completa simetria em torno da direção de movimento que antecede um determinado evento de espalhamento elástico. Logo, o elemento de ângulo sólido pode ser escrito da seguinte forma:

$$d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta \quad (1.2)$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre as direções espalhada e incidente, e é conhecido como o ângulo de espalhamento. Note-se que o nome “seção de choque” é digno de que  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega)d\Omega$  tenha dimensão de área.

Outro conceito importante e que é relacionado ao conceito de seção de choque diferencial elástica é o do livre caminho médio  $\lambda$ , que é a distância

média percorrida pelos elétrons do feixe eletrônico entre eventos de espalhamento elástico. O livre caminho médio pode ser calculado da seção de choque diferencial pela seguinte expressão:

$$\lambda = \frac{A}{N_A \rho \sigma_{tot}}, \quad (1.3)$$

onde  $A$  é a massa atômica,  $N_A$  é o número de Avogadro ( $6.02 \times 10^{23}$  átomos/mol),  $\rho$  é a densidade do espécime, e,

$$\sigma_{tot} = \int_0^{4\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega) d\Omega \quad (1.4)$$

é a seção de choque total de espalhamento elástico.

No espalhamento elástico, o qual é ilustrado na fig 1.1(a), apenas a direção do vetor velocidade do elétron  $\mathbf{v}$  (ou momento) é alterada, sendo a magnitude da velocidade,  $v$ , (ou momento) mantida inalterada. Logo, a energia cinética do elétron,  $E = \frac{1}{2}m_e v^2$ , onde  $m_e$  é a massa do elétron, é constante. O elétron é espalhado pela interação coulombiana com a carga nuclear dos átomos do espécime a qual é, por sua vez, blindada pelos elétrons orbitais. Na verdade, uma pequena fração da energia cinética do elétron incidente (primário), da ordem de 1 eV, ou menos, é transferida para o espécime. Esta perda de energia pelos elétrons do feixe é, portanto, desprezível se comparada com a energia incidente, a qual é tipicamente da ordem de keV. Em vista disso, é totalmente plausível aproximar as interações sofridas pelos elétrons do feixe, no espécime, para eventos de espalhamento elástico. O ângulo de espalhamento pode tomar um valor entre 0 e 180°, com um valor médio de 2° a 5°. Então, para a grande maioria dos eventos de espalhamento elástico, o elétron continua a se deslocar aproximadamente na mesma direção, através do sólido, mas, ocasionalmente, um evento simples de espalhamento elástico ocorre tal que cause um desvio brusco na trajetória do elétron e muito raramente o elétron pode espalhar através de um ângulo próximo a 180° de maneira que sua direção de movimento seja praticamente invertida.

O primeiro tratamento do espalhamento de uma partícula carregada por um núcleo é devido a Rutherford. No experimento de Rutherford, partículas alfa são feitas espalhar através de folhas finas de metal. Os experimentos de Rutherford resultaram em um modelo para o átomo, cujo nome lhe foi dado em sua homenagem, modelo este que consiste de grande parte da massa do átomo concentrada no núcleo, de diâmetro menor que  $10^{-2}$  pm, e o núcleo tendo uma carga  $+Ze$ .

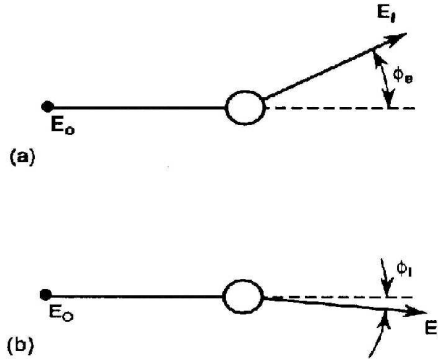


Figura 1.1: Exemplos de espalhamento elástico e inelástico. Em a),  $E_I = E_o$ , e em b),  $E_I < E_o$ . Fonte: Goldstein et. al., Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis: A text of biologists, materials scientists, and geologists, 2ª ed..

Vamos obter uma expressão para a seção de choque diferencial de espalhamento elástico para o caso clássico, em que o elétron é sujeito a uma interação do tipo coulombiana. Imaginemos que o elétron de velocidade  $\mathbf{v}$  aproxima-se de um núcleo de tal maneira que passaria por ele a uma distância  $s$ , o parâmetro de impacto, se não houvesse interação, conforme fig. 1.2. Por agora, vamos desprezar a blindagem do núcleo pelos elétrons orbitais. A carga nuclear é  $+Ze$ . Escreve-se, pois, a equação de Newton para o movimento do elétron:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = m\ddot{\mathbf{r}} = -\frac{e^2Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r^3}, \quad (1.5)$$

onde  $\mathbf{r}$  é, naturalmente, o vetor que aponta do núcleo atômico em direção ao elétron que se aproxima dele e depois é espalhado e sua magnitude  $r$  é a distância que os separa. Considerando agora o momento angular  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ , sua derivada temporal torna-se

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{p} + \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{p}} = 0, \quad (1.6)$$

uma vez que  $\dot{\mathbf{r}}$  e  $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}}$  são paralelos e o são também  $\mathbf{r}$  e  $\dot{\mathbf{p}}$  por causa de (1.5). O momento angular é, conseqüentemente, conservado, o que significa que o movimento do elétron é confinado em um plano (no caso da fig. 1.2,

o plano y-z) normal a  $\mathbf{L} = \text{const.}$ . Este é um resultado geral para forças centrais. Neste plano, nós introduzimos coordenadas polares  $r$  e  $\phi$  (fig. 1.2).

A magnitude de  $\mathbf{L}$ ,

$$|\mathbf{L}| = L = mvs, \quad (1.7)$$

é obtida considerando-se o elétron em uma posição A longe do núcleo. A qualquer outro instante, ou a qualquer outra posição, ter-se-á:

$$L = mr^2\dot{\phi} = mvs = \text{constante}. \quad (1.8)$$

A componente y da equação (1.4) torna-se

$$F_y = m \frac{dv_y}{dt} = \frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r^2} \text{sen}\phi = F \text{sen}\phi. \quad (1.9)$$

De (1.8),  $r^2 = \frac{vs}{\dot{\phi}}$ . Introduzindo-se este resultado na equação (1.9), produz-se:

$$\frac{dv_y}{dt} = \frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mvs} \text{sen}\phi \frac{d\phi}{dt}. \quad (1.10)$$

Agora, vamos integrar a expressão (1.10) do ponto A ao ponto C da fig. 1.2. No ponto A,  $v_y = 0$  e o ângulo polar  $\phi \rightarrow 0$ . No ponto C, nós temos  $v_y = v \text{sen}\theta$  e  $\phi \rightarrow \pi + \theta$ . Integrando-se a expressão (1.10) produz-se:

$$\int_0^{v \text{sen}\theta} dv_y = \frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mvs} \int_0^{\pi+\theta} \text{sen}\phi d\phi \quad (1.11)$$

ou

$$v \text{sen}\theta = \frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mvs} (1 + \cos\theta). \quad (1.12)$$

Notando que  $1 + \cos\theta = 2\cos^2\frac{\theta}{2}$  e  $\text{sen}\theta = 2\text{sen}\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$ , vem que  $\cotg\frac{\theta}{2} = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2 Z} mv^2 s$ , ou seja,

$$s = \frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{mv^2} \cotg\frac{\theta}{2}. \quad (1.13)$$

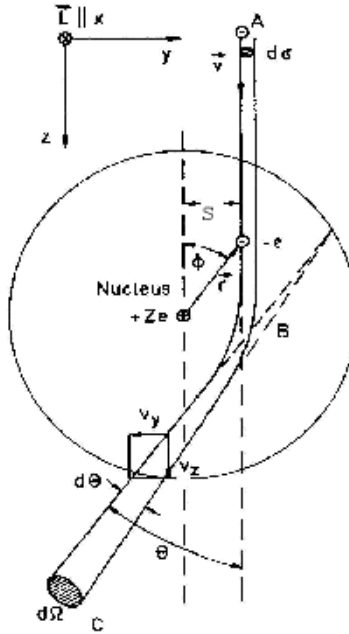


Figura 1.2: Geometria de um evento de espalhamento.  $s$  é o parâmetro de impacto,  $\phi$  é o ângulo entre o vetor velocidade  $\mathbf{v}$  do elétron e sua posição  $\mathbf{r}$  relativamente ao núcleo de carga  $+Ze$ . Fonte: Reimer, L., Scanning electron microscopy: physics of image formation and microanalysis. Berlin; New York: Springer-Verlag, c1985.

Voltando um pouco para a definição de seção de choque de espalhamento elástico, expressão (1.1), vemos que um exame atencioso desta com o auxílio da fig. 1.3, nos leva a concluir que o número de elétrons espalhados em um ângulo sólido  $d\Omega$ , entre  $\theta$  e  $\theta + d\theta$  (se em lugar de um elétron tivéssemos um feixe de elétrons) deve ser igual ao número de elétrons incidentes com parâmetro de impacto entre o  $s$  correspondente e  $s + ds$ :

$$2\pi \frac{d\sigma}{d\theta} I \sin\theta d\theta = 2\pi I s ds, \quad (1.14)$$

ou seja,

$$d\sigma = 2\pi s ds, \quad (1.15)$$

onde na expressão (1.14),  $I$  é a intensidade ou densidade de fluxo do feixe eletrônico incidente, que dá neste caso o número de elétrons atravessando uma unidade de área normal à direção do feixe na unidade de tempo.

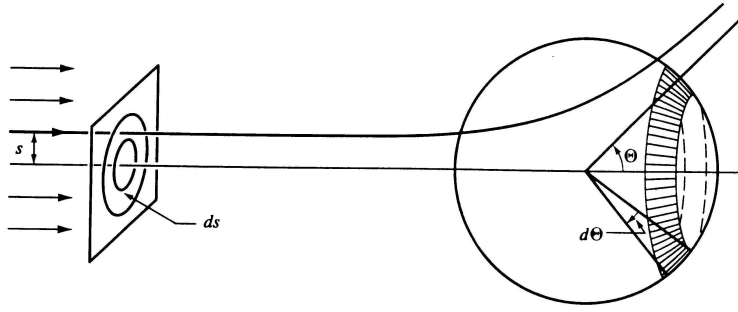


Figura 1.3: O conceito de uma seção de choque diferencial de espalhamento. Fonte: Goldstein et. al.: Classical Mechanics, 3ª ed.

Portanto,

$$d\sigma = 2\pi s ds = \frac{e^4 Z^2}{4(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 v^4} \frac{2\pi \text{sen}\theta d\theta}{\text{sen}^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (1.16)$$

onde  $s$  e  $ds$  são substituídos de (1.13), ou seja,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 Z^2}{4(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 v^4} \frac{1}{\text{sen}^4 \frac{\theta}{2}}, \quad (1.17)$$

a qual é a seção de choque diferencial de Rutherford para espalhamento por um núcleo não-blindado. A seção de choque de Rutherford (1.17) tem uma singularidade a  $\theta \rightarrow 0$ . Pequenos ângulos de espalhamento correspondem a grandes valores de  $s$ , e a singularidade é uma consequência direta do fato de que o campo coulombiano é um campo de longo alcance, que, por sua vez, é gerado por um núcleo não-blindado. Veremos, mais tarde, que, a singularidade desaparece quando a blindagem é considerada.

Para aplicações posteriores, como simulação de Monte Carlo, necessitamos conhecer a seção de choque para eventos de espalhamento através de ângulos de espalhamento  $\theta \geq \alpha$ , ou seja,

$$\sigma(\alpha) = \int_{\alpha}^{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi \text{sen}\theta d\theta. \quad (1.18)$$

Usando a relação  $\text{sen}\theta = 2\text{sen}\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$  e a substituição de variáveis  $u = \text{sen}\frac{\theta}{2}$  e  $du = \cos\frac{\theta}{2} \frac{d\theta}{2}$  obtém-se facilmente que

$$\sigma(\alpha) = \frac{\pi e^4 Z^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 v^4} \cotg^2 \frac{\alpha}{2}. \quad (1.19)$$

A inspeção da equação (1.19) revela uma dependência do espalhamento elástico com o número atômico e a energia eletrônica incidente, com a seção de choque aumentando com o quadrado do número atômico e caindo com o quadrado da energia do elétron. Também, para valores de  $\alpha$  cada vez menores, a seção de choque cresce indefinidamente e vai para o infinito, quando  $\alpha \rightarrow 0$ .

Se considerarmos eventos de espalhamento elástico tais que o ângulo de espalhamento é sempre maior ou igual a  $5^\circ$ , ou seja, aqui  $\alpha = 5^\circ$ , o livre caminho médio pode ser avaliado a partir das relações (1.3) e (1.19). Uma inspeção da relação (1.3) mostra que o livre caminho médio aumenta com a energia eletrônica incidente e cai com o número atômico do elemento químico do qual é constituído o espécime.

### 1.2.2 Espalhamento Inelástico

Durante um evento de espalhamento inelástico, ilustrado na fig. 1.1 (b), energia é transferida a elétrons atômicos, do espécime, pelos elétrons do feixe. Dependendo do tipo de processo, um evento simples de espalhamento inelástico pode transferir qualquer quantidade de energia do feixe eletrônico variando de uma fração de elétron-volts, como no caso da excitação de fônons, a um valor da ordem da energia carregada pelo elétron-sonda incidente, que é da ordem de muitos kiloelétron-volts, como no caso de bremsstrahlung. A despeito da perda de energia, a trajetória do elétron desvia apenas por um pequeno ângulo, da ordem de  $0.1^\circ$  ou menos.

Os processos principais envolvidos no espalhamento inelástico são os seguintes:

1) Excitação de fônons. Uma porção substancial da energia depositada no espécime pelos elétrons do feixe, durante a cascata de processos de espalhamento inelástico, é convertida em fônons ou calor. Na verdade, a excitação de fônons é causada por eventos individuais com pequenas perdas de energia pelos elétrons do feixe, perdas estas menores que 1 eV por elétron. Na maioria dos casos, a condutividade térmica do material é tão alta que o aquecimento do espécime não será um problema sério. A irradiação com pulso eletrônico periódico cria ondas térmicas fortemente amortecidas, as quais podem gerar, por sua vez, ondas acústicas que podem ser detectadas por um transdutor pizoelétrico para formar um sinal de imagem.

2) Excitação de plásmos. Para espécies metálicas, os elétrons mais externos são tão fracamente ligados que em um sólido estes elétrons não pertencem a um átomo específico. Logo, tais elétrons formam um “gás de elétrons livres”. O elétron energético do feixe pode excitar ondas nesta nuvem. Por causa da regularidade do arranjo atômico no espécime, a energia transferida

à nuvem tem valor específico; no alumínio, por exemplo, a excitação de um plásmom custa uma transferência de uma energia de cerca de 15 eV do elétron energético do feixe para os elétrons do gás de elétrons livres.

3) Excitação de elétrons secundários. O espalhamento inelástico dos elétrons energéticos do feixe eletrônico pode fazer com que elétrons fracamente ligados da banda de valência sejam promovidos à banda de condução. Os elétrons excitados terão energia suficiente para o subsequente movimento através do sólido. Nos metais, uma tal promoção pode ocorrer diretamente dos elétrons da banda de condução. Este elétron do espécime que passa a se mover através do sólido é chamado elétron secundário e também está sujeito ao espalhamento inelástico e consequentes perdas de energia. Os elétrons secundários podem ser gerados por excitação inelástica para níveis de energia tão altos que os mesmos podem sobrepujar a função trabalho antes de serem efetivamente desacelerados para o nível de Fermi, conseguindo com isso reter energia suficiente para quando alcançar a superfície do espécime, escapar do sólido como um elétron secundário de fato. A maioria dos elétrons secundários ejetados têm energias inferiores a 10 eV. Elétrons atômicos de orbitais atômicos mais próximos do núcleo, ou seja, mais fortemente ligados, podem ser ejetados com energias cinéticas mais altas, criando os chamados “elétrons secundários rápidos”, que são bem menos numerosos que os elétrons secundários devagares, os quais são ejetados do espécime com energias cinéticas até 50 eV.

4) Geração de Raio X contínuo. Um elétron do feixe eletrônico pode sofrer uma desaceleração no campo coulombiano dos átomos do espécime. A perda de energia pelo elétron do feixe neste processo de desaceleração, é convertida em um fóton. Esta radiação é chamada bremsstrahlung. A energia da radiação eletromagnética, conseqüentemente, pode assumir qualquer valor, desde uns poucos eV até toda a energia carregada pelo elétron incidente. Logo, os raios X de bremsstrahlung formam um espectro contínuo de energia.

5) Ionização de Camadas internas. Um elétron suficientemente energético pode interagir com os átomos do espécime e causar a ejeção de um elétron atômico de uma camada mais interna, levando, com isso, o átomo para um estado excitado. A energia de de-excitação então liberada quando um elétron de um nível mais alto preenche a vacância na camada ionizada pode ser convertida em fótons com energia  $h\nu = E_2 - E_1$ , ou mesmo pode ser transferida para outro elétron atômico que deixará o espécime como um elétron Auger com uma energia cinética característica dada por  $E_2 - E_1$  subtraída pela energia necessária para o elétron sobrepujar a energia de ionização e a função trabalho.

### 1.2.3 Região de Interação

Na figura a seguir esboçamos a região de interação entre um feixe eletrônico e um espécime. Note que a região de interação para qualquer espécime tem a forma aproximada de uma pera. Note que estão esquematizadas também as regiões de onde são provenientes elétrons retroespalhados e elétrons secundários. Naturalmente, elétrons secundários só podem ser provenientes de regiões vizinhas à “garganta” da pera, desde que são ejetados dos átomos, em virtude de interações inelásticas entre elétrons do feixe e os átomos da amostra, com energias bem inferiores que as dos elétrons do feixe, e, a partir daí, sofrem processos inelásticos assim como os elétrons primários do feixe.

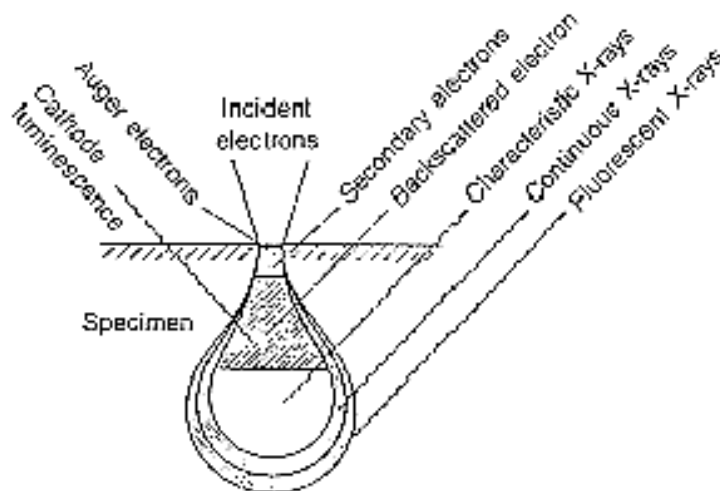


Figura 1.4: Esquema da Região de Interação. Fonte: [www.jeol.com](http://www.jeol.com)

A origem do formato de pera da região de interação para um espécime pode ser compreendida em termos das características do espalhamento elástico e inelástico. De fato, desde que em um processo real ocorrem perdas de energia por parte dos elétrons do feixe, em virtude da cascata de interações inelásticas sofridas por eles, à medida que espalham através da amostra, o livre caminho médio (1.3) cai. Logo, se cai a distância média entre-colisões ou o livre caminho médio à medida que o feixe penetra o espécime, a região ou o volume de interação não pode ser uniforme.

# Capítulo 2

## Monte Carlo

### 2.1 Métodos de integração numérica em uma dimensão

Com o propósito de introduzir métodos de Monte Carlo no contexto do cálculo numérico de integrais definidas, é útil discutir primeiro métodos clássicos de integração numérica. Tais métodos são preferíveis em poucas dimensões, mas não são práticos em integrais multidimensionais perdendo lugar aí para métodos de Monte Carlo.

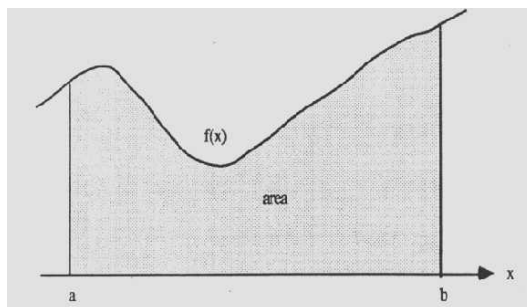


Figura 2.1: A integral (2.1) fornece a área sob a curva  $f(x)$ . Fonte: Gould et. al., An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems Part2.

Considere o problema do cálculo de integrais em uma dimensão da forma

$$\int_a^b dx f(x) \quad (2.1)$$

A integral (2.1) fornece a área sob a curva da função  $f(x)$  de  $x = a$  a  $x = b$ , conforme fig. (2.1). De modo a obter uma estimativa para ela, o eixo  $x$  é dividido em  $n$  sub-intervalos iguais de largura

$$\Delta x = \frac{b - a}{n} \quad (2.2)$$

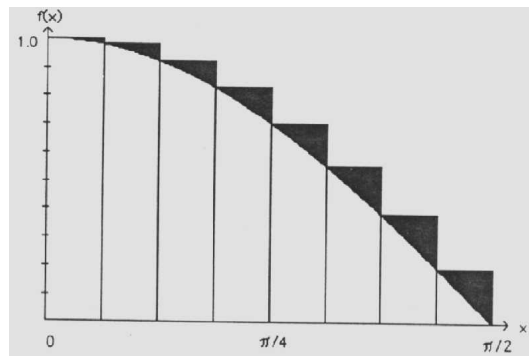


Figura 2.2: A aproximação retangular para  $f(x) = \cos x$  para  $0 \leq x \leq \pi/2$ .  
 Fonte: Gould et. al., An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems Part2.

A estimativa mais simples da área sob a curva de  $f(x)$  é a soma dos retângulos mostrados na fig. 2.2. Na representação retangular usual,  $f(x)$  é avaliada ao início de cada sub-intervalo e uma estimativa para a integral será dada por

$$\sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \Delta x \quad (2.3)$$

onde  $\Delta x$  é calculado em (2.2) Uma outra aproximação é a trapezoidal para a qual a integral é estimada computando-se a área sob um trapézio, onde um de seus lados é igual a  $f(x)$ , no início do sub-intervalo, e o outro lado é igual a  $f(x)$ , no final do sub-intervalo. Com isso, substitui-se a função por uma linha reta conectando os valores de  $f(x)$  no início e no final de cada sub-intervalo. Desde que a área sob a curva de  $x_i$  a  $x_{i+1}$  é dada por  $\frac{1}{2}[f(x_{i+1}) + f(x_i)]\Delta x$ , a área de um trapézio de vértices  $(x_i, 0)$ ,  $(x_{i+1}, 0)$ ,  $(x_i, f(x_i))$ ,  $(x_{i+1}, f(x_{i+1}))$ , a área total será

$$\left[\frac{1}{2}f(a) + \sum_{i=1}^{i=n-1} f(x_i) + \frac{1}{2}f(b)\right]\Delta x. \quad (2.4)$$

## 2.2 Integração numérica de integrais multidimensionais

Muitos problemas físicos envolvem médias sobre muitas variáveis. Por exemplo, é dado um sistema de partículas interagentes, digamos que há  $N$  dessas partículas nesse sistema. Desde que em três dimensões cada partícula tem 3 componentes de posição e 3 componentes de momento, a energia total do sistema é uma função de  $6N$  variáveis. E, conseqüentemente, um cálculo da energia média por partícula envolverá o cálculo de uma integral  $6N$ -dimensional. Seria, então, inviável aplicar as técnicas numéricas usuais para  $N$  grande. Há ainda uma complicação extra, quanto ao cálculo de uma integral  $N$ -dimensional, que diz respeito à definição dos  $N - 1$  limites de integração os quais podem ser difíceis de determinar.

Um método direto para avaliar integrais multidimensionais é reduzir as integrais para um produto de integrais unidimensionais. Este método será eficiente se a fronteira é simples e se a função a ser integrada é bem comportada. Nós ilustramos o método para uma integral bidimensional da forma:

$$\int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dx dy f(x, y) \quad (2.5)$$

A região de integração é determinada pelos limites inferior e superior de  $y$ , aos valores dados de  $x$ , denotados por  $y_1(x)$  e  $y_2(x)$ , respectivamente, e pelos limites inferior e superior de  $x$ , denotados por  $x_1$  e  $x_2$ , respectivamente. Se definirmos a função  $g(x)$  como a integral em  $y$ , interna:

$$g(x) = \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy f(x, y) \quad (2.6)$$

então (2.5) torna-se

$$\int_{x_1}^{x_2} dx g(x) \quad (2.7)$$

## 2.3 Cálculo de Monte Carlo de Integrais unidimensionais

Imagine que queiramos medir a área da superfície de um lago. Se dispusermos de um monte de pedras, uma estimativa desta área pode ser feita. Bom, se o lago está no meio de um campo de área conhecida  $S$ , podemos jogar as pedras de uma maneira tal que elas sempre caiam na região do campo de área  $S$ . Tal um experimento é aleatório em natureza. Aquelas pedras que atingem o lago, logicamente, provocam um barulho, um “splash” e estes eventos são contados. Por conseguinte, a área do lago é, aproximadamente, a área do campo vezes a fração das pedras que fazem um “splash”, ou seja, que atingem o lago de fato. Este simples e clássico exemplo ilustra o método de Monte Carlo.

Vamos utilizar este mesmo raciocínio para avaliar a integral (2.1). O contorno do lago é substituído pela curva  $f(x)$  e os limites do campo tornam-se um retângulo de comprimento  $b - a$  e largura  $H$ . Gera-se, então,  $n$  pares de números aleatórios  $(x_i, y_i)$ , tais que  $a \leq x_i \leq b$  e  $0 \leq y_i \leq H$ . A fração de pontos  $(x_i, y_i)$  tais que  $y_i \leq f(x_i)$  é uma estimativa da razão entre a integral de  $f(x)$  e a área do retângulo. Consequentemente,

$$S \frac{n_S}{n}, \quad (2.8)$$

é uma estimativa para a integral (2.1), onde  $n_S$  é o número de “splashes” ou número de eventos onde um ponto  $(x_i, y_i)$  jaz sob a curva de  $f(x)$ , e  $S$  é a área total do retângulo. Veja a figura 2.3.

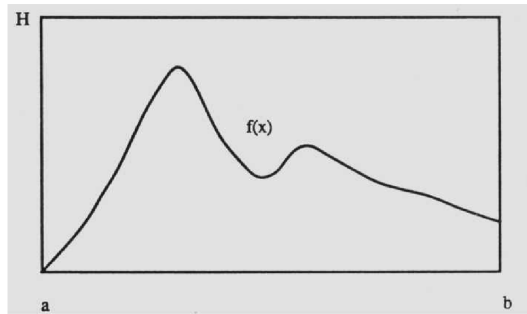


Figura 2.3: A função  $f(x)$  é definida para  $a \leq x \leq b$ . Fonte: Gould et. al., An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems Part2.

Outro procedimento de Monte Carlo é baseado em um Teorema do Cálculo que estabelece que a integral (2.1) é determinada pelo valor médio do inte-

grando  $f(x)$  no intervalo  $a \leq x \leq b$ . De modo a determinar esta média, nós escolhemos os valores de  $x$  no referido intervalo de forma aleatória. Logo, uma estimativa para a integral unidimensional (2.1), segundo esta técnica de “amostragem média” seria dada por

$$(b - a) \langle f(x) \rangle = (b - a) \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{i=n} f(x_i) \quad (2.9)$$

onde os  $x_i$  são números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo  $a \leq x_i \leq b$  e  $n$  é o número total de tentativas ou eventos de gerar números aleatórios  $x_i$ . Observe-se que as expressões (2.3) e (2.9) são idênticas exceto pelo fato de que os  $n$  pontos são escolhidos com igual espaçamento  $\Delta x$  entre eles em (2.3) e com espaçamento aleatório em (2.9). Para integrais de dimensão mais baixa (2.3) é mais útil, mas para integrais de dimensão mais alta (2.9) é mais indicada.

## 2.4 Variáveis Aleatórias

Uma variável aleatória é definida por:

- 1) Um conjunto de valores possíveis chamado o espaço amostral;
- 2) Uma distribuição de probabilidades sobre este conjunto.

O conjunto de valores possíveis de uma variável aleatória pode ser discreto ou contínuo. Como exemplo de quando um tal conjunto é discreto, cite-se o número de elétrons na banda de condução de um semiconductor, ou o número de moléculas de um certo componente quando em uma mistura, reagindo nesta mistura, ou ainda o número de elétrons retroespalhados por uma determinada amostra em um microscópio eletrônico. Agora, como um exemplo de quando um tal conjunto é contínuo, cite-se uma componente da velocidade ou momento linear de uma partícula browniana, a qual é definida para valores que vão desde  $-\infty$  até  $+\infty$ . Ou mesmo, o módulo do momento transferido para um determinado elétron do feixe eletrônico que penetra um sólido qualquer, num certo evento de espalhamento elástico, em um experimento de microscopia eletrônica. Neste último caso, a variável estocástica momento transferido pertenceria ao intervalo que vai de 0 a  $2P$ , onde  $P$  é o módulo do momento linear do elétron no instante de tempo do evento.

A distribuição de probabilidades da variável aleatória  $X$ , no caso de um intervalo unidimensional contínuo, é dada por uma função  $p_X(x)$ , que é não-negativa,

$$p_X(x) \geq 0, \quad (2.10)$$

e normalizada no sentido que

$$\int p_X(x) dx = 1, \quad (2.11)$$

onde a integral se estende sobre todo o intervalo ou espaço amostral. A probabilidade com que  $X$  tenha um valor entre  $x$  e  $x + dx$  é  $p_X(x)dx$ .

Como uma descrição alternativa de uma distribuição de probabilidades, em uma dimensão, frequentemente usa-se ao invés de  $p_X(x)$ , uma função  $P(x)$ , definida como a probabilidade total que  $X$  tenha valor qualquer  $\leq x$ . Então:

$$P(x) = \int_{-\infty}^x p_X(x') dx', \quad (2.12)$$

onde o limite superior de integração inclui um pico delta, eventual, em  $x$ , já que  $P(x)$  é a probabilidade que  $X$  tome um valor  $\leq x$ . A interpretação geométrica de  $P(x)$  é que  $P(x)$  é a área fracionária sob a curva de  $p(x)$  à esquerda de  $x$ . Os físicos chamam  $P$  a função distribuição cumulativa mas preferem usar  $p$ .

### 2.4.1 Médias

O conjunto de estados e a distribuição de probabilidades juntos definem completamente a variável aleatória, mas um número adicional de conceitos deve ser usado. O valor médio ou esperado de qualquer função  $f(X)$  definida sobre o mesmo espaço de estados ou espaço amostral é

$$\langle f(X) \rangle = \int f(x)p(x)dx$$

Em particular,  $\langle X^m \rangle = \mu_m$  é chamado o  $m$ -ésimo momento de  $X$ , e  $\mu_1$  é o valor médio ou valor esperado da variável estocástica  $X$ . Também:

$$\sigma^2 = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = \mu_2 - \mu_1^2 \quad (2.13)$$

é chamada a variância ou dispersão, que é o quadrado do desvio-padrão  $\sigma$ .

## 2.4.2 Distribuição de Probabilidades não-uniformes

Seja  $X$  um número aleatório uniformemente distribuído no intervalo  $[0, 1]$  com a função densidade de probabilidade

$$p_X(x) = \begin{cases} 1, & \text{se } 0 \leq x \leq 1; \\ 0, & \text{para outros } x. \end{cases} \quad (2.14)$$

Uma variável que satisfaz a densidade de probabilidade (2.14) é dita ser um desvio uniforme. Suponhamos que há uma outra variável aleatória  $Y$  tal que  $p_Y(y)dy$  é a probabilidade com que  $Y$  esteja no intervalo  $[y, y + dy)$  e

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy p_Y(y) = 1$$

Deseja-se encontrar a relação entre  $X$  e  $Y$  tal que se  $X$  é distribuída de acordo com (2.14),  $Y$  será distribuída de acordo com  $p_Y(y)$ . De modo a obtermos uma tal relação, primeiro avalia-se a integral

$$P(y) = \int_{-\infty}^y dy' p_Y(y')$$

Já é sabido que  $P(y)$  é a função distribuição cumulativa para a variável aleatória  $Y$ . Definindo:

$$P(Y) = X \quad (2.15)$$

obtemos

$$Y = P^{-1}(X) \quad (2.16)$$

Da relação (2.15), desde que  $X$  é uniformemente distribuída no intervalo unitário, a função  $P(Y)$ , que é relacionada a  $X$  segundo (2.15) propriamente, o também é. A probabilidade com que  $P(Y)$  esteja no intervalo  $[P(y), P(y) + dP(y))$  é  $dP(y)$ , que de acordo com (2.15) é  $dx$ . Agora, a partir de (2.12), vem que:

$$\frac{dP(y)}{dy} = p_Y(y) \quad (2.17)$$

na variável  $Y$ . Consequentemente, usando (2.14) e para  $0 \leq X \leq 1$

$$dP(y) = p_Y(y)dy = p_X(x)dx \quad (2.18)$$

De (2.18) vemos que  $Y$  é distribuída segundo a densidade de probabilidades  $p_Y(y)$ .

A sequência de passos associados com o método da transformação inversa é gerar um número aleatório  $X$  e resolver (2.16) para o valor correspondente de  $Y$ .

Em simulações de Monte Carlo, normalmente trata-se a distância percorrida entre colisões por um elétron espalhado por um sólido como uma variável aleatória  $S$  tal que  $0 \leq S < \infty$  e  $S$  é distribuída segundo a densidade de probabilidade

$$p_S(s) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{s}{\lambda}}, & \text{se } 0 \leq s < \infty; \\ 0, & \text{para outros } s. \end{cases} \quad (2.19)$$

O número real  $\lambda$  é identificado com o livre caminho médio. A escolha de (2.19) como sendo a densidade de probabilidade para a variável aleatória distância percorrida entre colisões  $S$  tem suas razões matemáticas, uma vez que:

$$\langle S \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} p_S(s) s ds}{\int_{-\infty}^{+\infty} p_S(s) ds} = \lambda \quad (2.20)$$

Desejamos aplicar o método da transformação inversa desenvolvido aqui à densidade (2.19). Se substituirmos então (2.19) em (2.12) e efetuarmos a integração, nós encontramos:

$$\begin{aligned} P(s) &= \int_{-\infty}^s ds' p(s') = \int_0^s ds' p(s') = \left(\frac{1}{\lambda}\right) \int_0^s ds' e^{-\frac{s'}{\lambda}} = \left(\frac{1}{\lambda}\right) (-\lambda e^{-\frac{s'}{\lambda}}) = \\ &= 1 - e^{-\frac{s}{\lambda}} \end{aligned}$$

Agora, dada uma variável aleatória  $X$  distribuída uniformemente no intervalo  $[0, 1]$  segundo (2.14), vem que:

$$S = P^{-1}(X) = -\lambda \ln(1 - X)$$

Desde que  $1 - X$  é distribuída da mesma forma que  $X$  (tanto  $X$  quanto  $1 - X$  são variáveis aleatórias uniformemente distribuídas sobre o intervalo  $[0, 1]$ ), pode-se escrever que

$$S = P^{-1}(X) = -\lambda \ln X \quad (2.21)$$

A variável  $S$  encontrada em (2.21) é distribuída de acordo com a densidade de probabilidade (2.19). Para aplicar o método de transformação inversa, duas condições devem ser satisfeitas. A primeira é quanto à forma de  $P(y)$ . A forma de  $P(y)$  deve permitir que a integral

$$P(y) = \int_{-\infty}^y dy' p_Y(y')$$

possa ser desenvolvida analítica ou numericamente. A segunda condição, por sua vez, estabelece que deve ser factível inverter a relação (2.15) para na relação (2.16) sermos capazes de expressar  $Y$  em termos da variável  $X$ , um número aleatório uniformemente distribuído no intervalo unitário.

## 2.5 O Método de Rejeição

O método de transformação inversa discutido anteriormente é limitado a funções para as quais a função de transformação inversa  $P^{-1}(y)$  pode ser encontrada analiticamente ou aproximada numericamente. Necessitamos, portanto, de um outro método para gerar distribuições de probabilidade que, em princípio, não seriam realizadas em um processo computacional via o primeiro método. O método que procuramos para achar distribuições de probabilidade não uniformes tais que  $P^{-1}(y)$  não é avaliável chama-se *Método de Rejeição*. Esta técnica é baseada na generalização da técnica de Monte Carlo usada na estimativa de integrais definidas discutida na Seção (2.3).

Suponhamos que  $p_X(x)$  é a função densidade de probabilidade, não uniforme, que desejamos gerar. Consideremos, agora, uma função comparação  $f(x)$ , tal que  $f(x) > p_X(x)$  no intervalo de interesse, ou seja, o espaço amostral da variável aleatória  $X$ . Aqui,  $X$  é uma variável aleatória distribuída não-uniformemente sobre um intervalo arbitrário. Uma simples e prática, porém nem sempre ótima, escolha de  $f(x)$  é uma constante igual ao valor máximo de  $p_X(x)$ . Desde que a área sob a curva de  $p(x)$  no intervalo de  $x$  a  $x + \Delta x$  é a probabilidade de gerar algum  $X$  nesse intervalo, podemos desenvolver um procedimento similar ao usado para estimar integrais definidas. Começamos com a geração de dois números aleatórios que definem a posição de um ponto aleatório o qual é distribuído uniformemente sobre a área sob a curva da função comparação  $f(x)$ . Se este ponto está fora da área sob a curva de  $p_X(x)$ , o ponto é rejeitado; senão, se ele jaz dentro da área, ele é aceito. Os pontos aceitos são, por conseguinte, uniformes sobre a área sob a curva de  $p_X(x)$  e as correspondentes abscissas são distribuídas conforme  $p_X(x)$ .

Vamos estabelecer um procedimento para gerar um ponto aleatório  $(x, y)$ , sob a curva da função comparação  $f(x)$ . Para começar, a forma funcional de  $f(x)$  deve ser definida. Seja então  $A$  a área total sob a curva de  $f(x)$ . Geramos um número aleatório uniforme no intervalo  $[0, A]$  e usamo-lo para obter um valor correspondente de  $X$  da seguinte maneira. Seja a função:

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(x') dx' \quad (2.22)$$

que define a área sob a curva de  $f(x)$  no intervalo  $(-\infty, x]$ . Dada a área total  $A$  de  $f(x)$ , e uma variável aleatória  $A$  uniformemente distribuída no intervalo  $[0, A]$ , então  $X$  assume o valor

$$X = F^{-1}(A) \quad (2.23)$$

É imprescindível que  $F$  seja inversível de modo que a cada valor  $A$  gerado no intervalo  $[0, A]$ , haja em correspondência um único  $x$ , distribuído segundo  $p_X(x)$  sobre o espaço amostral de  $X$ , conhecido de antemão. Obtido então  $x$ , obtemos também um número aleatório uniforme  $Y$  que pertence ao intervalo  $[0, f(x)]$ . O ponto  $(x, y)$  é uniformemente distribuído sobre a área sob a curva da função comparação  $f(x)$ . Se  $y \leq p_X(x)$ , então aceitamos  $x$  como um número aleatório distribuído de acordo com  $p_X(x)$ . Tal procedimento é repetido muitas vezes.

# Capítulo 3

## O Primeiro Modelo: Rutherford não-blindado

### 3.1 Introdução

Na discussão a seguir, um número “aleatório” é um número uniformemente distribuído em um intervalo unitário. Em nosso caso, para a simulação das trajetórias de um feixe eletrônico através de um sólido, é de extrema importância o uso de um gerador de números aleatórios no intervalo  $[0,1]$ . Um tal gerador usa uma semente pré-definida e, quando solicitado, gera uma sequência de números a qual varia se mudarmos a semente.

### 3.2 O Modelo

Ao fazermos uma simulação de Monte Carlo do espalhamento de um elétron procuramos calcular a trajetória desse elétron. As interações sofridas pelo elétron dentro do sólido podem ser elásticas ou inelásticas, logo as mudanças tanto na direção de movimento quanto na energia do elétron seriam avaliadas sobre a base da sequência de eventos de espalhamento sofrida por ele. Para ilustrar, vamos estabelecer que a sequência de eventos é descrita pela seção de choque de Rutherford obtida na seção 1.2 do Capítulo 1. Nesta situação, o elétron sofre uma sequência de eventos de espalhamento elástico.

A base geométrica para a simulação considera que o elétron sofre um evento de espalhamento elástico na posição  $\mathbf{X}_n$ , tendo vindo para  $\mathbf{X}_n$  de um evento de espalhamento anterior em  $\mathbf{X}_{n-1}$ . Um dos objetivos principais da simulação é computar as coordenadas da posição  $\mathbf{X}_{n+1}$  para a qual o elétron se desloca como resultado do evento de espalhamento em  $\mathbf{X}_n$ . O único parâmetro que descreve a situação instantânea do elétron é o ângulo

entre o segmento de reta que vai de  $\mathbf{X}_n$  a  $\mathbf{X}_{n+1}$  e o segmento de reta que vai de  $\mathbf{X}_{n-1}$  a  $\mathbf{X}_n$ , o qual é o ângulo de espalhamento elástico. A energia cinética e o momento linear do elétron são, por enquanto, conservados durante todo o processo. Veja a fig. 3.1 que esboça a geometria do problema.

Para calcular a posição do novo ponto de espalhamento  $\mathbf{X}_{n+1}$ , primeiro necessitamos conhecer a distância entre  $\mathbf{X}_{n+1}$  e o ponto de espalhamento precedente  $\mathbf{X}_n$ . Como estabelecido acima, uma hipótese deste modelo particular é que apenas eventos de espalhamento elástico ocorrem. A distância entre eventos de espalhamento sucessivos é conseqüentemente relacionada ao livre caminho médio elástico, o qual, por sua vez, é função da seção de choque elástica total. A seção de choque elástica total de Rutherford é dada por:

$$\sigma(\alpha) = \frac{\pi e^4 Z^2}{4(4\pi\epsilon_0)^2 E^2} \cotg^2 \frac{\alpha}{2}. \quad (3.1)$$

Na seção (1.2.1) do Capítulo 1, discutimos a necessidade de impor um ângulo de espalhamento mínimo  $\theta_{min.} = \alpha$ .

A seção de choque elástica total define um livre caminho médio elástico  $\lambda$ , o qual é dado por:

$$\lambda = \frac{A}{N_a \rho \sigma(\alpha)} \quad (3.2)$$

onde  $N_a$  é o número de Avogadro,  $\rho$  é a densidade do espécime e  $A$  é a massa atômica do espécime. Conforme já discutido na seção 2.5.2  $\lambda$  representa a distância média que um elétron trafegará entre eventos sucessivos de espalhamento elástico. Uma tal distância variará, é claro, de maneira aleatória. Conforme seção 2.5.2 e expressão (2.19), a probabilidade  $p_S(s)$  de um elétron se deslocar de uma distância  $s$ , entre eventos de colisão sucessivos, quando o livre caminho médio é  $\lambda$ , é

$$p_S(s) = \begin{cases} \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{s}{\lambda}}, & \text{se } 0 \leq s < \infty; \\ 0, & \text{para outros } s. \end{cases} \quad (3.3)$$

Uma estimativa para a distância percorrida pode então ser encontrada escolhendo-se um número aleatório  $R$  e resolvendo a equação (2.21):

$$S = -\lambda \ln(R) \quad (3.4)$$

No evento de espalhamento em  $\mathbf{X}_n$ , o elétron é defletido através de um ângulo  $\theta$  relativamente à sua direção de movimento (Veja a fig. 3.1). O caminho em que este evento de espalhamento ocorre é descrito pela seção de choque diferencial elástica de Rutherford, dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\theta} = \frac{\pi e^4 Z^2}{8(4\pi\epsilon_0)^2 E^2} \frac{\text{sen}\theta}{\text{sen}^4\frac{\theta}{2}}, \quad (3.5)$$

Conforme a equação (1.1) do Capítulo 1,  $\frac{d\sigma}{d\theta}$  é a razão entre o número de elétrons espalhados entre um ângulo de espalhamento  $\theta$  e  $\theta + d\theta$ , por unidade de tempo, e a intensidade incidente.  $\sigma(\alpha)$  por sua vez, é o número total de elétrons espalhados por unidade de tempo dividido pela intensidade do feixe incidente. Por conseguinte:

$$\frac{d\sigma/d\theta}{\sigma(\alpha)} d\theta = \frac{\text{N}^\circ \text{ de elétrons espalhados entre } \theta \text{ e } \theta + d\theta}{\text{N}^\circ \text{ de elétrons espalhados entre } \alpha \text{ e } \pi}$$

implicando em:

$$\frac{d\sigma/d\theta}{\sigma(\alpha)} = \text{tg}^2 \frac{\alpha}{2} \frac{\cos\frac{\theta}{2}}{\text{sen}^3\frac{\theta}{2}}, \quad (3.6)$$

A expressão (3.6), na verdade, traz consigo um resultado bastante profundo. Ela é a probabilidade com que um elétron particular do feixe eletrônico é espalhado entre um ângulo de espalhamento  $\theta$  e  $\theta + d\theta$ , em um certo evento de espalhamento elástico. Logo, a densidade de probabilidade para o ângulo de espalhamento escreve-se:

$$p_{\Theta}(\theta) = \text{tg}^2 \frac{\alpha}{2} \frac{\cos\frac{\theta}{2}}{\text{sen}^3\frac{\theta}{2}} \quad (3.7)$$

para ângulos de espalhamento no intervalo  $[\alpha, \pi]$ . A fim de selecionar um ângulo de espalhamento  $\Theta$  em tal intervalo, usamos o método de rejeição discutido seção 2.5 do Capítulo 2. Usamos como função comparação  $f(\theta) = 2 \text{cossec } \alpha$ , a qual é uma função constante cujo valor é o valor máximo assumido pela densidade (3.7). Um ponto aleatório uniformemente distribuído sobre a área sob a curva da função comparação  $f(\theta) = 2 \text{cossec } \alpha$ ,  $(x, y)$ , para o qual  $y \leq p(x)$ , em um dado instante, é aceito, sendo  $x$  distribuído segundo (3.7). Nesse instante,  $x$  será o ângulo de espalhamento ou a deflexão angular sofrida

pelo elétron, relativamente à sua direção de movimento antes do evento de colisão acontecer.

Novamente com respeito à base geométrica da simulação, conforme a fig. 3.1., o feixe de elétrons incide normalmente à superfície da amostra e um elétron em particular percorrerá uma distância arbitrária, fornecida pela equação (3.4), até que sofra uma colisão. Este evento é descrito pelo sistema de referências  $X_{1,0}, X_{2,0}, X_{3,0}$ . O eixo  $X_{3,0}$  aponta na direção de movimento do elétron, e os eixos  $X_{1,0}$  e  $X_{2,0}$  estão sobre o plano da superfície da amostra. Este sistema de eixos é centrado justamente no ponto sobre a superfície da amostra em que o elétron penetra-a e localiza o primeiro ponto de espalhamento. Após percorrer uma distância dada por (3.4) e sofrer o primeiro evento de espalhamento, o elétron além de percorrer uma nova e arbitrária distância também sofrerá um desvio angular  $\theta_1$  com respeito à sua direção inicial de movimento. Além disso, o elétron também sofre um desvio angular no plano  $X_{1,0}X_{2,0}$ , o qual é o ângulo de espalhamento azimutal  $\phi_1$ , que é dado por:

$$\phi_1 = 2\pi R \quad (3.8)$$

onde  $R$  é uma variável aleatória uniformemente distribuída no intervalo  $[0,1]$ . Para descrever seu movimento após este primeiro evento de espalhamento é conveniente estabelecer o sistema de eixos  $X_{1,1}, X_{2,1}, X_{3,1}$ , cuja origem é posta justamente sobre o primeiro ponto de espalhamento. O sistema de eixos  $X_{1,1}, X_{2,1}, X_{3,1}$  localizará o segundo ponto de espalhamento, assim como o primeiro ponto de espalhamento é localizado pelo sistema de eixos  $X_{1,0}, X_{2,0}, X_{3,0}$ . Após sofrer sua segunda colisão, o elétron do feixe sofre deflexões angulares  $\theta_2$  e  $\phi_2$  e percorrerá uma determinada distância (aleatória) sobre a direção definida pelos ângulos de espalhamento  $\theta_2$  e  $\phi_2$  (com respeito à sua direção de movimento anterior) até que sofra uma nova colisão. Estabelece-se, pois, o sistema de eixos  $X_{1,2}, X_{2,2}, X_{3,2}$ , centrado ao segundo ponto de espalhamento, e que determinará exatamente a posição relativa do terceiro ponto de espalhamento.

Sejam  $\hat{x}_{1,1}, \hat{x}_{2,1}$  e  $\hat{x}_{3,1}$  vetores unitários e mutuamente ortogonais, tais que  $\hat{x}_{i,j} \cdot \hat{x}_{i',j} = \delta_{i,i'}$ , os quais expandem o sistema de eixos original, posto sobre a superfície da amostra. Note que estamos adotando a convenção tal que  $\hat{x}_{i,j}$  é o vetor unitário que aponta na direção do  $i$ -ésimo eixo ao  $j$ -ésimo ponto de espalhamento. Diz-se que os vetores unitários  $\hat{x}_{1,1}, \hat{x}_{2,1}$  e  $\hat{x}_{3,1}$  expandem o sistema de eixos original, uma vez que o sistema de eixos colocado sobre o primeiro ponto de espalhamento e que determina a posição relativa do segundo ponto de espalhamento nada mais é que o sistema de eixos original

deslocado ao longo da direção de movimento do elétron, antes do primeiro evento de espalhamento. Naturalmente:

$$\hat{x}_{3,2} = \hat{x}_{1,1}\text{sen}\theta_1\cos\phi_1 + \hat{x}_{2,1}\text{sen}\theta_1\text{sen}\phi_1 + \hat{x}_{3,1}\cos\theta_1 \quad (3.9)$$

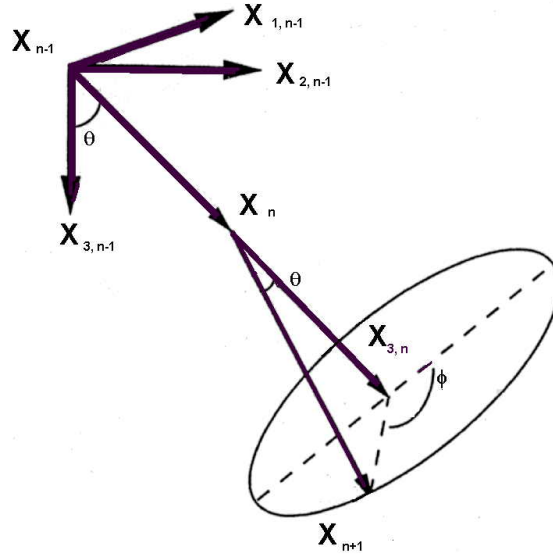


Figura 3.1: Geometria da Simulação.

Os vetores unitários  $\hat{x}_{1,2}$  e  $\hat{x}_{2,2}$ , são arbitrários. De fato, a experiência mostra que há uma razoável simetria do volume de interação com respeito às direções  $X_{1,0}$  e  $X_{2,0}$ . Estes vetores unitários serão tais que:

$$\hat{x}_{2,2} = \frac{\hat{x}_{1,1} \times \hat{x}_{3,1}}{|\hat{x}_{1,1} \times \hat{x}_{3,1}|}, \quad \hat{x}_{1,2} = \hat{x}_{2,2} \times \hat{x}_{3,2} \quad (3.10)$$

Das equações (3.10) vem que:

$$\hat{x}_{1,2} = \frac{-(\text{sen}^2\theta_1\text{sen}^2\phi_1 + \cos^2\theta_2)\hat{x}_{1,1} + \text{sen}^2\theta_1\text{sen}\phi_1\cos\phi_1\hat{x}_{2,1} + \text{sen}\theta_1\cos\theta_1\cos\phi_1\hat{x}_{3,1}}{[\text{sen}^2\theta_1\text{sen}^2\phi_1 + \cos^2\theta_1]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.11)$$

$$\hat{x}_{2,2} = \frac{-\hat{x}_{2,1}\cos\theta_1 + \hat{x}_{3,1}\text{sen}\theta_1\text{sen}\phi_1}{[\text{sen}^2\theta_1\text{sen}^2\phi_1 + \cos^2\theta_1]^{\frac{1}{2}}}$$

Por extensão, a cada evento de colisão, digamos, o  $n$ -ésimo evento, estabelece-se o  $n-1$ -ésimo sistema de referências, digamos, o sistema  $X_{1,n-1}, X_{2,n-1}, X_{3,n-1}$  em relação ao qual descreve-se um tal evento de espalhamento. Este sistema de eixos é centrado no  $n-1$ -ésimo ponto de espalhamento. Ainda, relativamente ao  $n-1$ -ésimo sistema de eixos, o eixo  $X_{3,n-1}$  estará exatamente sobre a direção do vetor momento linear do elétron após a  $n-1$ -ésima colisão. Veremos mais adiante como um tal procedimento ajuda e muito na determinação da trajetória de cada elétron do feixe através do espécime. Segue:

$$\hat{x}_{1,n+1} = \frac{-(\text{sen}^2\theta_n \text{sen}^2\phi_n + \text{cos}^2\theta_n)\hat{x}_{1,n} + \text{sen}^2\theta_n \text{sen}\phi_n \text{cos}\phi_n \hat{x}_{2,n} + \text{sen}\theta_n \text{cos}\theta_n \text{cos}\phi_n \hat{x}_{3,n}}{[\text{sen}^2\theta_n \text{sen}^2\phi_n + \text{cos}^2\theta_n]^{\frac{1}{2}}}$$

$$\hat{x}_{2,n+1} = \frac{-\hat{x}_{2,n} \text{cos}\theta_n + \hat{x}_{3,n} \text{sen}\theta_n \text{sen}\phi_n}{[\text{sen}^2\theta_n \text{sen}^2\phi_n + \text{cos}^2\theta_n]^{\frac{1}{2}}} \quad (3.12)$$

$$\hat{x}_{3,n+1} = \hat{x}_{1,n} \text{sen}\theta_n \text{cos}\phi_n + \hat{x}_{2,n} \text{sen}\theta_n \text{sen}\phi_n + \hat{x}_{3,n} \text{cos}\theta_n$$

Note que em (3.10) e (3.11) obtivemos os vetores unitários que expandem o sistema de eixos  $X_{1,2}, X_{2,2}, X_{3,2}$  em termos do sistema original. Em um passo futuro obteríamos os vetores unitários  $\hat{x}_{1,3}, \hat{x}_{2,3}$  e  $\hat{x}_{3,3}$  em termos dos vetores  $\hat{x}_{1,2}, \hat{x}_{2,2}$  e  $\hat{x}_{3,2}$ , que, por sua vez são expressos em termos dos vetores unitários originais. Logo, é completamente possível escrever os vetores unitários  $\hat{x}_{1,3}, \hat{x}_{2,3}$  e  $\hat{x}_{3,3}$  em termos dos vetores originais  $\hat{x}_{1,1}, \hat{x}_{2,1}$  e  $\hat{x}_{3,1}$ . De fato, considere a matriz:

$$C^{(i)} = \begin{bmatrix} C_{1,1}^{(i)} & C_{1,2}^{(i)} & C_{1,3}^{(i)} \\ C_{2,1}^{(i)} & C_{2,2}^{(i)} & C_{2,3}^{(i)} \\ C_{3,1}^{(i)} & C_{3,2}^{(i)} & C_{3,3}^{(i)} \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

onde

$$C_{1,1}^{(i)} = \frac{-(\text{sen}^2\theta_i \text{sen}^2\phi_i + \text{cos}^2\theta_i)}{[\text{sen}^2\theta_i \text{sen}^2\phi_i + \text{cos}^2\theta_i]^{\frac{1}{2}}},$$

$$C_{1,2}^{(i)} = \frac{\text{sen}^2\theta_i \text{sen}\phi_i \text{cos}\phi_i}{[\text{sen}^2\theta_i \text{sen}^2\phi_i + \text{cos}^2\theta_i]^{\frac{1}{2}}},$$

$$\begin{aligned}
C_{1,3}^{(i)} &= \frac{\text{sen}\theta_i \cos\theta_i \cos\phi_i}{[\text{sen}^2\theta_i \text{sen}^2\phi_i + \cos^2\theta_i]^{\frac{1}{2}}} , \\
C_{2,1}^{(i)} &= 0 , \\
C_{2,2}^i &= \frac{-\cos\theta_i}{[\text{sen}^2\theta_i \text{sen}^2\phi_i + \cos^2\theta_i]^{\frac{1}{2}}} , \\
C_{2,3}^{(i)} &= \frac{\text{sen}\theta_i \text{sen}\phi_i}{[\text{sen}^2\theta_i \text{sen}^2\phi_i + \cos^2\theta_i]^{\frac{1}{2}}} , \\
C_{3,1}^{(i)} &= \text{sen}\theta_i \cos\phi_i , \\
C_{3,2}^{(i)} &= \text{sen}\theta_i \text{sen}\phi_i , \\
C_{3,3}^{(i)} &= \cos\theta_i .
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Dessa forma, as equações (3.10) e (3.11) podem ser reescritas como:

$$\begin{aligned}
\hat{x}_{1,2} &= C_{1,1}^{(1)} \hat{x}_{1,1} + C_{1,2}^{(1)} \hat{x}_{2,1} + C_{1,3}^{(1)} \hat{x}_{3,1} , \\
\hat{x}_{2,2} &= C_{2,1}^{(1)} \hat{x}_{1,1} + C_{2,2}^{(1)} \hat{x}_{2,1} + C_{2,3}^{(1)} \hat{x}_{3,1} , \\
\hat{x}_{3,2} &= C_{3,1}^{(1)} \hat{x}_{1,1} + C_{3,2}^{(1)} \hat{x}_{2,1} + C_{3,3}^{(1)} \hat{x}_{3,1} ,
\end{aligned} \tag{3.15}$$

ou seja,

$$\hat{x}_{k,2} = \sum_{j=1}^{j=3} C_{k,j}^{(1)} \hat{x}_{j,1} \tag{3.16}$$

e, as equações (3.12) tornam-se, com  $n = 2$ :

$$\hat{x}_{1,3} = C_{1,1}^{(2)} \hat{x}_{1,1} + C_{1,2}^{(2)} \hat{x}_{2,1} + C_{1,3}^{(2)} \hat{x}_{3,1} ,$$

$$\hat{x}_{2,3} = C_{2,1}^{(2)}\hat{x}_{1,1} + C_{2,2}^{(2)}\hat{x}_{2,1} + C_{2,3}^{(2)}\hat{x}_{3,1} , \quad (3.17)$$

$$\hat{x}_{3,3} = C_{3,1}^{(2)}\hat{x}_{1,1} + C_{3,2}^{(2)}\hat{x}_{2,1} + C_{3,3}^{(2)}\hat{x}_{3,1} ,$$

ou seja,

$$\hat{x}_{k,3} = \sum_{j=1}^{j=3} C_{k,j}^{(2)}\hat{x}_{j,2} \quad (3.18)$$

Inserindo a equação (3.16) em (3.18), surge que:

$$\hat{x}_{k,3} = \sum_{l=1}^{l=3} \sum_{j=1}^{j=3} C_{k,l}^{(2)}C_{l,j}^{(1)}\hat{x}_{j,1} , \quad (3.19)$$

ou seja,

$$\hat{x}_{k,3} = \sum_{j=1}^{j=3} D_{i,j}^{(3)}\hat{x}_{j,1} , \quad (3.20)$$

onde,

$$D_{i,j}^{(3)} = \sum_{k=1}^{k=3} C_{i,k}^{(2)}C_{k,j}^{(1)} \quad (3.21)$$

Logo, por indução,

$$\hat{x}_{k,n} = \sum_{j=1}^{j=3} D_{k,j}^{(n)}\hat{x}_{j,1} \quad (3.22)$$

onde

$$D_{k,j}^{(n)} = \sum_{j_1, j_2, \dots, j_{n-1}} C_{k, j_{n-1}}^{(n-1)} C_{j_{n-1}, j_{n-2}}^{(n-2)} \cdot \dots \cdot C_{j_1, 1}^{(1)} \quad (3.23)$$

para  $n \geq 1$ .

É importante frisar que uma tal análise em termos da redução de sistemas de eixos cartesianos com uma origem a cada ponto de espalhamento para um sistema de eixos coincidente ao sistema original serve para descrever as posições subsequentes do elétron a partir do primeiro ponto de espalhamento. Se quisermos determinar de fato a posição deste em relação ao sistema de eixos original, deve-se somar aquele deslocamento inicial do elétron, na direção  $X_{3,1}$ , logo após penetrar o espécime, antes de sofrer sua primeira colisão. Logo, após sofrer  $n$  colisões na amostra, a posição de um elétron do feixe será:

$$(x_1^n, x_2^n, x_3^n, ) \quad (3.24)$$

onde

$$x_1^n = -\lambda \sum_{i=1}^{i=n} \ln R_i [D_{3,1}^i \cos \theta_i + D_{2,1}^i \sin \theta_i \sin \phi_i + D_{1,1}^i \sin \theta_i \cos \phi_i] ,$$

$$x_2^n = -\lambda \sum_{i=1}^{i=n} \ln R_i [D_{3,2}^i \cos \theta_i + D_{2,2}^i \sin \theta_i \sin \phi_i + D_{1,2}^i \sin \theta_i \cos \phi_i] , e,$$

$$x_3^n = -\lambda \ln R_0 - \lambda \sum_{i=1}^{i=n} \ln R_i [D_{3,3}^i \cos \theta_i + D_{2,3}^i \sin \theta_i \sin \phi_i + D_{1,3}^i \sin \theta_i \cos \phi_i]$$

Obviamente,

$$D^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

Os  $R_i$  são números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo  $[0, 1]$ .

Finalmente, escreve-se agora um procedimento reduzido o qual é utilizado computacionalmente para simulação de Monte Carlo de prováveis trajetórias percorridas por elétrons de um feixe através de um sólido:

### 3.2.1 Algoritmo 1

- Calcule o livre caminho médio;
- Repita:

- Determine as coordenadas  $x^{(1)}$ ,  $y^{(1)}$  e  $z^{(1)}$  para a penetração inicial do elétron;
- Repita:
  - Determine as deflexões angulares  $\theta^{(n-1)}$  e  $\phi^{(n-1)}$ ;
  - Determine a  $n$ -ésima distância percorrida, após a  $n - 1$ -ésima colisão;
  - Então encontre as coordenadas  $x^{(n)}$ ,  $y^{(n)}$  e  $z^{(n)}$  do elétron conforme procedimento descrito a pouco;
  - Se  $n > 1000$  então pare;
  - Se  $z^{(n)} < 0$  (ou seja, se o elétron deixa a amostra) então pare;
  - Se o número de trajetórias excede 1000000 então pare.

### 3.3 Primeiros Resultados

Para o presente caso, simulamos o espalhamento através do ouro supondo-se energias de feixe de 2.0 keV e 5.0 keV. Confeccionamos uma série de histogramas, a saber:

- número de eventos versus distância radial;
- número de eventos versus profundidade; e mais quatro gráficos, a saber:
  - Gráfico  $\langle \cos(\theta) \rangle$  versus Número de colisões
  - Gráfico  $\ln \langle \cos(\theta) \rangle$  versus Número de colisões
  - Gráfico Z versus X para uma energia de 2.0 keV;
  - Gráfico Z versus X para uma energia de 5.0 keV;

Para a construção dos histogramas, tomou-se a maior distância percorrida por um elétron absorvido pela amostra, tanto na direção radial quanto na direção longitudinal, e dividiu-se por 1000, de maneira que a cada trajetória de um elétron retroespalhado, contabiliza-se em qual sítio ocorre cada colisão. No presente modelo supomos que um elétron que sofre um número de colisões superior a 1000 é considerado absorvido pela amostra. E isso independe da energia do elétron. Os perfis dos gráficos de número de eventos versus distância radial e número de eventos versus profundidade são realmente bastante similares para os dois valores de energia mencionados. Há apenas uma diferença de escala de um caso para o outro. Além disso, há um patamar extensamente constante na primeira distribuição.

Observando os gráficos (3.6) e (3.7), concluímos que  $\langle \cos\theta \rangle$  não é exatamente uma exponencial de modo que  $\ln \langle \cos\theta \rangle$  aos poucos encurva-se com o tempo. Voltaremos a nos defrontar com este comportamento, no âmbito de modelos de seção de choque mais realistas. Também mais tarde daremos uma explicação para isto.

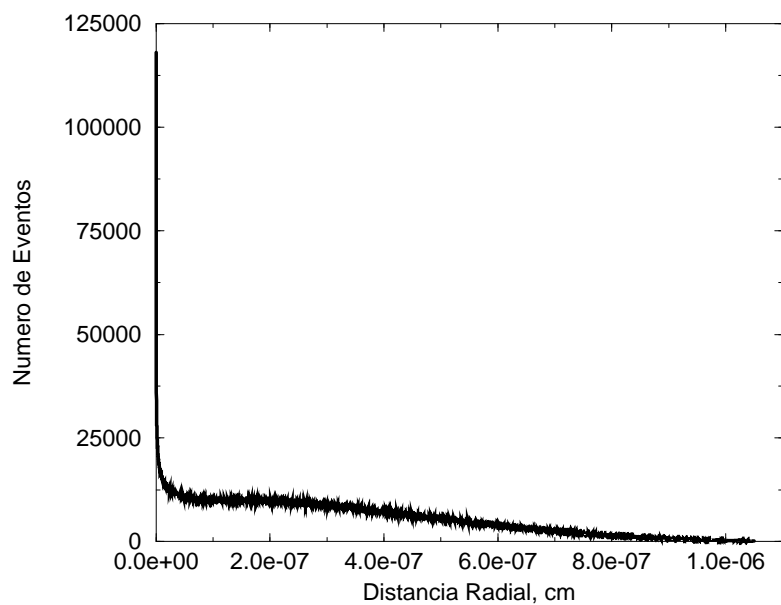


Figura 3.2: número de eventos versus distância radial,  $E = 2.0$  keV.

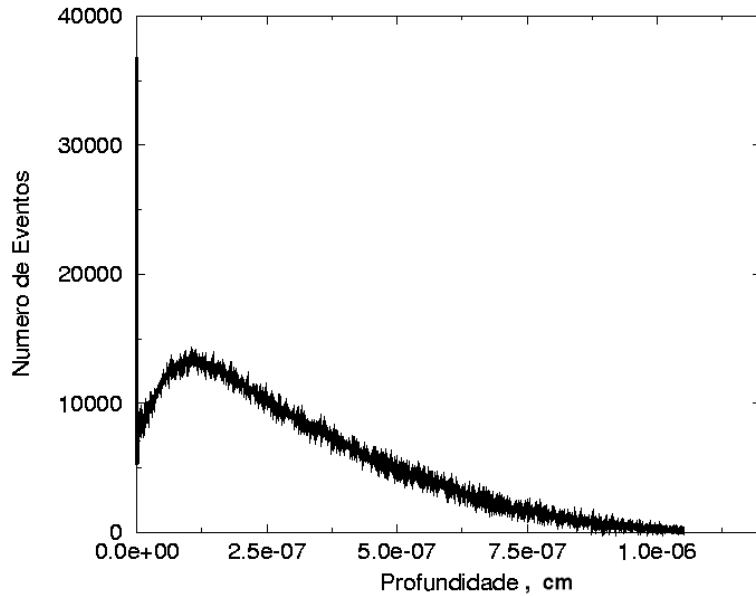


Figura 3.3: número de eventos versus profundidade,  $E = 2.0$  keV.

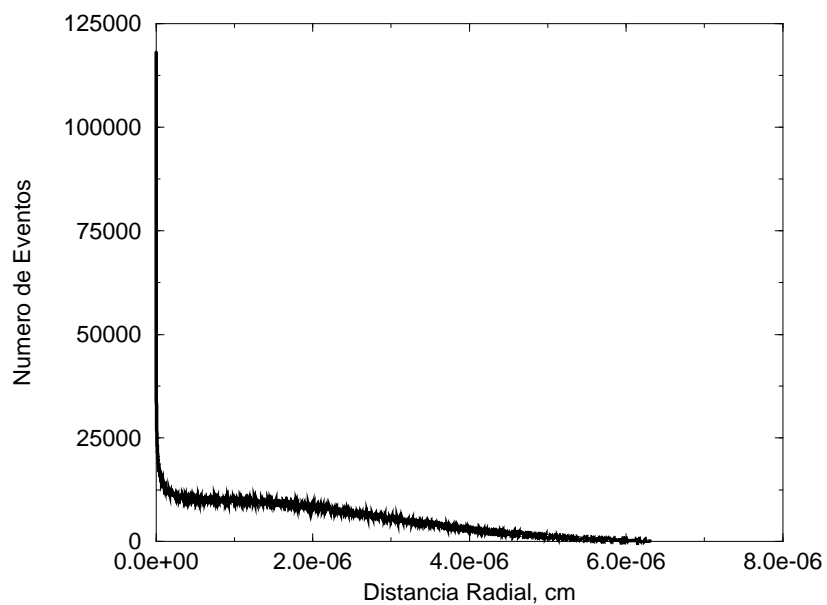


Figura 3.4: número de eventos versus distância radial,  $E = 5.0$  keV.

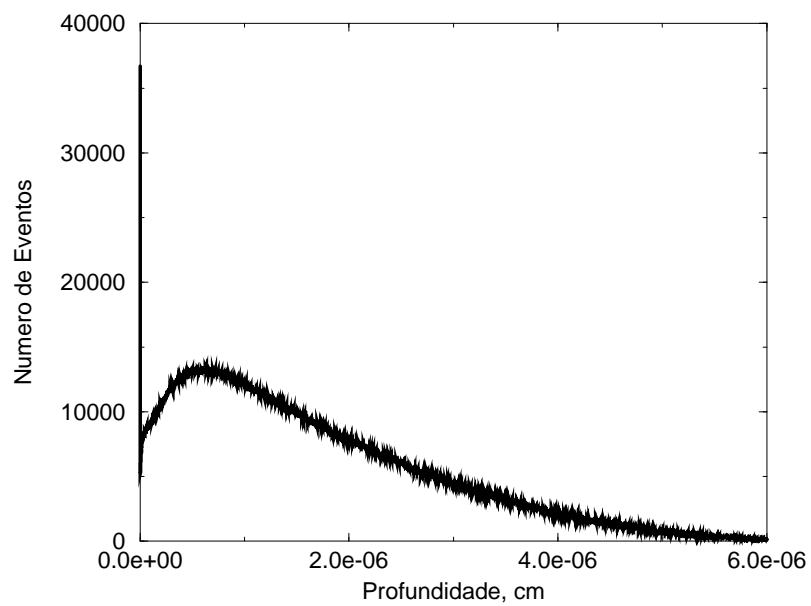


Figura 3.5: número de eventos versus profundidade,  $E = 5.0$  keV.

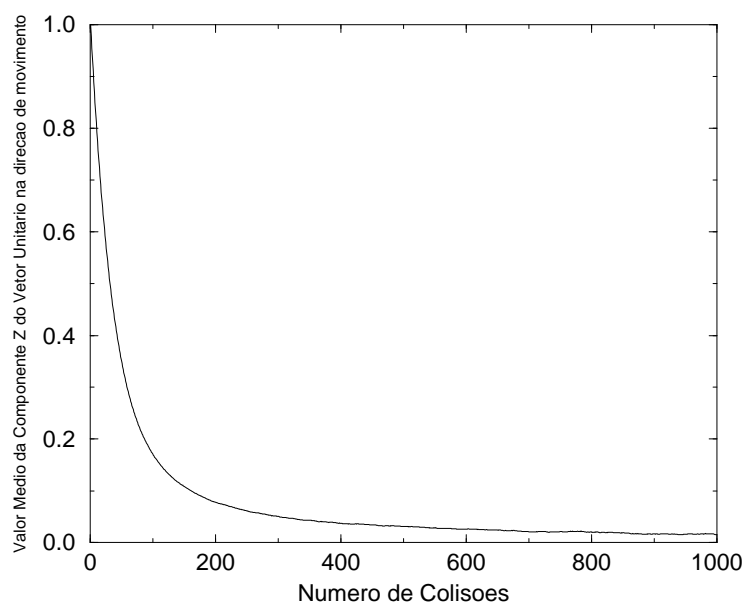


Figura 3.6:  $\langle \cos(\theta) \rangle$  versus número de colisões.

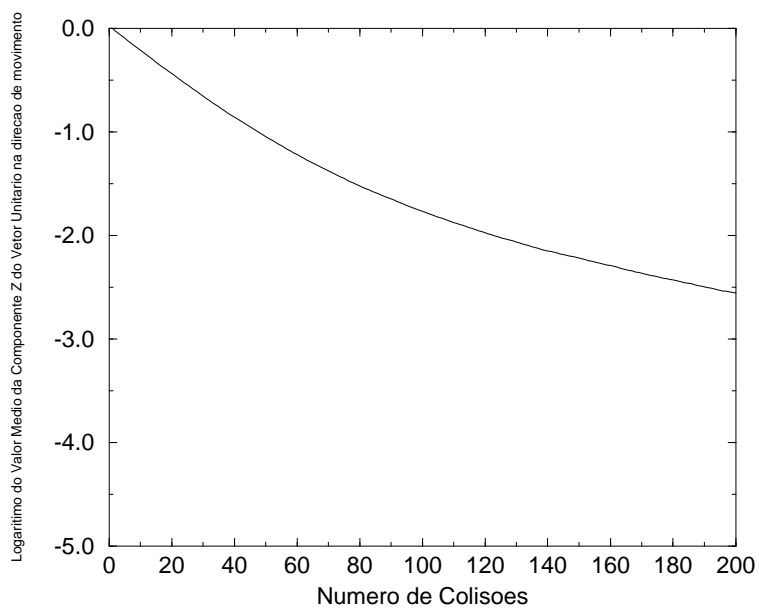


Figura 3.7:  $\ln \langle \cos(\theta) \rangle$  versus número de colisões.

Por fim, apresentamos a seguir gráficos Z versus X para o Au e energias de 2.0 keV e 5.0 keV. Tais gráficos traçam algumas poucas trajetórias percorridas por elétrons do feixe através do referido material, sobre um total de 1000 (dessas mil, algumas correspondem a trajetórias de elétrons que são absorvidos e outras de elétrons que são retroespalhados). Quando o contador de trajetórias, durante a simulação, atinge o valor 1001, o arquivo no qual escreve-se as posições de elétrons na amostra é fechado. Note que ambos o gráficos mostram que o volume de interação do feixe com o material parece formar um pedaço de esfera o qual é simétrico com respeito ao eixo Z. De fato, se desenhassemos cada vez mais trajetórias prováveis de elétrons retroespalhados através do material e se permíssemos que os elétrons sofressem um sem-número de colisões, antes de sair, o volume de interação cresceria para todas as direções. É claro que, no entanto, regiões desse pedaço de esfera cada vez mais distantes do ponto sobre a superfície a partir do qual os elétrons iniciam sua “jornada” são menos prováveis de serem alcançadas. Note também que o volume de interação é maior para uma energia de 5.0 keV que para 2.0 keV. De fato, se aumentarmos a energia do feixe, aumentamos também o valor do livre caminho médio do elétron, pois segundo (3.2) e (3.1) o mesmo é proporcional ao quadrado da energia.

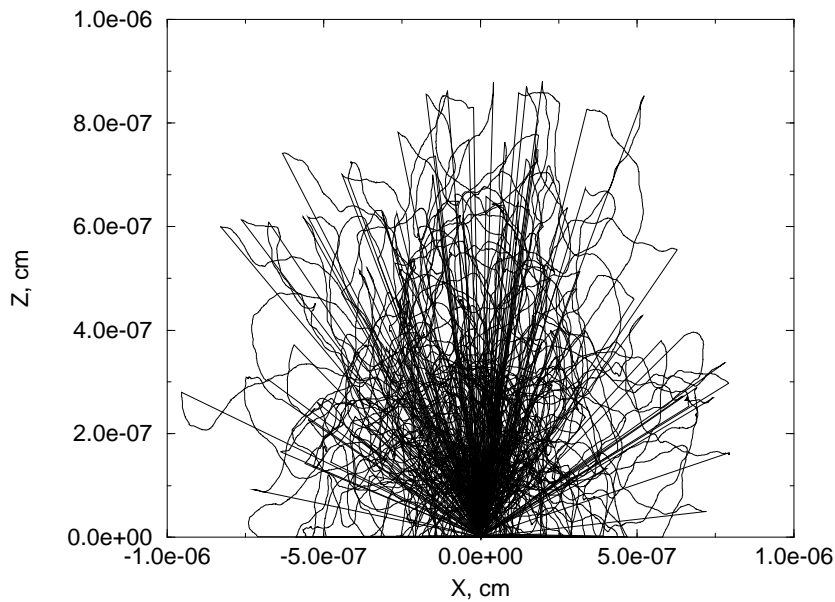


Figura 3.8: Gráfico Z versus X para uma energia de 2.0 keV.

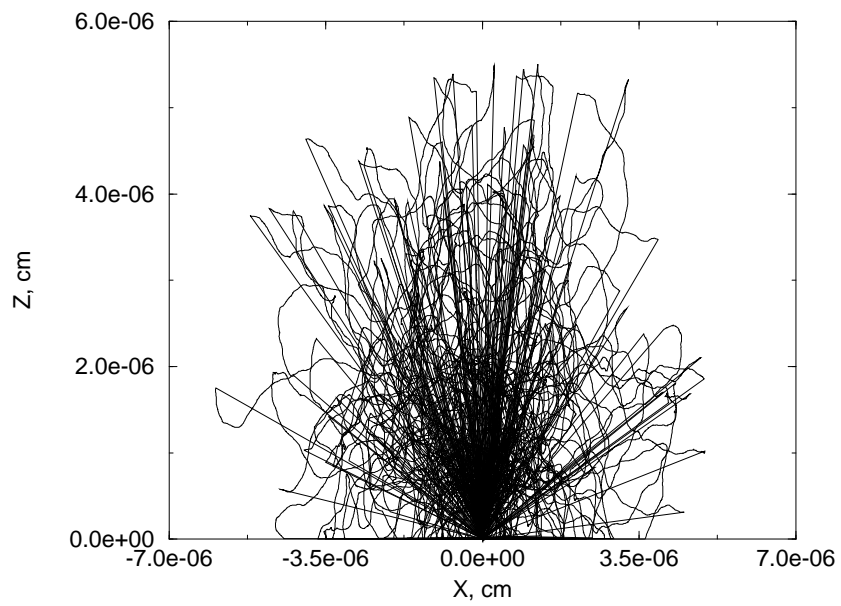


Figura 3.9: Gráfico Z versus X para uma energia de 5.0 keV.

# Capítulo 4

## Introdução à Mecânica Quântica do Espalhamento Eletrônico

### 4.1 Introdução

Neste capítulo, revisamos algumas concepções teóricas básicas da Mecânica Quântica ao Espalhamento Eletrônico, com o intuito de dar ao leitor entendimento do problema que exploraremos via simulação de Monte Carlo, baseado no tratamento dado por Sakurai<sup>[12]</sup>.

### 4.2 Equação de Lippmann-Schwinger

Vamos começar com a formulação independente do tempo para o Espalhamento Eletrônico. O Hamiltoniano de um elétron do feixe, neste caso, é escrito como:

$$H = H_o + V \tag{4.1}$$

onde

$$H_o = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{4.2}$$

e  $V$  é o potencial de interação elétron-átomo. Se o elétron fosse uma partícula livre escreveríamos simplesmente que:

$$H_o|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad (4.3)$$

A equação de Schroedinger a ser resolvida é, pois:

$$(H_o + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (4.4)$$

Ambos  $H_o$  e  $H_o + V$  exibem espectros de energia contínuos. Procuramos por uma solução para a equação (4.4) tal que quando  $V \rightarrow 0$ ,  $|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle$ , onde  $|\phi\rangle$  é a solução da equação de Schroedinger para a partícula livre (4.3) com o mesmo autovalor de energia. Poder-se-ia colocar que a solução desejada é:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - H_o} V|\psi\rangle + |\phi\rangle, \quad (4.5)$$

distante de complicações surgindo da natureza singular do operador  $\frac{1}{E - H_o}$ . Note que  $E - H_o$  aplicado a (4.5) dá imediatamente a equação correta (4.4). A presença de  $|\phi\rangle$  é bastante razoável no sentido de que  $|\psi\rangle$  deve reduzir-se a  $|\phi\rangle$  quando o potencial  $V$  se anula. No entanto, não temos quaisquer prescrições para lidar com um operador singular, e a equação (4.5) não tem significado. Tanto  $|\phi\rangle$  quanto  $|\psi\rangle$  exibem um espectro de auto-energias contínuo e, por isso, a teoria de perturbação não se aplica aqui. No entanto, escrevemos:

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_o \pm i\epsilon} V|\psi^{(\pm)}\rangle \quad (4.6)$$

a qual é a equação de Lippmann-Schwinger. O significado físico dos super-índices  $\pm$  é discutido quando se avalia  $\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$  a grandes distâncias. Segue que

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle + \int d^3x' \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_o \pm i\epsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (4.7)$$

a qual é uma equação integral para o espalhamento visto que o ket não conhecido  $|\psi^{(\pm)}\rangle$  também aparece no integrando. Se o ket  $|\phi\rangle$  é um estado de onda plana com momento  $\mathbf{p}$ , então

$$\langle \mathbf{x} | \phi \rangle = \frac{e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (4.8)$$

A normalização em (4.8) é tal que

$$\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \int d^3x \langle \mathbf{p}' | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (4.9)$$

Se ao invés de escrevermos a equação de Lippman-Schwinger usando a representação de coordenadas, tivéssemos usado a base dos momentos, obteríamos:

$$\langle \mathbf{p} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{p} | \phi \rangle + \frac{1}{E - p^2/2m \pm i\epsilon} \langle \mathbf{p} | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (4.10)$$

Por agora, vamos considerar especificamente a base das coordenadas e trabalhar com a equação (4.7). Primeiro, avaliemos:

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_o \pm i\epsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle \quad (4.11)$$

Segue que:

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_o \pm i\epsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle = \\ & \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle \left\langle \mathbf{p}' \left| \frac{1}{E - \mathbf{p}'^2/2m \pm i\epsilon} \right| \mathbf{p}'' \right\rangle \langle \mathbf{p}'' | \mathbf{x}' \rangle \end{aligned} \quad (4.12)$$

onde  $H_o$  age sobre  $\langle \mathbf{p}' |$ . Naturalmente:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}' | \frac{1}{E - \mathbf{p}'^2/2m \pm i\epsilon} | \mathbf{p}'' \rangle &= \frac{\delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'')}{E - \mathbf{p}'^2/2m \pm i\epsilon} \\ \langle \mathbf{x} | \mathbf{p}' \rangle &= \frac{e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x} / \hbar}}{(2\pi \hbar)^{3/2}} \end{aligned} \quad (4.13)$$

$$\langle \mathbf{p}'' | \mathbf{x}' \rangle = \frac{e^{-i\mathbf{p}'' \cdot \mathbf{x}' / \hbar}}{(2\pi \hbar)^{3/2}}$$

O lado direito de (4.12) torna-se, pois:

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 p' \int d^3 p'' \frac{e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{\delta^3(\mathbf{p}' - \mathbf{p}'')}{E - p'^2/2m \pm i\epsilon} \frac{e^{i\mathbf{p}'' \cdot \mathbf{x}'/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} = \\
& = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 p' \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\mathbf{p}' \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')/\hbar}}{E - p'^2/2m \pm i\epsilon} \tag{4.14}
\end{aligned}$$

Nós agora escrevemos  $E = \hbar^2 k^2/2m$  e colocamos  $\mathbf{p}' \equiv \hbar\mathbf{q}$ . Com isso, a equação (4.14) torna-se

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2}{2m} \int \int \int q^2 \sin\theta dq d\theta d\phi \frac{\hbar^3}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{i\hbar\mathbf{q} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')/\hbar}}{\hbar^2 k^2/2m - \hbar^2 q^2/2m \pm i\epsilon} = \\
& = \frac{1}{8\pi^2 i} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q dq (e^{i|\mathbf{q}||\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - e^{-i|\mathbf{q}||\mathbf{x} - \mathbf{x}'|})}{k^2 - q^2 \pm 2m\epsilon/\hbar^2}
\end{aligned}$$

Note que o integrando acima apresenta singularidades nos pontos

$$q^2 = k^2 \pm \frac{2m\epsilon i}{\hbar^2}$$

ou seja, quando

$$q \approx \pm k \left( 1 \pm \frac{m\epsilon i^2}{k^2 \hbar} \right) = \pm k \pm i\epsilon'$$

Utilizando o Teorema de Cauchy é possível resolver a integral logo acima, tendo-se estabelecido que os pólos são dados aproximadamente conforme escrito. Dessa forma, segue que:

$$\begin{aligned}
& \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \mathbf{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \mathbf{x}' \right\rangle = \\
& \frac{1}{8\pi^2 i} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} |(-2\pi i e^{ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}) = \\
& -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} e^{ik|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}
\end{aligned}$$

Logo,

$$G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \quad (4.15)$$

$G_{\pm}$  não é nada mais que a função de Green, solução da equação de Helmholtz:

$$(\nabla^2 + k^2)G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (4.16)$$

Conhecida a forma explícita de  $G_{\pm}$ , como dada em (4.15), pode-se reescrever a equação (4.7) como:

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (4.17)$$

A função de onda  $\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$  na presença de um espalhador é escrita, conforme a equação (4.17), como uma soma da função de onda  $\langle \mathbf{x} | \phi \rangle$ , que é a onda incidente (lembre-se que antes de penetrar o sólido, os elétrons do feixe são considerados partículas livres), mais um termo que representa o efeito do espalhamento.

Vamos estudar então o comportamento de  $\langle \mathbf{x} | \psi^{(\pm)} \rangle$  mais explicitamente, considerando o caso específico onde  $V$  é um potencial diagonal na representação das coordenadas. Potenciais que são funções apenas do operador posição pertencem a esta categoria. Com isto, na representação das coordenadas um elemento da matriz para  $V$  é assim escrito:

$$\langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{x}'' \rangle = V(\mathbf{x}') \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \quad (4.18)$$

Por conseguinte, o termo  $\langle \mathbf{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle$  em (4.17) é escrito:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{\pm} \rangle &= \int d^3x'' \langle \mathbf{x}' | V | \mathbf{x}'' \rangle \langle \mathbf{x}'' | V | \psi^{\pm} \rangle = \\ &= V(\mathbf{x}') \int d^3x'' \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \langle \mathbf{x}'' | \psi^{\pm} \rangle = \\ &= V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{\pm} \rangle \end{aligned} \quad (4.19)$$

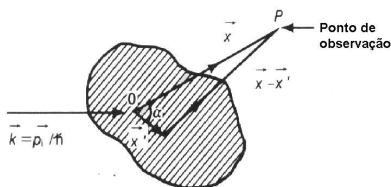


Figura 4.1: Posicionamento do observação no fenômeno de espalhamento. Fonte: J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Revised Edition.

O vetor  $\mathbf{x}$  localiza o ponto de observação em que a função de onda é avaliada. Em processos de espalhamento estamos interessados em estudar o efeito do espalhador. No entanto, a região onde o potencial é não-nulo é finita. Por razões práticas, o detetor não é posicionado muito próximo do centro espalhador; pelo contrário, a observação é feita a uma distância  $r$  muito maior que o “alcance” do potencial. Em outras palavras, escreve-se

$$|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'| \quad (4.20)$$

Introduzindo

$$\begin{aligned} r &= |\mathbf{x}| \\ r' &= |\mathbf{x}'| \end{aligned} \quad (4.21)$$

e

$$\alpha = \angle(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \quad (4.22)$$

temos, para  $r \gg r'$

$$|\mathbf{x} - \mathbf{x}'| = \sqrt{r^2 - 2rr'\cos\alpha + r'^2}$$

$$\begin{aligned}
&= r \left( 1 - \frac{2r'}{r} \cos\alpha + \frac{r'^2}{r^2} \right)^{1/2} \\
&\approx r - \hat{r} \cdot \mathbf{x}'
\end{aligned} \tag{4.23}$$

onde

$$\hat{r} \equiv \frac{\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|} \tag{4.24}$$

e

$$\mathbf{k}' \equiv k\hat{r} \tag{4.25}$$

A motivação para a definição (4.25) é que  $\mathbf{k}$  representa o vetor propagação para ondas alcançando o ponto de observação  $\mathbf{x}$ . Nós então obtemos

$$e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \approx e^{\pm ikr} e^{\mp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'} \tag{4.26}$$

para  $r$  grande.

Também, é legítimo substituir  $\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$  por  $1/r$ , e, de modo a evitarmos trabalhar com os  $\hbar$ 's em expressões tais como  $1/(2\pi\hbar)^{3/2}$ , é conveniente usar  $|\mathbf{k}\rangle$  ao invés de  $|\mathbf{p}_o\rangle$ , onde

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{|\mathbf{p}_o\rangle}{\hbar} \tag{4.27}$$

Porque  $|\mathbf{k}\rangle$  é normalizado como

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \tag{4.28}$$

temos

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}} \tag{4.29}$$

Logo,

$$\langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle \underset{r \text{ grande}}{\approx} \langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3x' e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle$$

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right] \quad (4.30)$$

Esta forma torna muito claro que temos uma onda plana original na direção de propagação  $\mathbf{k}$  mais uma onda esférica resultante com amplitude  $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  dada por

$$\begin{aligned} f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &\equiv -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \int d^3x' \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{(+)} \rangle \\ &\quad - \frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{(+)} \rangle \\ &\quad - \frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | \psi^{(+)} \rangle \\ &\quad - \frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | V | \psi^{(+)} \rangle \end{aligned} \quad (4.31)$$

pois, conforme (4.19),  $\langle \mathbf{x}' | V | \psi^{(+)} \rangle = V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \psi^{(+)} \rangle$ . Finalmente,

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle \quad (4.32)$$

Similarmente, pode-se mostrar facilmente de (4.17) e (4.26) que  $\langle \mathbf{x} | \psi^- \rangle$  corresponde à onda plana original na direção de propagação  $\mathbf{k}$  mais uma onda esférica chegando com dependência espacial  $e^{-ikr}/r$  e amplitude

$$-\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle -\mathbf{k}' | V | \psi^- \rangle \quad (4.33)$$

Para obter a seção de choque diferencial de espalhamento  $d\sigma/d\Omega$ , podemos considerar um grande número de partículas identicamente preparadas e todas caracterizadas pela função de onda (4.29). Pode-se então arguir quanto ao número de partículas incidentes atravessando um plano perpendicular à direção incidente por unidade de área por unidade de tempo. Isto é, é claro, proporcional ao fluxo de probabilidade devido ao primeiro termo ao lado direito da equação (4.30). Como antes, pode-se querer saber qual é o número de partículas espalhadas dentro de uma pequena área  $d\sigma$  subentendendo um pequeno elemento de ângulo sólido  $d\Omega$ . Claramente,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r^2 |\mathbf{j}_{\text{scatt}}|}{|\mathbf{j}_{\text{incid}}|} = |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 d\Omega \quad (4.34)$$

Consequentemente, a seção de choque diferencial é definida pela expressão:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \quad (4.35)$$

### 4.3 A aproximação de Born

As equações (4.31) e (4.32) ainda não são úteis no que se refere a computar a seção de choque diferencial porque na expressão para a amplitude  $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  aparece o ket não conhecido  $|\psi^{(+)}\rangle$ . Se o efeito do espalhador não é muito forte, pode-se inferir que não é uma aproximação ruim substituir  $\langle \mathbf{x}' | \psi^{(+)} \rangle$  (que aparece sob o sinal de integração) por  $\langle \mathbf{x}' | \phi \rangle$ , isto é,

$$\langle \mathbf{k}' | V | \psi^{(+)} \rangle \longrightarrow \langle \mathbf{k}' | V | \phi \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (4.36)$$

Nós então obtemos uma expressão aproximada para  $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ . Porque tratamos o potencial  $V$  para primeira ordem, a amplitude aproximada obtida é conhecida como a amplitude de Born de 1ª ordem e é denotada por  $f^{(1)}$ :

$$f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \quad (4.37)$$

A despeito do termo  $-2m/4\pi\hbar^2$  a amplitude de 1ª ordem é justamente a transformada de Fourier tridimensional do potencial  $V$  com respeito a  $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ . Para um potencial esfericamente simétrico,  $f^{(1)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  é uma função de  $|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$  dada por (lembre-se que  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$  pela conservação da energia):

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = q = 2k \text{sen} \frac{\theta}{2} \quad (4.38)$$

Desenvolvendo a integração angular explicitamente, é fácil obter que:

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty r V(r) \text{sen}(qr) dr \quad (4.39)$$

Imagine que o potencial ao qual é submetido o feixe eletrônico é exatamente o potencial de Yukawa:

$$V(r) = \frac{V_o e^{-\alpha r}}{\alpha r} \quad (4.40)$$

onde  $V_o$  é independente de  $r$ , portanto, sendo uma constante e  $1/\alpha$  corresponde, em certo sentido, ao alcance do potencial.  $\alpha$  estaria, portanto, de alguma forma relacionado à blindagem do núcleo atômico pela nuvem eletrônica do átomo. Para um tal potencial, é fácil mostrar que:

$$f^{(1)}(\theta) = - \left( \frac{2mV_o}{\alpha \hbar^2} \right) \frac{1}{q^2 + \alpha^2} \quad (4.41)$$

Usando  $q^2 = 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} = 2k^2(1 - \cos\theta)$ , surge que, na 1ª aproximação de Born, a seção de choque de espalhamento por um potencial de Yukawa é dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{2mV_o}{\alpha \hbar^2} \right)^2 \frac{1}{[2k^2(1 - \cos\theta) + \alpha^2]^2} \quad (4.42)$$

Quando  $\alpha \rightarrow 0$ , o potencial de Yukawa é reduzido ao potencial coulombiano; é razoável identificar a razão  $V_o/\alpha$  como sendo  $Ze^2/4\pi\epsilon_o$ . Segue:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{2mZe^2}{4\pi\epsilon_o \hbar^2} \right)^2 \frac{1}{[2k^2(1 - \cos\theta) + \alpha^2]^2} \quad (4.43)$$

ou seja,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{2mZe^2}{4\pi\epsilon_o k \hbar^2} \right)^2 \frac{1}{[2(1 - \cos\theta) + \left(\frac{\alpha}{k}\right)^2]^2} \quad (4.44)$$

A constante  $\hbar$  desaparece na expressão acima se  $\hbar k$  é identificado como  $|\mathbf{p}|$ ; logo, reescrevendo-a:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_o |\mathbf{p}|^2/2m} \right)^2 \frac{1}{[2(1 - \cos\theta) + \alpha^2]^2} \quad (4.45)$$

onde

$$\frac{\alpha}{k} \longrightarrow \alpha$$

Desde que  $|\mathbf{p}|^2/2m = E$ , vem que:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 E} \right)^2 \frac{1}{[4\text{sen}^2\frac{\theta}{2} + \alpha^2]^2} \quad (4.46)$$

É sabido que o potencial de Yukawa é reduzido ao potencial de Coulomb quando o parâmetro  $\alpha \longrightarrow 0$ . Neste caso, tomando o processo de limite em (4.46), quando  $\alpha \longrightarrow 0$ , teremos que:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \longrightarrow \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 E} \right)^2 \frac{1}{16\text{sen}^4\frac{\theta}{2}} = \left( \frac{Ze^2}{16\pi\epsilon_0 E} \right)^2 \frac{1}{\text{sen}^4\frac{\theta}{2}} \quad (4.47)$$

que é precisamente a seção de choque de Rutherford obtida classicamente no Capítulo 1. Vamos agora discutir com respeito à validade da aproximação de Born de 1ª ordem. Fica claro, da derivação, que se uma tal aproximação é aplicável,  $\langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle$  não seria tão diferente de  $\langle \mathbf{x} | \phi \rangle$  dentro da faixa ou do alcance do potencial, ou seja, dentro daquela região onde o potencial  $V$  é apreciável. Do contrário, não é legítimo substituir  $|\psi^{(+)}\rangle$  por  $|\phi\rangle$ . Em outras palavras, a distorção da onda incidente deve ser pequena. Voltando à expressão exata (4.17), notamos que a condição de  $\langle \mathbf{x} | \psi^{(+)} \rangle$  não ser tão diferente de  $\langle \mathbf{x} | \phi \rangle$  ao centro do potencial de espalhamento  $\mathbf{x} \approx 0$  é equivalente a:

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ikr'}}{r'} V(\mathbf{x}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'} \right| \ll 1 \quad (4.48)$$

Vamos considerar então o caso especial do potencial de Yukawa em (4.40) e o que isso implicaria. A baixas energias, isto é, para  $k$  pequeno ( $k \ll \alpha$ ) é legítimo substituir o termo  $e^{ikr'}$  por 1. Logo, devemos ter:

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{1}{r'} V_o \frac{e^{-\alpha r'}}{\alpha r'} e^{i\mathbf{k}r' \cos\theta'} \right| \ll 1$$

ou seja,

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{V_o e^{-\alpha r'}}{\alpha r'^2} \right| \ll 1$$

Não é difícil, após algum cálculo, obter que:

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_o|}{\alpha^2} \ll 1 \quad (4.49)$$

Este requerimento pode ser comparado com a condição de que o potencial de Yukawa desenvolva um estado ligado, que pode ser mostrada ser

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_o|}{\alpha^2} \gg 2.7 \quad (4.50)$$

com  $V_o$  negativo. Em outras palavras, se o potencial é forte o suficiente para desenvolver um estado ligado, a aproximação de Born provavelmente dará um resultado longe de ser o correto. No limite oposto de  $k$  grande, a condição para que o segundo termo em (4.17) seja pequeno pode ser mostrada implicar

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_o|}{\alpha k} \ln \left( \frac{k}{\alpha} \right) \ll 1 \quad (4.51)$$

Quando  $k$  torna-se cada vez maior, esta desigualdade é mais facilmente satisfeita. Em geral, a aproximação de Born tende a ser melhor no limite de altas energias.

## 4.4 Formulação dependente do tempo do espalhamento

Na formulação dependente do tempo, imaginamos o processo de espalhamento como uma mudança no ket de estado de uma partícula livre para um ket de estado influenciado pela presença do potencial  $V$ . A equação básica de movimento é

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_o \right) |\psi; t\rangle = V|\psi; t\rangle \quad (4.52)$$

onde  $|\psi; t\rangle$  é o ket de Schroedinger dependente do tempo na presença de  $V$ . A condição de fronteira é que num passado remoto, ou seja, para  $t \rightarrow -\infty$ ,

a partícula era livre. Este requerimento é automaticamente realizado se ligamos o potencial adiabaticamente, isto é, muito vagarosamente; observe:

$$V \longrightarrow \lim_{\eta \rightarrow 0} V e^{\eta t} \quad (4.53)$$

A equação diferencial parcial com um termo inhomogêneo é resolvida introduzindo-se uma função de Green (veja equação (4.15)); a equação de Schroedinger de operadores (4.52) é resolvida introduzindo-se a função de Green  $G_+(t, t')$  satisfazendo

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_o \right) G_+(t, t') = \delta(t - t') \quad (4.54)$$

O requerimento de causalidade que se impõe sobre  $G_+$  é que a interação de uma partícula em um instante de tempo  $t'$  tem efeito apenas para  $t > t'$ . Consequentemente impomos a condição de fronteira retardada

$$G_+(t, t') = 0 \text{ para } t < t' \quad (4.55)$$

Para  $t > t'$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_+(t, t') = H_o G_+(t, t') \quad (4.56)$$

Integrando, obtemos:

$$G_+(t, t') = e^{-iH_o(t-t')/\hbar} \quad (4.57)$$

Para  $t > t'$ , uma constante vezes  $e^{-iH_o(t-t')/\hbar}$  claramente satisfaz a equação diferencial (4.54) porque a função delta ao lado direito é inoperativa. Para  $t < t'$ , obviamente, devemos ter a condição desejada (4.55), ou seja, de que  $G_+(t, t')$  é identicamente nula. Logo,  $G_+(t, t')$  deve ser modificada para atender uma tal condição. Admitimos então que

$$G_+(t, t') = f(t, t') e^{-iH_o(t-t')/\hbar} \quad (4.58)$$

Inserindo (4.58) na equação diferencial (4.54) e resolvendo para  $f(t, t')$ , encontramos, finalmente, que a solução para (4.54) com a condição (4.55) escreve-se:

$$G_+(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') e^{-iH_o(t-t')/\hbar} \quad (4.59)$$

A solução para o problema completo pode agora ser escrita como segue:

$$|\psi^{(+)}; t\rangle = |\phi; t\rangle + \int_{-\infty}^{\infty} G_+(t, t') V |\psi^{(+)}\rangle \quad (4.60)$$

onde

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_o \right) |\phi; t\rangle = 0 \quad (4.61)$$

De fato  $|\phi; t\rangle$  é o ket de Schroedinger dependente do tempo na ausência de  $V$ . O limite superior de integração em (4.60) pode muito bem ser  $t$  porque  $G_+$  se anula para  $t' > t$ :

$$|\psi^+; t\rangle = |\phi; t\rangle + \int_{-\infty}^t G_+(t, t') V |\psi^+; t'\rangle dt' \quad (4.62)$$

Quando  $t \rightarrow -\infty$ ,  $|\psi^{(+)}; t\rangle$  coincide com  $|\phi; t\rangle$  justamente como requerido. Para ver que (4.62) satisfaz a equação de Schroedinger dependente do tempo (4.52) nós meramente aplicamos o operador  $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_o)$  a  $|\psi^{(+)}; t\rangle$ . Segue:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_o \right) |\psi^{(+)}; t\rangle = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_o \right) \int_{-\infty}^t G_+(t, t') V |\psi^{(+)}; t'\rangle dt' \quad (4.63)$$

Mas,  $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_o)$  agindo sobre  $G_+$  dá justamente  $\delta(t - t')$ , conforme equação (4.54). Logo,

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_o \right) |\psi^{(+)}; t\rangle = \int_{-\infty}^t \delta(t - t') V |\psi^{(+)}; t'\rangle dt' \quad (4.64)$$

Isso dá:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_o \right) |\psi^{(+)}; t\rangle = V |\psi^{(+)}; t\rangle \quad (4.65)$$

em concordância com (4.52).

Até aqui não exigimos que  $|\psi^{(+)}; t\rangle$  seja um autoket de energia. Se ele o é, podemos separar a dependência temporal como usual:

$$|\phi; t\rangle = |\phi\rangle e^{-iEt/\hbar}, \text{ e, } |\psi; t\rangle = |\psi\rangle e^{-iEt/\hbar} \quad (4.66)$$

Aqui há a hipótese implícita que  $E$  não muda se  $V$  é ligado adiabaticamente de acordo com (4.53). Equações (4.59) e (4.60) avaliadas a  $t = 0$  produzem

$$|\psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 dt' e^{iH_0 t'/\hbar} e^{-iEt'/\hbar} V |\psi^{(+)}\rangle \quad (4.67)$$

A integral pode parecer oscilar indefinidamente. Contudo, recordamos que  $V$  é realmente entendido como  $V e^{\eta t}$ . Como um resultado, a integral temporal é direta:

$$\begin{aligned} |\psi^{(+)}\rangle &= |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \lim_{t'' \rightarrow -\infty} \int_{t''}^0 dt' e^{i(H_0 - E - i\eta\hbar)t'/\hbar} V |\psi^{(+)}\rangle \\ &= |\phi\rangle - \frac{1}{H_0 - E - i\eta\hbar} \left[ 1 - \lim_{t'' \rightarrow -\infty} e^{i[(H_0 - E)/\hbar + \eta]t''} \right] V |\psi^{(+)}\rangle \end{aligned} \quad (4.68)$$

Mas, quando  $t'' \rightarrow -\infty$ , esta é justamente a equação de Lippmann-Schwinger (4.6).

Deve-se tomar cuidado com respeito ao fato de como a prescrição  $i\epsilon$  aparece nos dois formalismos. Mais cedo, usando o formalismo independente do tempo dizemos que a escolha do sinal positivo do termo  $i\epsilon$  corresponde ao estabelecimento que o espalhador afeta apenas produzindo ondas esféricas. Na formulação dependente do tempo apresentada aqui, a presença de  $i\epsilon$ , ( $\epsilon = \eta\hbar$ ), em (55) surge do requerimento que a partícula era livre no passado remoto.

## 4.5 Conexão com a Teoria de Perturbação Dependente do Tempo

O espalhamento pode ser discutido usando a formulação dependente do tempo, que é baseada na equação de Schroedinger dependente do tempo (4.52). Em particular seríamos capazes de aplicar os métodos da teoria de

perturbação dependente do tempo ao problema de espalhamento, provido, é claro, que o potencial seja considerado fraco.

No passado remoto, o estado ket é representado por um autoket de momento  $|\mathbf{k}\rangle$ . Quando a interação é vagarosamente ligada, como em (4.53), autokets de momento outros que não  $|\mathbf{k}\rangle$ , como  $|\mathbf{k}'\rangle$ , por exemplo, são “preenchidos”. A probabilidade de transição é, para a primeira ordem, avaliada da seguinte forma:

$$\langle \mathbf{k}' | U_I^{(1)}(t, -\infty) | \mathbf{k} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \langle \mathbf{k}' | V_I(t') | \mathbf{k} \rangle dt' \quad (4.69)$$

onde  $V_I(t') = e^{iH_0 t'/\hbar} V e^{-iH_0 t'/\hbar} e^{\eta t'}$  e  $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ .

A probabilidade de transição de achar  $|\mathbf{k}'\rangle$  em um instante de tempo  $t$  é

$$\left| \langle \mathbf{k}' | U_I^{(1)}(t, -\infty) | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \frac{|\langle \mathbf{k}' | V_I(t') | \mathbf{k} \rangle|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\left[ (E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'})^2 / \hbar^2 + \eta^2 \right]} \quad (4.70)$$

Quando  $\eta \rightarrow 0$  ( $t$  finito) a taxa de transição é justamente

$$\frac{d}{dt} \left| \langle \mathbf{k}' | U_I^{(1)}(t, -\infty) | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | V_I(t') | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}) \quad (4.71)$$

Note que o lado direito de (4.71) independe de  $t$ . Naturalmente:

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (4.72)$$

A relação de completeza é escrita como

$$1 = \int d^3k |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| \quad (4.73)$$

No entanto, é mais útil usar a normalização de caixa:

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \quad (4.74)$$

onde os valores permitidos para  $\mathbf{k}$  são dados por

$$k_{x,y,z} = \frac{2\pi n_{x,y,z}}{L} \quad (4.75)$$

A função de onda é dada por

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (4.76)$$

ao invés de  $[1/(2\pi)^{3/2}]e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}$ . A relação de completeza torna-se

$$1 = \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| \quad (4.77)$$

Mas, para uma caixa muito grande, poderíamos muito bem tratar as variáveis  $k_{x,y,z}$  como contínuas, logo

$$1 = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| \quad (4.78)$$

Voltando ao espalhamento, encaramo-lo como uma taxa de transição  $w$  de  $|\mathbf{k}\rangle$  para um grupo de estados  $|\mathbf{k}'\rangle$  subentendendo o elemento de ângulo sólido  $d\Omega$ . Temos  $w$ , para espalhamento elástico, dado por

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle|^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{km}{\hbar^2} d\Omega \quad (4.79)$$

Naturalmente o termo acima deve corresponder a:

$$\text{Fluxo incidente} \times \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (4.80)$$

O fluxo incidente é obtido de

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi),$$

Então

$$|\mathbf{j}| = \frac{\hbar}{m} \left| \text{Im} \left( \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{L^{3/2}} \nabla \frac{e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}}{L^{3/2}} \right) \right| = \frac{\hbar k}{mL^3} \quad (4.81)$$

Alternativamente, fluxo incidente = velocidade / volume =  $\hbar k/mL^3$ . Colocando tudo junto obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{mL^3}{\hbar k} \frac{2\pi}{\hbar} \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \frac{km}{\hbar^2} \left| \frac{1}{L^3} \int d^3x V(\mathbf{x}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x V(\mathbf{x}) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} \right|^2 \end{aligned} \quad (4.82)$$

que é precisamente o resultado da aproximação de Born de 1ª ordem.

## 4.6 Espalhamento Inelástico Elétron - Átomo

Vamos considerar as interações que podem ocorrer entre feixes de elétrons com átomos supondo que os átomos estão em seus estados ligados. O elétron incidente pode ser espalhado elasticamente com átomos não excitados:

$$\begin{aligned} e^- + \text{átomo no estado fundamental} &\longrightarrow \\ e^- + \text{átomo no estado fundamental} &\end{aligned} \quad (4.83)$$

Este é um exemplo de espalhamento elástico. Para o caso em que o átomo pode ser considerado como infinitamente pesado a energia cinética do elétron não muda. É também possível que o espécime seja excitado, na interação:

$$\begin{aligned} e^- + \text{átomo no estado fundamental} &\longrightarrow \\ e^- + \text{átomo no estado excitado} &\end{aligned} \quad (4.84)$$

Neste caso nós falamos de espalhamento inelástico porque a energia cinética do elétron, ao final do processo, é menor do que antes do processo, a diferença sendo usada para excitar o átomo-alvo.

O ket inicial do sistema elétron + átomo é escrito como

$$|\mathbf{k}, 0\rangle \quad (4.85)$$

onde  $\mathbf{k}$  refere-se ao vetor de onda do elétron incidente e  $0$  é o estado fundamental do átomo. Estritamente falando (4.85) seria entendido como o produto direto do ket do elétron incidente  $|\mathbf{k}\rangle$  e o ket atômico do estado fundamental  $|0\rangle$ . A função de onda correspondente é

$$\frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \psi_0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_z) \quad (4.86)$$

onde nós usamos a normalização de caixa para a onda plana.

Nós poderíamos estar interessados em um elétron com estado final com um vetor de onda definido  $\mathbf{k}'$ . O ket de estado final e a função de onda correspondente são

$$|\mathbf{k}, n\rangle \text{ e } \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \psi_n(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_z) \quad (4.87)$$

onde  $n = 0$  para espalhamento elástico e  $n \neq 0$  para espalhamento inelástico.

Supondo que a teoria de perturbação dependente do tempo é aplicável, escrevemos:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \rightarrow n) &= \frac{1}{(\hbar k/m_e L^3)} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}'; n | V | \mathbf{k}; 0 \rangle|^2 \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \left( \frac{k' m_e}{\hbar^2} \right) \\ &= \left( \frac{k'}{k} \right) L^6 \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m_e}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}'; n | V | \mathbf{k}; 0 \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (4.88)$$

Definida a seção de choque, resta-nos definir  $V$ :

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} \quad (4.89)$$

Seja avaliar agora o elemento matricial  $\langle \mathbf{k}'; n | V | \mathbf{k}; 0 \rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}'; n | V | \mathbf{k}; 0 \rangle &= \frac{1}{L^3} \int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \left\langle n \left| -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} \right| 0 \right\rangle \\ &= \frac{1}{L^3} \int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \prod_i \int d^3x_i \psi_n^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_z) \left[ -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} \right] \end{aligned}$$

$$\times \psi_o(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_z) \quad (4.90)$$

com  $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ .

Notando que  $-[1/(4\pi\epsilon_o)]Ze^2/r$ , onde  $r = |\mathbf{x}|$ , é um potencial entre o elétron incidente e o núcleo e que é independente das coordenadas dos elétrons atômicos, o mesmo pode ser tomado fora da integração

$$\prod_i^z \int d^3x_i$$

em (4.90); nós simplesmente obtemos

$$\langle n|0\rangle \delta_{n,o} \quad (4.91)$$

para o remanescente. Em outras palavras, este termo contribui apenas para o caso de espalhamento elástico onde o átomo alvo permanece excitado. No caso elástico devemos ainda integrar  $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}/r$  com respeito a  $\mathbf{x}$ , o que equivale a tomar a transformada de Fourier do potencial de Coulomb.

Já para o segundo termo em (4.90), nós podemos avaliar a transformada de Fourier de  $1/|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|$ . Nós podemos realizar isto mudando as variáveis coordenadas  $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + \mathbf{x}_i$ :

$$\sum_i \int d^3x \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} = \sum_i \int d^3x \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}+\mathbf{x}_i)}}{|\mathbf{x}|} = \frac{4\pi}{q^2} \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i} \quad (4.92)$$

Note que isto é justamente a transformada de Fourier do potencial coulombiano multiplicado pela transformada de Fourier da densidade eletrônica devido aos elétrons atômicos situados em  $\mathbf{x}_i$  (a despeito, é claro, da constante multiplicativa  $[1/(4\pi\epsilon_o)]$ ):

$$\rho_{\text{átomo}}(\mathbf{x}) = \sum_i \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (4.93)$$

Comumente definimos o fator de forma  $F_n(\mathbf{q})$  para excitação de  $|0\rangle$  a  $|n\rangle$  como segue

$$ZF_n(\mathbf{q}) \equiv \left\langle n \left| \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i} \right| 0 \right\rangle, \quad (4.94)$$

que é feito de contribuições coerentes dos vários elétrons. Note que quando  $q \rightarrow 0$

$$\frac{1}{Z} \left\langle n \left| \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i} \right| 0 \right\rangle \rightarrow 1 \quad (4.95)$$

para  $n = 0$ ; conseqüentemente, o fator de forma aproxima-se da unidade no caso de espalhamento elástico. Para  $n \neq 0$  (espalhamento inelástico),  $F_n(\mathbf{q}) \rightarrow 0$  quando  $q \rightarrow 0$ , por ortogonalidade entre  $\langle n |$  e  $| 0 \rangle$ . Nós podemos então escrever o elemento matricial como

$$\int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \left\langle n \left| \left[ -\frac{1}{4\pi\epsilon_o} \frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{1}{4\pi\epsilon_o} \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} \right] \right| 0 \right\rangle = \frac{Ze^2}{\epsilon_o q^2} [-\delta_{n,o} + F_n(\mathbf{q})] \quad (4.96)$$

Nós finalmente estamos em condições de escrever a seção de choque para espalhamento inelástico (ou elástico) de elétrons por átomos:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} (0 \rightarrow n) &= \left( \frac{k'}{k} \right) \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{\epsilon_o q^2} [-\delta_{n,o} + F_n(\mathbf{q})] \right|^2 \\ &= \frac{m_e^2}{\hbar^4} \frac{(Ze^2)^2}{(2\pi\epsilon_o q^2)^2} \left( \frac{k'}{k} \right) |-\delta_{n,o} + F_n(\mathbf{q})|^2 \end{aligned} \quad (4.97)$$

Para espalhamento inelástico o termo  $\delta_{n,o}$  não contribui. Dado o raio de Bohr  $a_o = \hbar^2/e^2m_e$ , escreve-se (4.97) como

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} (0 \rightarrow n) = \left( \frac{Za_o}{2\pi\epsilon_o} \right)^2 \left( \frac{k'}{k} \right) \frac{1}{(qa_o)^4} |F_n(\mathbf{q})|^2 \quad (4.98)$$

Nós estamos interessados na perda de energia de uma partícula carregada por unidade de comprimento percorrido por ela. A taxa de colisão por unidade de comprimento é  $N\sigma$ , onde  $N$  é o número de átomos por unidade de volume. A cada processo de colisão, a energia da partícula cai de maneira que a perda é  $E_n - E_o$ . Logo,  $dE/dx$  é escrito como

$$\frac{dE}{dx} = N \sum_n (E_n - E_o) \int \frac{d\sigma}{d\Omega} (0 \rightarrow n) dq \quad (4.99)$$

É possível mostrar que, integrando-se a expressão acima sobre a variável  $\mathbf{q}$ , obtém-se:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{NZe^4}{4\pi\epsilon_0^2 m_e v^2} \ln \left( \frac{2m_e v^2}{J} \right) \quad (4.100)$$

onde  $J$  é um parâmetro semi-empírico relacionado à energia de excitação média  $\langle E_n - E_o \rangle$ .

A equação (4.100) pode ser escrita na forma<sup>[9]</sup>

$$\frac{dE}{dx} = -785 \frac{\rho Z}{AE} \ln \left( \frac{1.166E}{J} \right) \frac{eV}{\text{Å}} \quad (4.101)$$

onde  $E$  é a energia instantânea do elétron (em  $eV$ ),  $x$  é o comprimento do caminho ao longo da trajetória (em  $\text{Å}$ ),  $\rho$  é a densidade (em  $g/cm^3$ ),  $Z$  é o número atômico,  $A$  é o peso atômico do material, e  $J$  é o potencial médio de ionização do material (em  $eV$ ). A equação de perda de energia, nas formas (4.100) ou (4.101), é conhecida como o poder parador de Bethe. O valor de  $J$  pode ser encontrado de valores tabelados (exemplo, ICRU, 1984) ou aproximado de um ajuste analítico (devido a Berger e Selzer):

$$J = \left[ 9.76Z + \frac{58.5}{Z^{0.19}} \right] (eV), \quad Z \geq 13 \quad (4.102)$$

$$J = 11.5(eV), \quad Z \leq 12$$

O potencial médio de ionização representa a perda de energia média efetiva por interação entre o elétron incidente e o sólido. Este simples parâmetro incorpora em seu valor todos os mecanismos possíveis para perda de energia que o elétron pode encontrar, então permitindo à equação de Bethe prover uma forma compacta e conveniente de contabilizar uma grande variedade de perdas de energia que são experimentadas pelo elétron.

Para  $E \gg J$ , isto é, para energias eletrônicas em excesso de uns poucos keV, a expressão de Bethe (4.101) é bem comportada, predizendo um poder parador que varia monotonicamente com uma declividade limite de cerca de  $E^{-0.8}$ . Mas, quando  $E$  cai para  $E \approx J$ , o valor do poder parador torna-se dominado pelo termo logarítmico. Consequentemente, o poder parador

atinge um máximo que ocorre quando  $E \approx 2.5J$  e então cai rapidamente para zero quando  $E = J/1.166$ . Para valores ainda mais baixos de  $E$ , a equação então prediz um poder parador negativo, que é claramente não físico. A relação de Bethe, como é dada na expressão (4.101), não é de uso prático para casos onde a energia do elétron é menor que cerca de  $5J$ , que, para a maioria dos materiais de interesse, está na faixa de 1 a 3 KeV. Algumas soluções propostas para esta dificuldade são discutidas com certa extensão por D. C. Joy e S. Luo.<sup>[9]</sup> No entanto, apresentamos aqui a expressão de Bethe modificada para incorporar a dependência de energia pelo potencial de ionização:

$$\frac{dE}{dx} = -785 \frac{\rho Z}{AE} \ln \left( \frac{1.166(E + tJ)}{J} \right) \frac{eV}{\text{Å}}$$

$$\frac{dE}{dx} = -785 \frac{\rho Z}{AE} \ln \left( \frac{1.166E}{J'} \right) \frac{eV}{\text{Å}} \quad (4.103)$$

onde

$$J' = \frac{J}{1 + \frac{tJ}{E}} \quad (4.104)$$

A quantidade  $J$  na expressão (4.103), que representa de algum modo o somatório das interações elétron do feixe - elétrons atômicos é melhor considerada um termo dependente da energia do que constante. A tabela seguinte dá valores da constante  $t$  que melhor se ajustam a expressão (4.103) aos dados experimentais para 7 elementos:

Valores de t para 7 elementos	
Elemento	t
C	0.77
Al	0.815
Si	0.822
Cu	0.83
Ni	0.83
Ag	0.852
Au	0.851

Existem, atualmente, uma série de expressões usadas para descrever a interação elétron-amostra no espalhamento. Browning et. al.<sup>[1]</sup> usaram a

aproximação de Bethe, mas com a extensão de Rao-Sahib-Wittry em seus trabalhos simulacionais. Czyzewski et. al. [3], por sua vez, usaram a expressão (4.103) em seu trabalho sobre retroespalhamento eletrônico pelos materiais Au, Cu, Al, Ag, e C. Já Kotera et. al. [4] propuseram a seguinte expressão de perda de energia, derivada da Teoria de Lindhard para um feixe iônico:

$$-\frac{dE}{dx} = \lambda_s \frac{\pi 2^{2/s-1} a^{2-2/2} e^{4/s} n Z}{1 - 1/s} E^{1-2/s}, \quad (4.105)$$

onde  $n$  é a densidade atômica do material-alvo,  $a = 0.8853 a_H Z^{-1/3}$ ,  $a_H$  é o raio de Bohr,  $e$  é a carga eletrônica,  $E$  é a energia do elétron e  $s$  e  $\lambda_s$  são parâmetros determinados por ajuste de dados experimentais.

Sary et. al. [5], por outro lado, propôs o uso da teoria eletrodinâmica para calcular o livre caminho médio inelástico (a partir da determinação da parte complexa da constante dielétrica  $\epsilon$ ) e o cálculo de seções de choque diferenciais inelásticas  $d\sigma_{in}(W)/dW$  ( $W$  é a perda de energia), que têm aproximadamente uma dependência hiperbólica. O valor definido da perda de energia mínima  $W_{min}$  seria conectado com o livre caminho médio inelástico  $\lambda_{in}$  pela relação  $\lambda_{in} = W_m/S_B$ , onde  $S_B$  é o poder parador de Bethe e  $W_m$  é a perda de energia média:

$$W_m = \int_{W_{min}}^E W f(W) dW \approx W_{min} \ln \left( \frac{E}{W_{min}} \right) \quad (4.106)$$

onde  $f(W)$  é uma função distribuição normalizada. Jablonski et. al. [7] seguem um caminho um tanto inverso: eles procuram determinar o livre caminho médio inelástico pressupondo que há uma relação teórica válida entre o livre caminho médio inelástico e a probabilidade de retroespalhamento elástico. O trabalho de Kwei et. al. [8] também faz uso do livre caminho médio inelástico, para excitações de superfície e volume, de modo a determinar distribuições de elétrons elasticamente retroespalhados de cobre e prata. No entanto, diferentemente de autores já mencionados, eles enfatizam que o livre caminho médio inelástico depende se o elétron desloca do vácuo para o sólido ou do sólido para o vácuo, tendo estabelecido duas expressões diferentes para estes casos.

Nós fizemos uso da seção de choque diferencial e total de Rutherford blindada (4.46) bem como da expressão de perda de energia contínua de Bethe (4.103) no estudo do espalhamento eletrônico através de três materiais, a saber o Alumínio, o Cobre e o Ouro. A metodologia e os resultados obtidos são discutidos no próximo capítulo.

## 4.7 Método de Ondas Parciais

Vamos supor que o potencial de interação elétron-átomo é esfericamente simétrico e assim invariante sob rotações em 3 dimensões. Considere agora o operador de transição  $T$  definido como

$$V|\psi^{(+)}\rangle = T|\phi\rangle \quad (4.107)$$

Multiplicando a equação de Lippmann-Schwinger (4.6) por  $V$ , nós obtemos

$$T|\phi\rangle = V|\phi\rangle + V \frac{1}{E - H_o + i\epsilon} T|\phi\rangle \quad (4.108)$$

A equação (4.108) vale supostamente para qualquer estado de onda plana  $|\phi\rangle$ ; ademais, sabemos que estes autokets de momento formam um conjunto completo. Consequentemente, devemos ter satisfeita a seguinte equação de operadores:

$$T = V + V \frac{1}{E - H_o + i\epsilon} T \quad (4.109)$$

A amplitude de espalhamento (4.32) pode agora ser escrita como:

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle \quad (4.110)$$

onde usamos a equação (4.107) com os  $|\phi\rangle$  “atuando” como autokets de momento.

Um tal operador  $T$ , como dado pela expressão (4.107), comuta com o operador momento angular  $L$  e também com  $L^2$ , dadas as propriedades do potencial de interação  $V$ . Em outras palavras,  $T$  é um escalar. É útil, então, usar a base de ondas esféricas porque:

$$\langle E', l', m' | T | E, l, m \rangle = T_l(E) \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \quad (4.111)$$

Em outras palavras,  $T$  é diagonal em  $l$  e  $m$ ; ademais, o elemento diagonal não nulo depende de  $E$  e  $l$ , mas não de  $m$ .

Vamos agora obter a amplitude de espalhamento:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \sum_{l,m} T_l(E) \langle \mathbf{k}' | E', l, m \rangle \langle E, l, m | \mathbf{k} \rangle \quad (4.112)$$

Usando  $\langle \mathbf{k} | E, l, m \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right) Y_l^m(\hat{\mathbf{k}})$  obtemos que:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{4\pi^2}{k} \sum_{l,m} T_l(E) \Big|_{E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}') Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) \quad (4.113)$$

Para obter a dependência angular da amplitude de espalhamento vamos escolher o sistema de coordenadas tal que  $\mathbf{k}$  esteja na direção de  $z$  positivo. Nós temos:

$$Y_l^m(\hat{\mathbf{k}}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m,0}$$

onde usamos  $P_l(1) = 1$ . Conseqüentemente, apenas os termos com  $m = 0$  contribuem. Tomando  $\theta$  como sendo o ângulo entre  $\mathbf{k}'$  e  $\mathbf{k}$  nós podemos escrever

$$Y_l^0(\hat{\mathbf{k}}') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta)$$

Define-se a amplitude de ondas parciais  $f_l(k) \equiv -\frac{\pi T_l(E)}{k}$ . Logo,

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta) \quad (4.114)$$

onde  $f(\theta)$  ainda depende de  $k$ , ou a energia incidente.

Nós agora examinamos as conseqüências da conservação de probabilidade. Em uma formulação independente do tempo, a densidade de fluxo de corrente  $\mathbf{j}$  deve satisfazer

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = -\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = 0 \quad (4.115)$$

Seja agora considerar uma superfície esférica de raio muito grande. Pelo Teorema de Gauss, devemos ter

$$\int \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (4.116)$$

sobre esta superfície. As expressões (4.115) e (4.116) querem dizer que não há fonte ou sorvedouro de partículas. O fluxo resultante deve ser igual ao incidente. Ademais, por causa da conservação do momento angular, isto deve valer para cada onda parcial separadamente. Em outras palavras, o coeficiente de  $e^{ikr}/r$  deve ser igual ao de  $e^{-ikr}/r$  em magnitude. Definindo  $S_l(k)$  como

$$S_l(k) \equiv 1 + 2ik f_l(k) \quad (4.117)$$

então

$$|S_l| = 1 \quad (4.118)$$

isto é, o máximo que acontece é uma mudança de fase da onda espalhada. A equação (4.118) é conhecida como relação unitária para a  $l$ -ésima onda parcial. Nós então vemos que a única mudança na função de onda a grandes distâncias como um resultado do espalhamento é a mudança na fase da onda espalhada. Chamando esta mudança de  $2\delta_l$  (o fator 2 é convencional), escrevemos:

$$S_l = e^{2i\delta_l} \quad (4.119)$$

com  $\delta_l$  real. É entendido que  $\delta_l$  é uma função de  $k$  mesmo embora não explicitamente tenhamos escrito  $\delta_l$  como  $\delta_l(k)$ . Retornando a  $f_l$ , escrevemos

$$f_l = \frac{S_l - 1}{2ik}$$

ou

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} \quad (4.120)$$

Para a amplitude de espalhamento

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left( \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} \right) P_l(\cos\theta) \quad (4.121)$$

ou

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \text{sen}\delta_l P_l(\cos\theta) \quad (4.122)$$

As expressões (4.121) ou (4.122) satisfazem dois princípios fundamentais: invariância rotacional e conservação de probabilidade.

A seção de choque diferencial  $d\sigma/d\Omega$  pode ser obtida tomando o módulo quadrado de (4.121) ou (4.122). Para obter a seção de choque total temos:

$$\sigma_{total} = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \text{sen}^2 \delta_l \quad (4.123)$$

Como uma função da energia,  $\delta_l$  muda. Conseqüentemente,  $f_l(k)$  também muda. A relação unitária (4.118) é uma restrição sobre a maneira com que  $f_l$  pode variar.

## 4.8 Equação de Onda relativística

A energia total do elétron é a soma da energia cinética  $E = p^2/2m$  e a energia potencial  $V$ . A conservação da energia pode então ser escrita:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V \quad (4.124)$$

É bem sabido que a equação de Schroedinger da Mecânica Quântica para um elétron livre ( $V = 0$ ) é obtida substituindo o hamiltoniano  $H$  e o momento  $\mathbf{p}$  pelos operadores

$$H = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla \quad (4.125)$$

e aplicando estes operadores a uma função de onda  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = 0 \quad (4.126)$$

Se procuramos uma solução separada da forma  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-i(E-V)t/\hbar}$  obtemos a equação de Schroedinger independente do tempo para  $\psi(\mathbf{r})$ :

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0 \quad (4.127)$$

Substituindo a massa relativística  $m = m_o(1 + E/E_o)$  para  $m$  ( $m_o$  é a massa de repouso do elétron e  $E_o = m_o c^2 = 511KeV$  é a energia de repouso) a equação (4.124) pode também ser usada para altas energias. Uma fórmula relativisticamente exata deve, contudo, ser covariante sob uma transformação de Lorentz. Ao invés de (4.124) usamos a fórmula relativística de conservação de energia

$$(H - V)^2 = (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 c^2 + E_o^2 \quad (4.128)$$

onde  $\mathbf{p} - e\mathbf{A}$  denota o momento canônico com  $\mathbf{A}$  sendo o potencial vetorial magnético e  $E_o = m_o c^2 = 511KeV$  é a energia de repouso do elétron, conforme já mencionado.

Quando os operadores (4.125) para  $\mathbf{p}$  e  $H$  são substituídos em (4.128), a equação de Klein-Gordon é obtida. Dirac teve a idéia de colocar esta equação em um produto de 2 fatores lineares:

$$\left[ H - V - c \sum_i \alpha_i (p_i - eA_i) - \beta E_o \right] \left[ H - V + c \sum_i \alpha_i (p_i - eA_i) + \beta E_o \right] \psi = 0 \quad (4.129)$$

onde  $i = 1, 2, 3$  significam as componentes  $x, y$  e  $z$  de  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{A}$ , respectivamente. Pode-se verificar facilmente que, multiplicando estes fatores lineares,  $\alpha_i$  e  $\beta$  devem ter as condições de anti-comutação:

$$\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 0, \quad \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0, \quad e, \quad \beta^2 = 1.$$

que são satisfeitas pelas quatro matrizes  $4 \times 4$  (álgebra de Clifford):

$$\alpha_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\alpha_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Seções de choque exatas podem ser obtidas substituindo-se um potencial de interação na equação de Pauli-Dirac

$$\left[ H - V - c \sum_i \alpha_i (p_i - eA_i) - \beta E_o \right] \psi = 0 \quad (4.130)$$

O problema do espalhamento tem que ser resolvido separadamente para as duas direções de spin. Assumindo uma direção de spin  $+z$ , a solução assintótica quando  $r \rightarrow \infty$  torna-se

$$\psi_1 = \psi_o \left[ e^{2\pi i k z} + f_1(\theta, \phi) \frac{e^{2\pi i k z}}{r} \right] \quad (4.131)$$

$$\psi_2 = \psi_o \left[ 0 + g_1(\theta, \phi) \frac{e^{2\pi i k z}}{r} \right]$$

A amplitude de spin  $g_1(\theta, \phi)$  é considerada pelo fato de que a segunda direção de spin pode também ocorrer após o processo de espalhamento e, conseqüentemente, a amplitude de espalhamento pode também depender do ângulo de espalhamento azimutal  $\phi$ . Uma solução exata pode ser expressa como uma série infinita de polinômios de Legendre:

$$f_1(\theta, \phi) = \frac{1}{2ik} \sum [(l+1)(e^{2im}) + l(e^{2i\eta-l-1} - 1)] P_l \cos(\theta) = f(\theta),$$

(4.132)

$$g_1(\theta, \phi) = \frac{1}{2ik} \sum [-e^{2i\eta} - e^{2i\eta-l-1}] P_l^1 \cos(\theta) e^{i\phi} = g(\theta) e^{i\phi}$$

Para a direção de spin  $-z$ , a série torna-se

$$f_2(\theta) = f_1(\theta) = f(\theta) \text{ , e, } g_2(\theta, \phi) = -g_1(\theta, \phi) e^{-2i\phi} = -g(\theta) e^{-i\phi} \quad (4.133)$$

Se o feixe incidente consiste de uma superposição de ambas as direções de spin:

$$A \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{2\pi i k z} + B \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{2\pi i k z}$$

a seção de choque diferencial torna-se

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = |f|^2 + |g|^2 + \frac{-AB^* e^{i\phi} + A^* B e^{-i\phi}}{|A|^2 + |B|^2} (fg^* - f^*g) \quad (4.134)$$

Nós assumimos um feixe eletrônico não-polarizado; logo, (4.134) reduz à seção de choque Mott:

$$\frac{d\sigma_M}{d\Omega} = |f|^2 + |g|^2 \quad (4.135)$$

que independe de  $\phi$ .

Quando plotamos a seção de choque Mott contra o ângulo de espalhamento  $\theta$ , a razão

$$r = \frac{d\sigma_M/d\Omega}{d\sigma_R/d\Omega} \quad (4.136)$$

pode ser usada, onde  $d\sigma_R/d\Omega$  é a seção de choque de Rutherford não-blindada. A fig. 4.2 mostra esta razão para energias eletrônicas de 1 a 100 KeV. Em todos os gráficos,  $r$  decresce para zero em  $\theta$  pequeno por causa do efeito de blindagem, que resulta em um valor finito de  $d\sigma_M/d\Omega$  a  $\theta = 0$ , enquanto que a seção de choque de Rutherford no denominador de (4.136) mostra uma singularidade a  $\theta = 0$  devido ao termo  $\text{sen}^4(\theta/2)$  no denominador de (1.17).

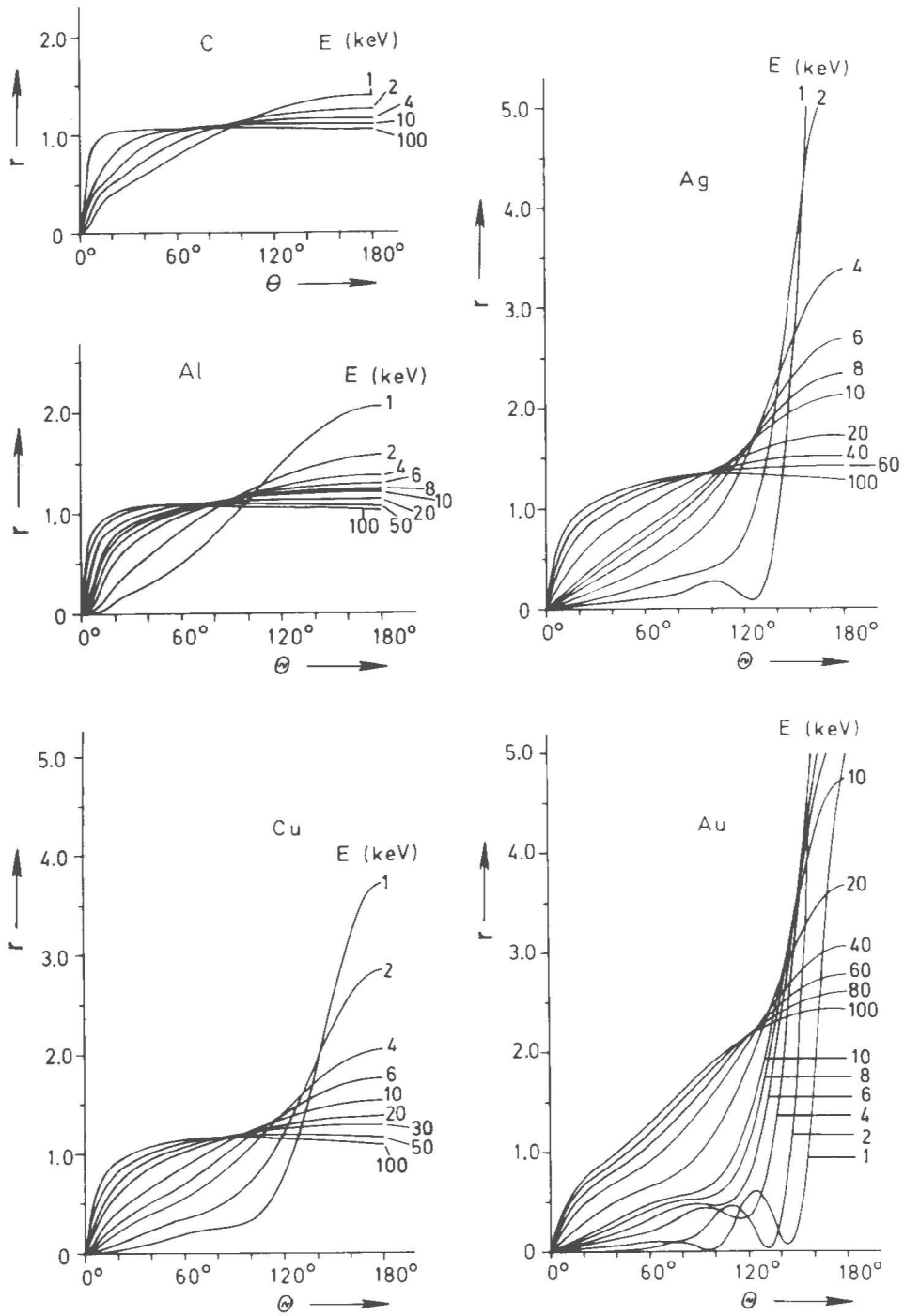


Figura 4.2: Razão  $r \times \theta$  para alguns números atômicos. Fonte: Reimer, L., Scanning electron microscopy: physics of image formation and microanalysis. Berlin; New York: Springer-Verlag, 1985.

Os resultados da fig. 4.2. mostram que podem haver fortes desvios da seção de choque de Rutherford, especialmente para grandes números atômicos, e isto afeta o retroespalhamento eletrônico e a difusão.

Sakurai<sup>[13]</sup> apresenta um tratamento perturbativo para o espalhamento Mott, tendo obtido:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 Z^2}{4(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 v^4} \frac{1}{\text{sen}^4 \frac{\theta}{2}} \left( 1 - \beta^2 \text{sen}^2 \frac{\theta}{2} \right) \quad (4.137)$$

onde  $\beta = v/c$ . Um tal tratamento perturbativo é esperado ser válido a energias suficientemente altas com valores relativamente baixos de  $Z$ , ou mais quantitativamente, para  $Z/(137\beta) \ll 1$ .

D. C. Joy<sup>[14]</sup>, por outro lado, apresenta a seguinte seção de choque de Mott perturbativa, mas para um potencial de Yukawa:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 Z^2}{4(4\pi\epsilon_0)^2 m^2 v^4} \frac{1}{[\text{sen}^2 \frac{\theta}{2} + \alpha]^2} \left[ 1 - \beta^2 \text{sen}^2 \frac{\theta}{2} + \pi\alpha\gamma \left( \text{sen} \frac{\theta}{2} - \text{sen}^2 \frac{\theta}{2} \right) \right]$$

onde  $\gamma = Z/137$ . No capítulo 5, implementaremos uma tal seção de choque, porém desprezando o terceiro termo, entre chaves. Nós faremos isso em virtude do custo de processamento agregado à utilização do método de rejeição.

Há uma série de modelos simulacionais empregados no estudo de espalhamento eletrônico e parâmetros correlatos. Browning et. al. <sup>[1,2]</sup> fizeram um ajuste de dados primeiro levantados por Reimer e Lodding para seções de choque elásticas totais para diversos elementos, tendo obtido a seguinte aproximação:

$$\sigma = 4.7 \times 10^{-18} \frac{(Z^{1.33} + 0.032Z^2)}{E + 0.0155Z^{1.33}E^{0.5}} \times \frac{1}{1 - 0.02Z^{0.5}e^{-u^2}} \text{cm}^2, \quad (4.138)$$

onde

$$u = \log_{10} 8EZ^{-1.33}$$

Browning et. al. também propuseram como seção de choque diferencial

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 5.21 \times 10^{-21} \frac{Z^2}{E^2} \left[ \frac{1}{1 - \cos\theta - \alpha} + \frac{\alpha(\alpha + 1)}{4.2E^{1.1}} \right] \quad (4.139)$$

com

$$\alpha = 5.5 \times 10^{-4} \frac{Z^{0.67}}{E} \quad (4.140)$$

Segundo os autores, a seção de choque diferencial (4.139) compreendendo a distribuição de Rutherford blindada modificada mais uma distribuição isotrópica pode ser implementada muito simplesmente em um programa Monte Carlo básico. A escolha de qual parte da distribuição deve ser usada em um evento de espalhamento pode ser feita na base de um número aleatório adicional pesando as áreas relativas das distribuições dadas por (4.139). Se a área correspondendo à distribuição de Rutherford blindada for maior, então

$$\theta = \cos^{-1} \left( 1 - \frac{(2\alpha X)}{(\alpha + 1 - X)} \right) \quad (4.141)$$

onde  $X$  é uma variável aleatória uniformemente distribuída no intervalo unitário. Do contrário, escolhe-se  $\theta = \cos^{-1}(1 - 2X)$ . Há, no entanto, um problema na expressão (4.139). A primeira parte da expressão apresenta uma singularidade a  $\theta = \cos^{-1}(1 - \alpha)$  e Browning et. al. não deixam claro como avaliar e depois pesar a área intrínseca a esta parte da distribuição (dado um valor de  $\theta$ ), relativamente à outra parte da distribuição.

Czyzewski et. al. <sup>[3]</sup> usam a seção de choque Mott (4.135) e os potenciais de Thomas-Fermi-Dirac (TFD) e o de Hartree-Fock(-Slater) (HFS) para  $Z < 55$ . Para  $Z > 55$ , o potencial de Hartree-Fock relativístico é simultaneamente empregado com um simples modelo muffin-tin. Czyzewski et. al. mostram que o uso de diferentes modelos de potenciais produz seções de choque diferenciais ligeiramente diferentes principalmente para certos intervalos angulares e sobretudo para energias mais baixas. Os coeficientes de retroespalhamento também seriam afetados com o uso de diferentes modelos de potencial. No entanto, essa tendência é enfraquecida para  $Z$  mais alto, de maneira que o coeficiente de retroespalhamento obtido para um número atômico mais alto, a partir de diferentes modelos de potencial torna-se mais próximo.

Kotera et. al. <sup>[4]</sup>, por sua vez, também fazem uso da seção de choque Mott (4.135) e do potencial

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} [0.19e^{-0.257x} + 0.56e^{-0.779x} + 0.25e^{-3.16}],$$

para o Au. Na expressão acima,  $x = 1.13Z^{1/3}r/a_H$ , onde  $a_H$  é o raio de Bohr. Dentre outras coisas, Kotera et. al. plotam um gráfico  $\eta_B \times E$  ( $\eta_B$  é o coeficiente de retroespalhamento) e mostra que  $\eta_B$  cresce rapidamente com a energia até  $E = 1\text{KeV}$  e depois disso matém uma tendência muito leve de crescimento.

Sary et. al. <sup>[5]</sup> fizeram uso dos potenciais TFD e HFWS (muffin-tin) para comparar dados experimentais e simulacionais dos coeficientes de retroespalhamento para alguns materiais os quais são Si, Cu, Au e Al. No entanto, eles plotaram a razão dos coeficientes para 2 materiais que sofreram medidas sob as mesmas condições experimentais, pois os resultados obtidos seriam independentes de certos parâmetros experimentais, como corrente de feixe incidente e eficiência do detetor eletrônico. Com isso, houve ganho na comparação entre os resultados experimentais e os resultados obtidos por simulação de Monte Carlo. Para o sistema Au-Cu, a razão de intensidades calculada por Monte Carlo foi comparada com os valores de dois conjuntos de dados experimentais. Para ambos os conjuntos a concordância é no mínimo qualitativa e os valores medidos são usualmente e sistematicamente maiores que os simulados, principalmente, quando se usa o modelo de potencial HFWS. Em outros casos, como nos sistemas Si-Cu e SiO<sub>2</sub>-Cu, na faixa de energias de 0.2 KeV a 1.0 KeV, houve concordância relativamente boa, na faixa de 10 %, comparando valores experimentais e Monte Carlo.

Jablonski et. al. <sup>[6]</sup> também fazem uso da expansão em ondas parciais relativística e dos potenciais TFD e DHF de modo a investigar o uso de diferentes potenciais (ou de diferentes seções de choque) e o que o uso de um ou outro influencia a determinação do livre caminho médio inelástico. Eles plotam a razão

$$\% \Delta DCS = 100\% \frac{(DCS^{TFD} - DCS^{DHF})}{DCS^{DHF}}$$

contra o ângulo de espalhamento e verificaram que esta razão é expressiva para uma faixa muito curta de  $\theta$ , chegando mesmo a alcançar os 400 %. Desde que eventos de retroespalhamento elástico das superfícies são determinados por eventos de espalhamento elástico a grandes ângulos, espera-se alguma não muito forte dependência angular da probabilidade de retroespalhamento com a DCS (seção de choque diferencial) empregada e que se o ângulo entre a direção do feixe eletrônico atacando a superfície do sólido e o eixo do analisador corresponde a um mínimo na DCS então o valor de  $\eta_B$  calculado depende drasticamente da DCS, desde que desvios particularmente grandes entre DCS's calculadas para os dois potenciais mencionados ocorrem, geralmente, nas vizinhanças dos mínimos.

Kwei et. al. <sup>[8]</sup> diferentemente de outras fontes fazem uso da expansão em ondas parciais não-relativística (4.122). Em seu trabalho, o potencial HFWS foi empregado.

# Capítulo 5

## Resultados

### 5.1 Das simulações

Voltamos para simulações de Monte Carlo, só que através de três materiais diferentes, a saber: Cobre, Ouro, e Alumínio. Dois casos são tratados para cada amostra, um onde a energia inicial dos elétrons é de 2.0 keV e outro onde a mesma é 5.0 keV. Em todos os casos, é adotada a seção de choque diferencial (4.46) e a equação de perda de energia (4.103), ou seja, partimos para um caso mais próximo da realidade, e, procuramos verificar se o que foi observado para o Ouro, dada a seção de choque de Rutherford simples, perdura, mesmo embora tenhamos restringido o espaço amostral para a variável ângulo de espalhamento elástico  $\Theta$  para o intervalo  $(5^\circ, 180^\circ]$ , no primeiro caso.

É conveniente mencionar aqui o algoritmo, o qual é bastante similar ao usado naquela oportunidade, a despeito da inclusão de algumas poucas linhas, conforme pode-se constatar a seguir. Adotamos como energia de corte o valor de 50 eV. Este valor é “padronizado” e tem suas razões físicas. Dentro do espectro de energias de elétrons retroespalhados da amostra, abaixo dos 50 eV os elétrons secundários dominam. E como estamos concentrando as nossas atenções sobre os elétrons retroespalhados para a interpretação de alguns resultados, adotamos um tal procedimento.

#### 5.1.1 Algoritmo 2

O algoritmo utilizado nesses estudos segue os seguintes passos:

- Calcule o livre caminho médio;
- Repita:
  - Determine as coordenadas  $x^{(1)}$ ,  $y^{(1)}$  e  $z^{(1)}$  para a penetração inicial do elétron;
- Repita:

- Determine as deflexões angulares  $\theta^{(n-1)}$  e  $\phi^{(n-1)}$ ;
- Determine a  $n$ -ésima distância percorrida, após a  $(n - 1)$  -ésima colisão;
- Calcule a perda de energia sofrida pelo elétron,  $\Delta E$ , a partir da expressão (4.103);
- Calcule a energia do elétron,  $E$ , antes da  $n$ -ésima colisão;
- Se  $E < 50$  eV então pare;
- Então encontre as coordenadas  $x^{(n)}$ ,  $y^{(n)}$  e  $z^{(n)}$  do elétron conforme procedimento descrito na seção (3.2);
- Se  $z^{(n)} < 0$  (ou seja, se o elétron deixa a amostra) então pare;
- Se o número de trajetórias excede 1000000 então pare.

## 5.2 Resultados

Na fig. 5.1 esboçamos em um mesmo gráfico as curvas para os valores médios das componentes dos vetores unitários na direção de movimento de um feixe de elétrons espalhando através do ouro e do cobre. Temos ao todo 1000000 de elétrons em cada feixe. Verifica-se que para a mesma amostra, o ângulo médio com respeito à direção original de movimento cai mais devagar ou a uma taxa menor a uma energia de 5.0 keV que a uma energia de 2.0 keV. Agora, para a mesma energia, verifica-se que o valor médio do cosseno do ângulo polar cai mais vagarosamente no Cu que no Au. Note que o número atômico do Au é maior que o do Cu.

No gráfico da fig. 5.2, plotamos o logarítmo do valor médio da componente  $Z$  do vetor unitário na direção de movimento em função do número de colisões sofrido por um elétron do feixe (o que nada mais é que o valor médio do cosseno do ângulo entre a direção instantânea de movimento do elétron e a direção inicial a qual é normal à superfície da amostra) para o mesmo material e três diferentes situações:

- Situação realista: Espalhamento no espécime, perda de energia segundo a equação de Bethe;
- Situação semi-realista: Espalhamento no espécime, energia constante;
- Situação não-realista: Espalhamento no espaço infinito, energia constante.

Note que as curvas para as duas primeiras situações se confundem até  $N \approx 10$ . A partir daí, há um desvio muito pequeno de uma curva com respeito à outra; no entanto, o comportamento exibido pelo sistema é o mesmo no que diz respeito ao valor médio do ângulo polar. Essa situação vai de acordo com o que foi dito no Capítulo 1. Em média, interações inelásticas praticamente

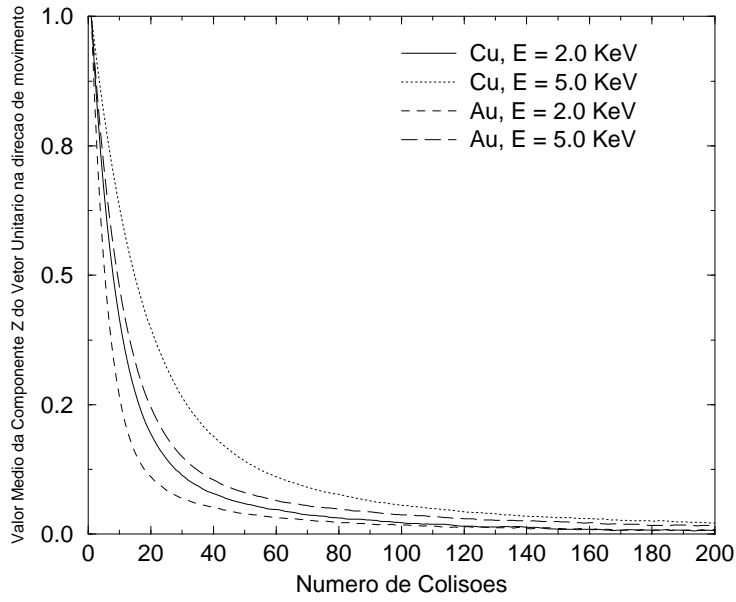


Figura 5.1:  $\langle \cos \theta \rangle$  para o Au e Cu e duas energias.

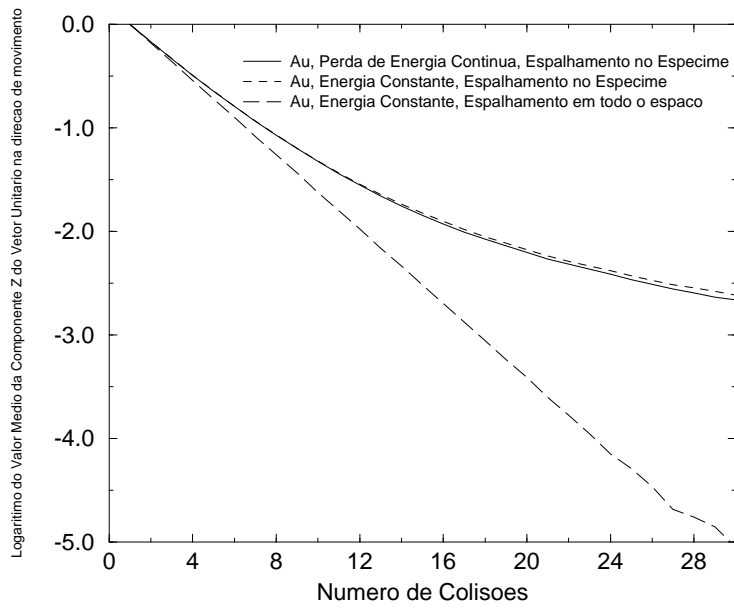


Figura 5.2:  $\ln(\cos \theta)$  para o Au em 3 situações específicas.

não afetam a direção de movimento do elétron. É visível que a componente  $Z$  do vetor unitário na direção de movimento não cai exponencialmente no tempo. Por outro lado, se nós permitíssemos que o elétron espalhasse por todo o espaço, eliminando a condição de fronteira absorvente a  $z = 0$ , isto ocorreria, conforme se vê pelo mesmo gráfico. Portanto, pode-se afirmar que, seguramente, o que determina que  $\langle \cos\theta \rangle$  não seja uma função do tipo exponencial negativa, com respeito ao tempo, não são as interações inelásticas sofridas pelo elétron, mas, sim, o fato de termos presente uma fronteira absorvedora a  $z = 0$ , ou seja, na prática, o fato de que quando  $z < 0$ , para um elétron, o mesmo não contribui para o cálculo de  $\langle \cos\theta \rangle$  para instantes de tempo subsequentes.

Nas figuras 5.3 a 5.10 plotamos para os mesmo números atômicos e as mesmas energias dois histogramas:

- Número de vezes que um determinado sub-intervalo na direção original de movimento é visitado por um dos elétrons do feixe (retroespalhados);
- Número de vezes que um determinado sub-intervalo na direção longitudinal (ortogonal à direção original de movimento) é visitado pelo mesmo elétron (retroespalhado) do feixe.

O comprimento de cada um dos sub-intervalos (nas direções radial e  $z$ ) é fornecido pela seguinte tabela:

Comprimentos de sub-intervalo radial $R$ e longitudinal $Z$ , em cm			
Material	E (keV)	$R$	$Z$
Cobre	2.0	$1.6 \times 10^{-9}$	$2.0 \times 10^{-9}$
Cobre	5.0	$7.5 \times 10^{-9}$	$9.0 \times 10^{-9}$
Ouro	2.0	$1.0 \times 10^{-9}$	$1.3 \times 10^{-9}$
Ouro	5.0	$4.0 \times 10^{-9}$	$4.0 \times 10^{-9}$

De modo a levantar os histogramas, divide-se o espaço dentro do material em sub-intervalos com as dimensões mostradas na tabela acima e contabiliza-se cada vez que um elétron (retroespalhado) visita um determinado sítio dentro da amostra. O leitor pode estar se perguntando como foram obtidos os comprimentos de sub-intervalos mostrados na tabela acima. A maneira pela qual chegamos aos valores mostrados é muito simples. Modificamos o Algoritmo 2 para incluir um passo onde é determinado quais são os alcances radial e longitudinal máximos de um elétron do feixe (que será obviamente absorvido pela amostra). É claro, que o ponto dentro da amostra que corresponde ao alcance radial máximo não é necessariamente coincidente com o ponto correspondente ao alcance longitudinal máximo ou à profundidade máxima de um elétron do feixe. Finalmente, dividimos por 1000 o valor encontrado e, por conseguinte, dividimos por 1000 o segmento de reta que vai

da origem aos respectivos pontos.

Enquanto que para a confecção dos dois primeiros gráficos tomamos um total de 1000000 de trajetórias, consideramos agora um total de 100000 trajetórias. Com tais duas distribuições é possível visualizar espacialmente a região do material que é mais provável que um elétron do feixe (retroespalhado) tenha visitado. Além disso, é possível estimar com certa exatidão a extensão máxima percorrida por um elétron retroespalhado em ambas as direções. Como é visto nos gráficos, para ambos os materiais, os alcances máximos nas direções radial e  $z$  de um elétron (retroespalhado) parecem ser proporcionais ao quadrado da energia do feixe. No mais, os perfis dos gráficos mostrados não se alteram significativamente quando se altera o material (de Cu para Au ou vice-versa) ou a energia do feixe, de maneira que a distância radial máxima relativa ou a profundidade máxima relativa alcançada pelo feixe é aproximadamente a mesma, quando modificamos tais parâmetros. Diferentemente do que aconteceu quando simulamos o espalhamento eletrônico através do ouro, segundo o modelo de Rutherford simples, aqui o alcance máximo de um elétron retroespalhado está aquém do alcance máximo de um elétron absorvido numa proporção que está entre 1/2 e 1/3, aproximadamente. Veja a seguinte tabela:

Distâncias radial e profundidade máximas, em cm			
Material	E (keV)	$R_{max}^{retro.}/R_{max}^{abs.}$	$Z_{max}^{retro.}/Z_{max}^{abs.}$
Cobre	2.0	$1.0 \times 10^{-6}/2.0 \times 10^{-6}$	$6.1 \times 10^{-7}/2.0 \times 10^{-6}$
Cobre	5.0	$4.5 \times 10^{-6}/8.6 \times 10^{-6}$	$2.8 \times 10^{-6}/9.0 \times 10^{-6}$
Ouro	2.0	$4.7 \times 10^{-7}/9.4 \times 10^{-7}$	$4.0 \times 10^{-7}/1.3 \times 10^{-6}$
Ouro	5.0	$1.9 \times 10^{-6}/3.8 \times 10^{-6}$	$1.2 \times 10^{-6}/4.0 \times 10^{-6}$

Os gráficos (5.11) a (5.16) mostram as seguintes distribuições: número de elétrons retroespalhados versus distância radial e número de elétrons retroespalhados versus profundidade para espalhamento através do alumínio, energias de 2.0 keV e 5.0 keV e seções de choque de Rutherford Blindada e de Mott perturbativa. No caso da seção de choque Mott, apenas são mostradas as referidas distribuições para a energia inicial do feixe incidente igual a 2.0 keV. Note que no caso especial dos gráficos de número de elétrons retroespalhados versus distância radial há um patamar aproximadamente constante e que cai vagarosamente com o aumento da distância radial. Logo, há uma faixa de coordenadas radiais igualmente prováveis de um elétron ter ocupado, em algum instante de tempo. O perfil do gráfico para uma tal distribuição é o mesmo independente se  $E = 2.0$  keV ou  $E = 5.0$  keV. Novamente, há uma tendência verificada aqui de que a distância radial máxima e a profundidade máxima alcançada por um elétron retroespalhado do alumínio variam com o

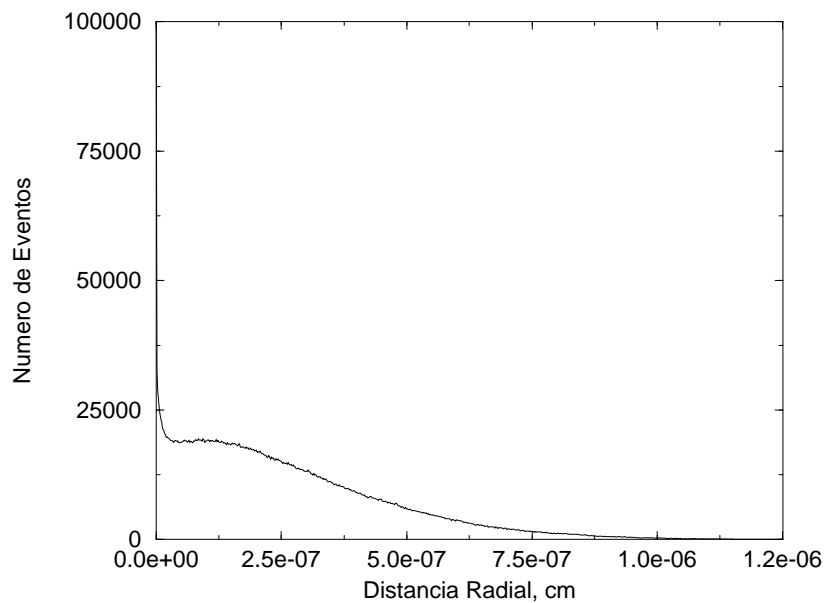


Figura 5.3: número de eventos versus distância radial para o Cu,  $E = 2.0$  keV.

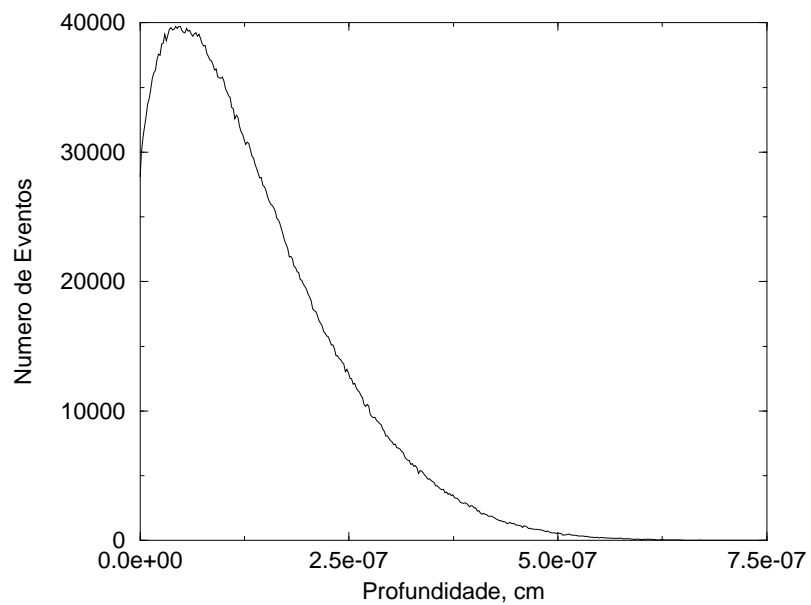


Figura 5.4: número de eventos versus profundidade para o Cu,  $E = 2.0$  keV.

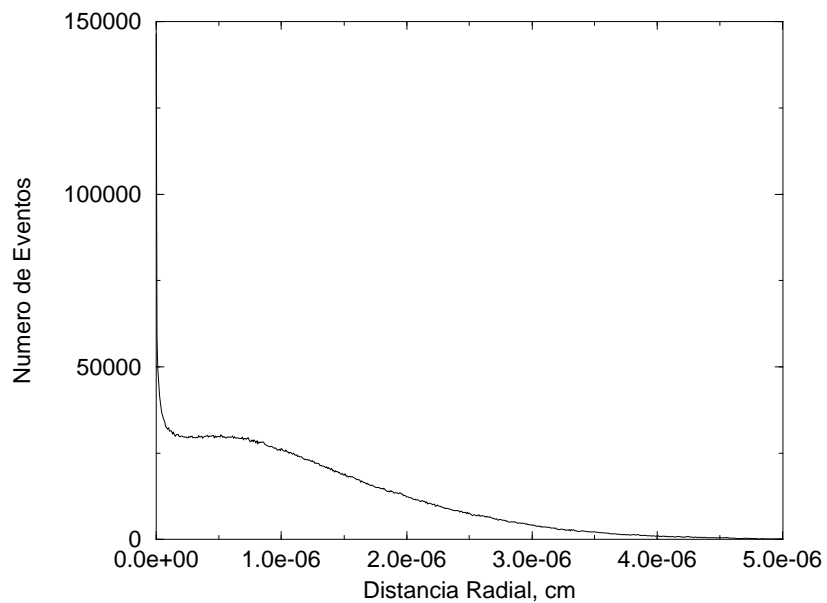


Figura 5.5: número de eventos versus distância radial para o Cu,  $E = 5.0$  keV.

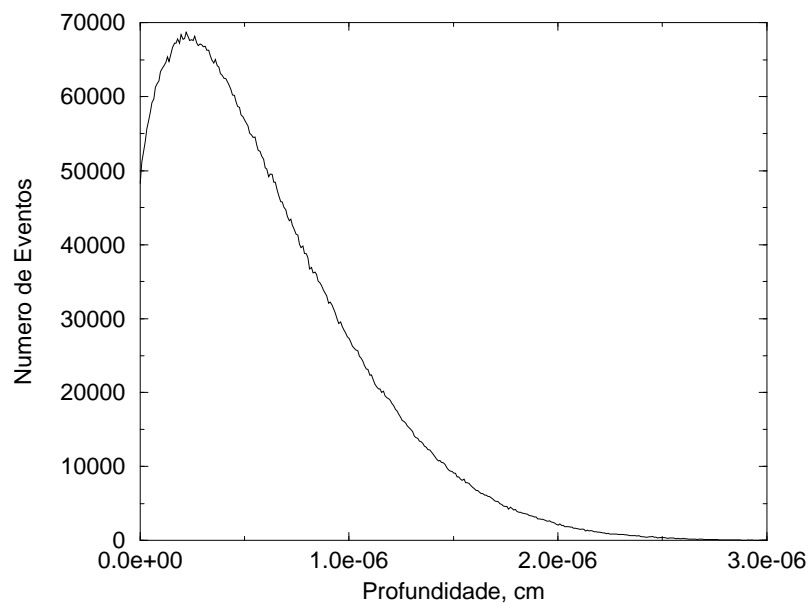


Figura 5.6: número de eventos versus profundidade para o Cu,  $E = 5.0$  keV.

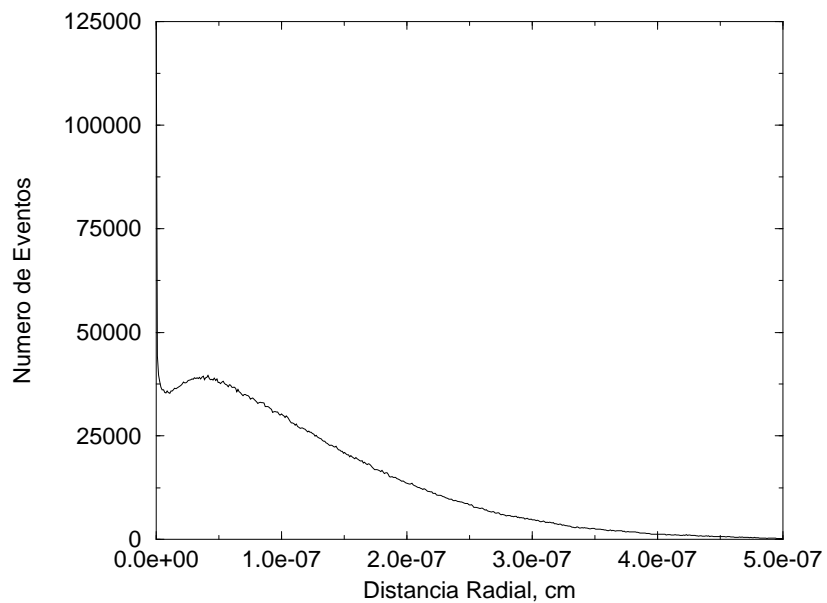


Figura 5.7: número de eventos versus distância radial para o Au,  $E = 2.0$  keV.

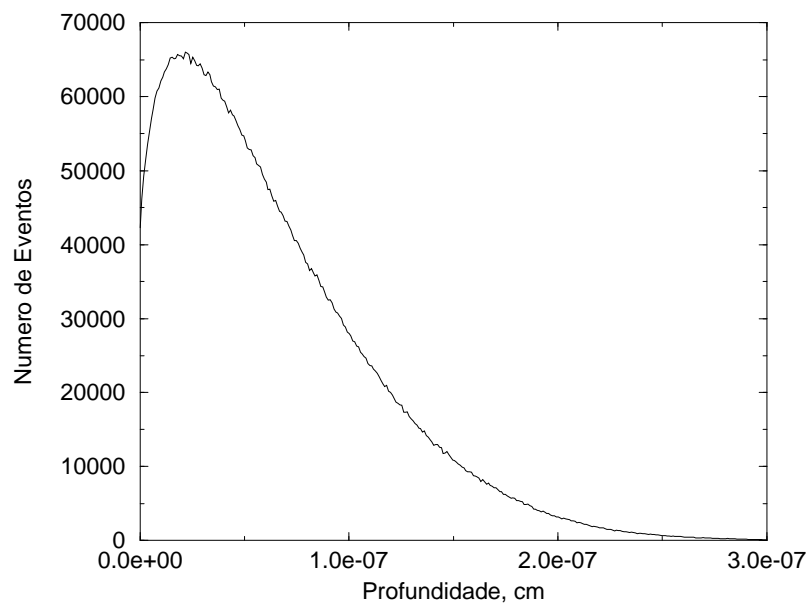


Figura 5.8: número de eventos versus profundidade para o Au,  $E = 2.0$  keV.

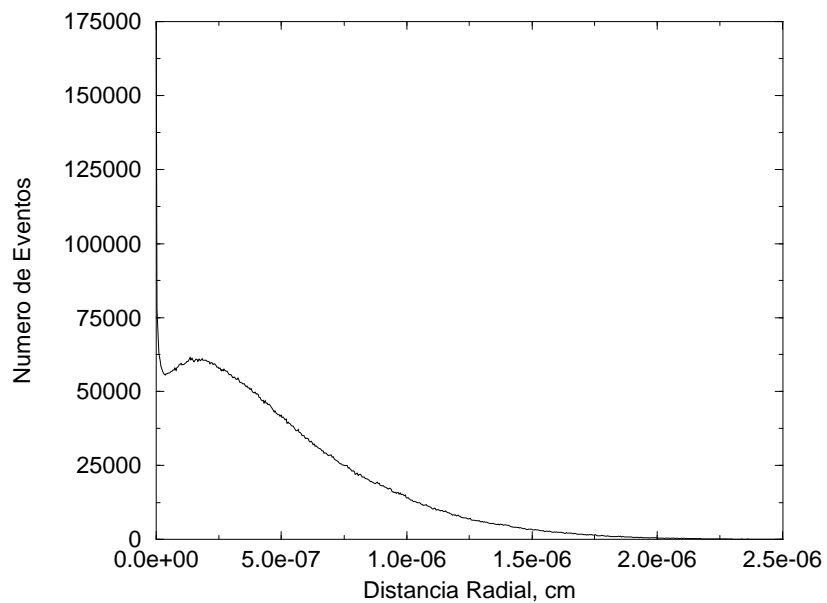


Figura 5.9: número de eventos versus distância radial para o Au,  $E = 5.0$  keV.

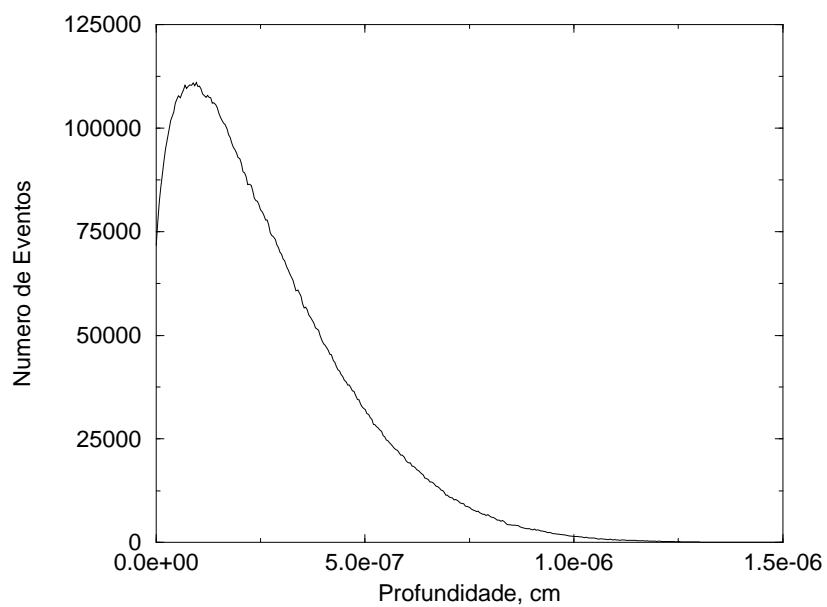


Figura 5.10: número de eventos versus profundidade para o Au,  $E = 5.0$  keV.

quadrado da energia do feixe incidente. Além disso, para um elétron retroespalhado do alumínio a distância radial máxima jaz entre  $0.6R_{max}^{abs.}$  e  $0.7R_{max}^{abs.}$ , independentemente da energia inicial.

Quanto aos gráficos número de eventos versus profundidade, para um elétron retroespalhado do alumínio,  $0.3Z_{max}^{abs.} < Z_{max}^{retro.} < 0.4Z_{max}^{abs.}$  não importando se  $E = 2.0$  keV ou  $E = 5.0$  keV. Se, no entanto, usamos a seção de choque Mott aproximada ao invés de Rutherford Blindada, embora os perfis das distribuições ainda continuem os mesmos, a despeito do fato de Mott não apresentar um patamar aproximadamente constante no gráfico número de eventos versus distância radial, ocorre alguma modificação nos valores das distâncias radial e longitudinal máximas para o elétron retroespalhado. É importante ressaltar, contudo, que no caso da implementação da simulação de Monte Carlo segundo a seção de choque de Mott perturbativa, porque houve um aumento do custo de tempo de processamento, apenas 10 000 trajetórias foram simuladas. Veja a seguinte tabela:

Distâncias radial e profundidade máximas para o Al, em cm			
Modelo	E (keV)	$R_{max}^{retro.} / R_{max}^{abs.}$	$Z_{max}^{retro.} / Z_{max}^{abs.}$
Rut. Blindado	2.0	$4.0 \times 10^{-6} / 6.7 \times 10^{-6}$	$2.2 \times 10^{-6} / 6.3 \times 10^{-6}$
Rut. Blindado	5.0	$2.0 \times 10^{-5} / 3.4 \times 10^{-5}$	$1.2 \times 10^{-5} / 4.0 \times 10^{-5}$
Mott Perturbativo	2.0	$3.0 \times 10^{-6} / 5.0 \times 10^{-6}$	$3.0 \times 10^{-6} / 5.0 \times 10^{-6}$

É importante mencionar os comprimentos de sub-intervalo de cada um dos histogramas mostrados para o caso do alumínio, os quais são vistos na seguinte tabela:

Comprimentos de sub-intervalo radial $R$ e longitudinal $Z$ , em cm			
Modelo	E (keV)	$R$	$Z$
Rutherford Blindado	2.0	$6.6 \times 10^{-9}$	$6.3 \times 10^{-9}$
Rutherford Blindado	5.0	$3.3 \times 10^{-8}$	$4.0 \times 10^{-8}$
Mott Perturbativo	2.0	$5.0 \times 10^{-9}$	$5.0 \times 10^{-9}$

No que tange à evolução temporal de  $\cos \theta$  a mesma não revela diferenças muito drásticas entre um modelo e outro (lê-se Rutherford Blindado e Mott perturbativo). Ocorre algum (embora muito pequeno) afastamento para  $N \approx 30$ . Veja os gráficos (5.17) e (5.18).

Os gráficos (5.19) a (5.25) mostram as distribuições número de elétrons retroespalhados versus número de colisões. É possível ver que quanto maior o número atômico, menor o número de colisões que pode o elétron sofrer, espalhando através da amostra, antes de sair. Há também uma leve tendência de o número de colisões antes de sair aumentar com a energia inicial do feixe, para o caso específico do modelo de Rutherford Blindado para a seção

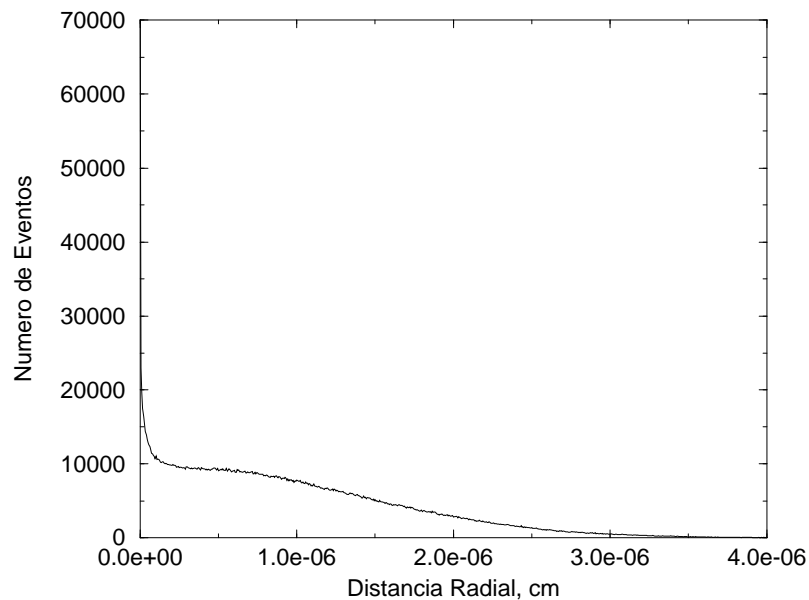


Figura 5.11: número de eventos versus distância radial para o Al,  $E = 2.0$  keV, modelo de Rutherford Blindado.

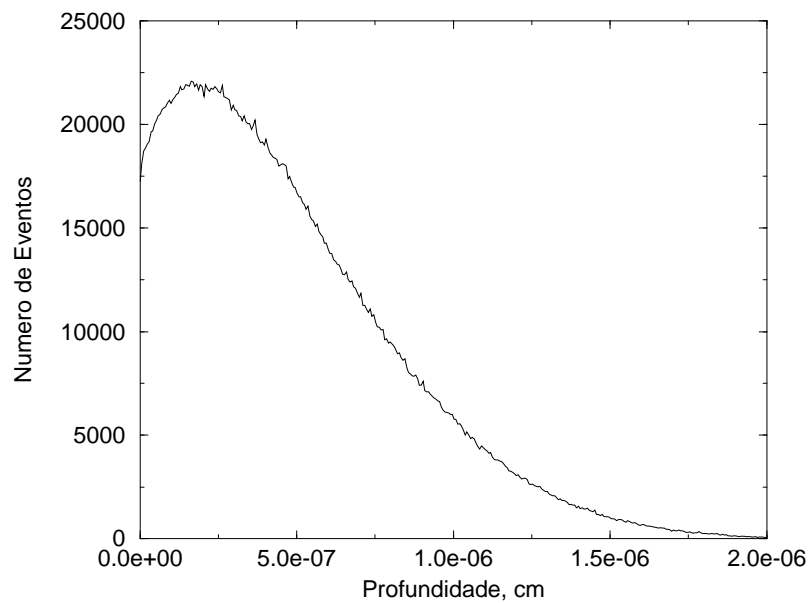


Figura 5.12: número de eventos versus profundidade para o Al,  $E = 2.0$  keV, modelo de Rutherford Blindado.

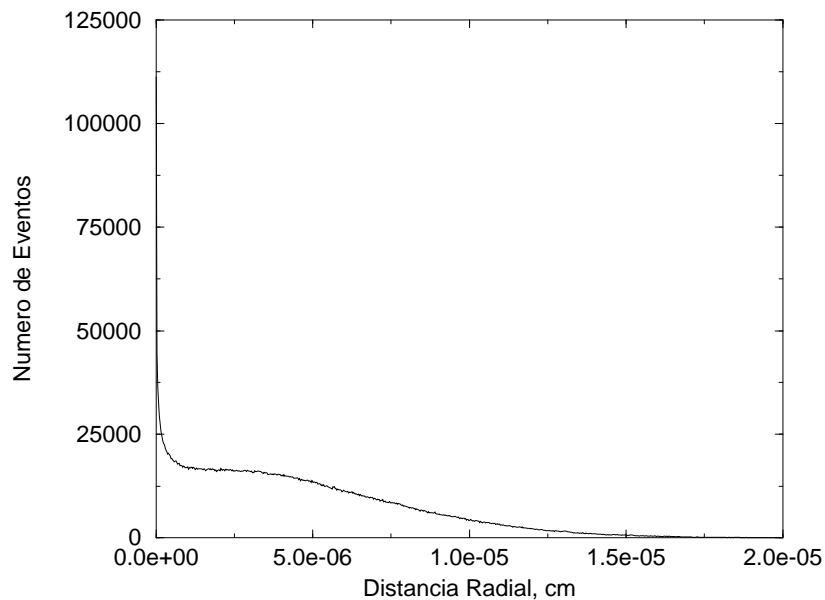


Figura 5.13: número de eventos versus distância radial para o Al,  $E = 5.0$  keV, modelo de Rutherford Blindado.

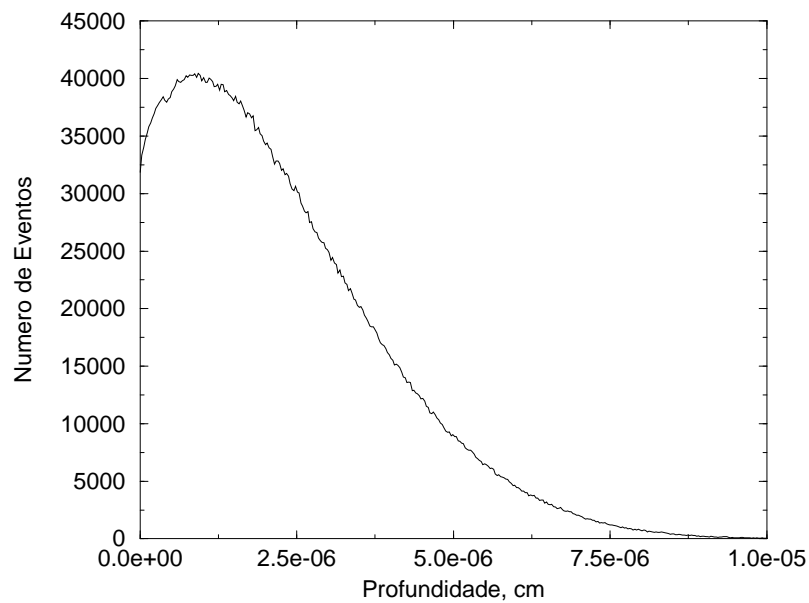


Figura 5.14: número de eventos versus profundidade para o Al,  $E = 5.0$  keV, modelo de Rutherford Blindado.

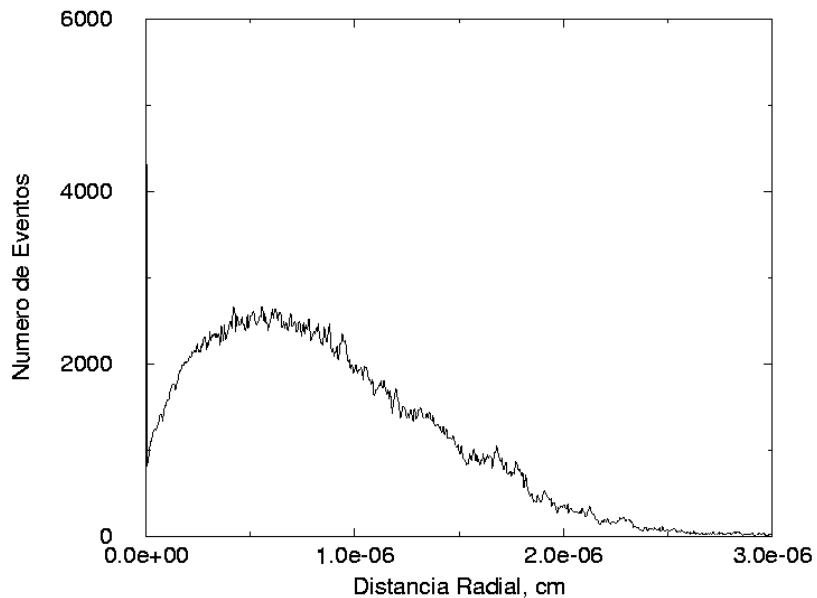


Figura 5.15: número de eventos versus distância radial para o Al,  $E = 2.0$  keV, modelo de Mott perturbativo.

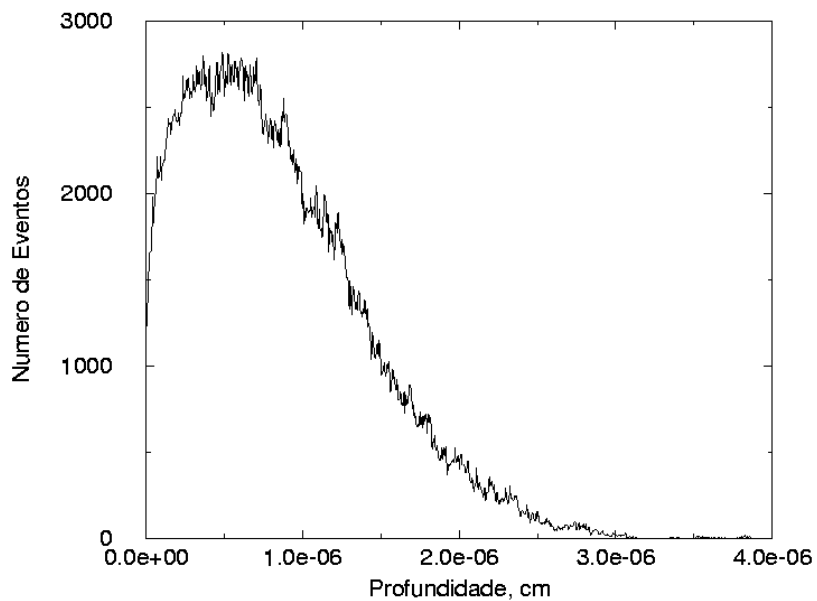


Figura 5.16: número de eventos versus profundidade para o Al,  $E = 2.0$  keV, modelo de Mott perturbativo.

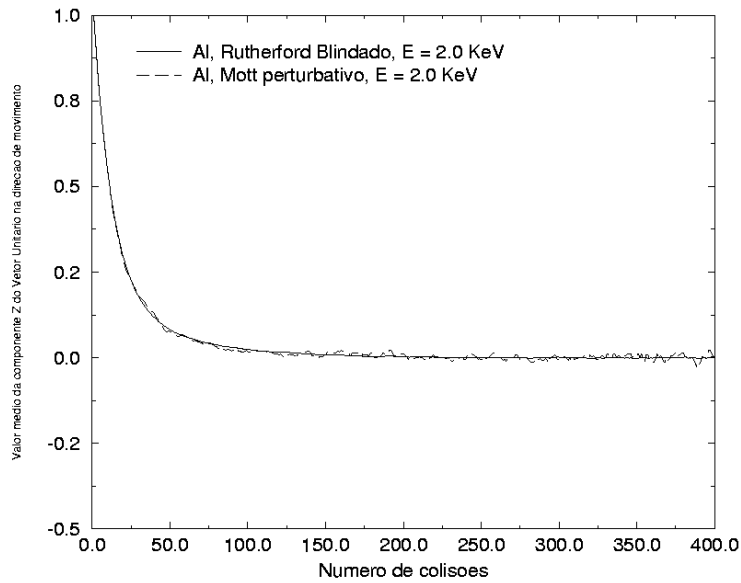


Figura 5.17:  $\cos \theta$  versus número de colisões.

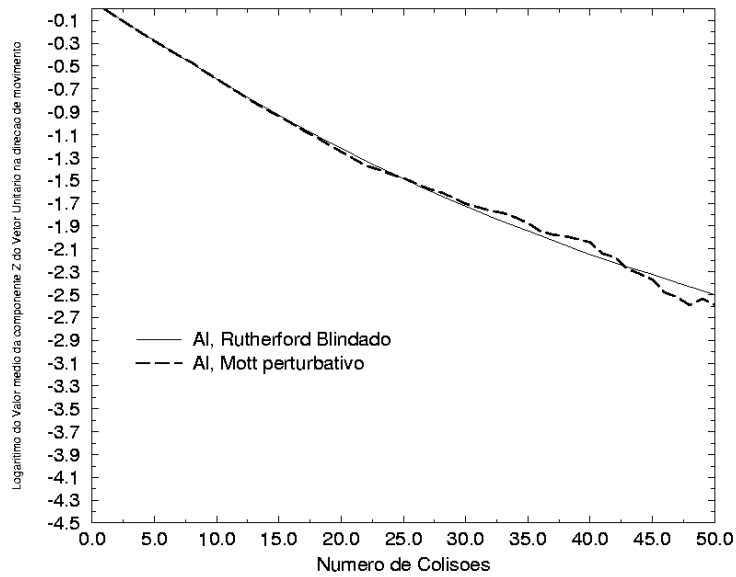


Figura 5.18:  $\ln(\cos\theta)$  versus número de colisões.

de choque. Torna-se mais fácil visualizar isto, se levantarmos os gráficos, normalizados, sobre um sistema de eixos, de maneira que forneçam as distribuições de probabilidade para um elétron do feixe ser retroespalhado da amostra e para um determinado valor de energia inicial do feixe em função do número de colisões. No eixo das ordenadas, colocamos a probabilidade para o elétron sair com um determinado número de colisões e no eixo das abscissas colocamos o número de colisões. Seja para uma energia inicial de 2.0 keV seja para uma energia de 5.0 keV, note que o valor do número de colisões mais provável “necessário” para o elétron ser retroespalhado se desloca para a esquerda quando  $Z$  aumenta. Já para um mesmo material, quando  $E$  aumenta, o número de colisões antes de sair mais provável se desloca para a direita. Veja a fig. 5.26. A tabela a seguir corrobora com os dados extraídos do gráfico da fig. 5.26. Ela apresenta os valores médios dos ângulos de espalhamento para os três materiais e as duas energias, calculados por simulação. Note que para um mesmo material parece haver uma tendência de um tal valor médio diminuir com um aumento da energia inicial de feixe. Note também que para uma dada energia inicial,  $\langle \theta \rangle$  parece crescer com  $Z$ . Se em média há um aumento do valor médio do ângulo de espalhamento, em média, um número de colisões menor será necessário para um elétron ser retroespalhado. Em contrapartida, se há uma diminuição do valor médio do ângulo de espalhamento, em média um número de colisões maior será necessário para um elétron ser retroespalhado.

Valores médios do ângulo de espalhamento para três materiais e duas energias		
Material	E (keV)	$\langle \theta \rangle$
Al	2.0	0.4885
Al	5.0	0.3602
Cu	2.0	0.6092
Cu	5.0	0.4620
Au	2.0	0.7647
Au	5.0	0.6062

Por fim, note também que há uma certa semelhança entre os gráficos para o alumínio, no caso de uma energia inicial do feixe de 2.0 keV, para ambos os modelos de Rutherford Blindado e Mott perturbativo. A diferença reside no fato de que como para Mott simulamos um número menor de trajetórias (10000 contra 1000000 no caso de Rutherford Blindado), o eixo das ordenadas parece ter sido dividido por cerca de 100 unidades.

Uma característica comum a todos os histogramas número de eventos versus distância radial, contudo, é que ocorre uma queda brusca do primeiro ponto para os subsequentes. De fato, tendo-se admitido que a primeira

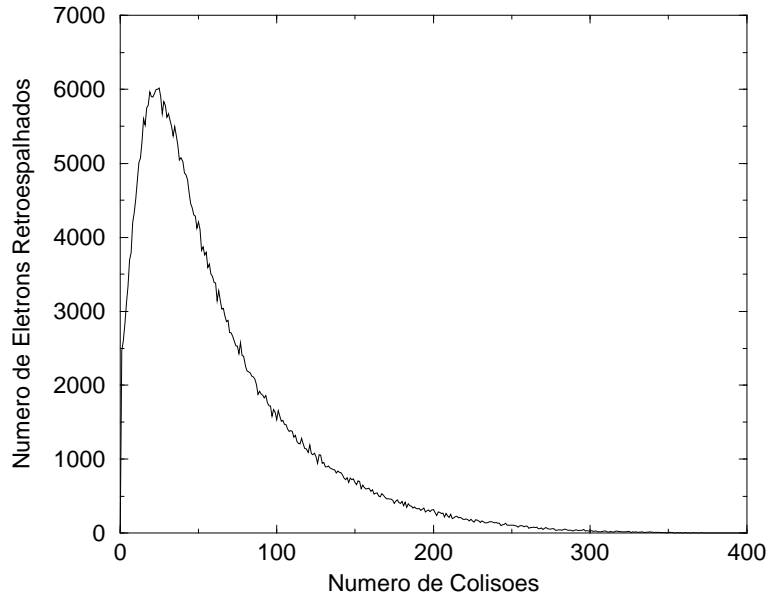


Figura 5.19: número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Al,  $E = 2.0$  keV, modelo de Rutherford Blindado.

colisão de um elétron do feixe ocorre em um ponto para o qual  $x = y = 0$ , certamente o elétron visitará um sítio para o qual  $R \leq C$ , pelo menos uma única vez, onde  $C$  é o comprimento de um sub-intervalo, na direção radial característico da amostra e da energia, se  $E = 2.0$  keV, ou  $E = 5.0$  keV.

Por fim, apresentamos a seguir gráficos  $Z$  versus  $X$  para o Al, Cu e Au e energias de 2.0 keV e 5.0 keV para o modelo de seção de choque de Rutherford blindado. Assim como foi feito para o Au e Rutherford simples, tais gráficos traçam algumas poucas trajetórias percorridas por elétrons do feixe através dos referidos materiais, sobre um total de 1000 trajetórias, ou seja, de 1000 trajetórias simuladas, aquelas que correspondem a trajetórias de elétrons retroespalhados têm suas posições subsequentes escritas em um arquivo. Note que no presente caso, o volume de interação parece ser um “pedaço” de esfera “deformado”, ou uma pera; pode-se afirmar isto se compararmos os gráficos especificamente para o Au, segundo a seção de choque de Rutherford Blindada e segundo Rutherford simples. Lembre-se que, conforme já discutido no Capítulo 1 desse trabalho, o livre caminho médio diminui ao longo das trajetórias, no presente caso, em razão das interações inelásticas. No entanto, todos os gráficos parecem ser simétricos com relação ao eixo  $Z$ . Finalmente, o volume de interação parece crescer com  $E$ .

Ainda comparando os gráficos para o Au, considerando as seções de choque de Rutherford simples e Rutherford Blindado, note que para uma

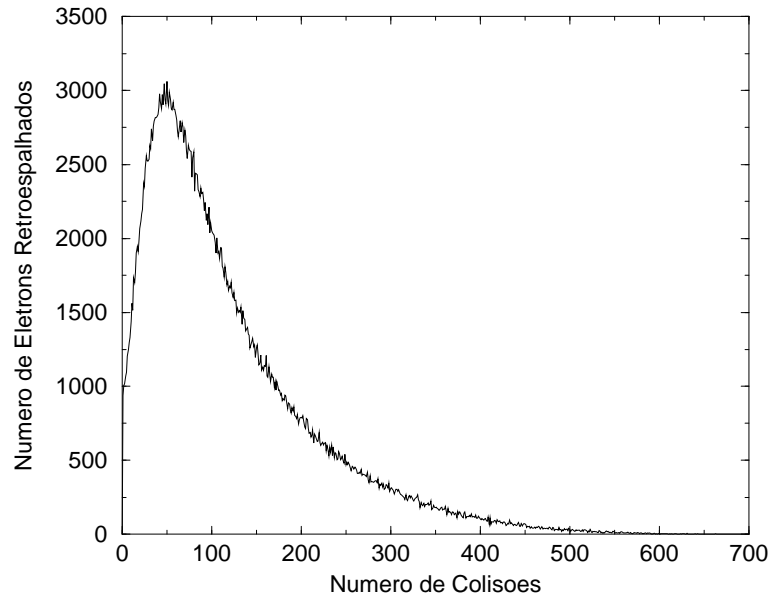


Figura 5.20: número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Al,  $E = 5.0$  keV, modelo de Rutherford Blindado.

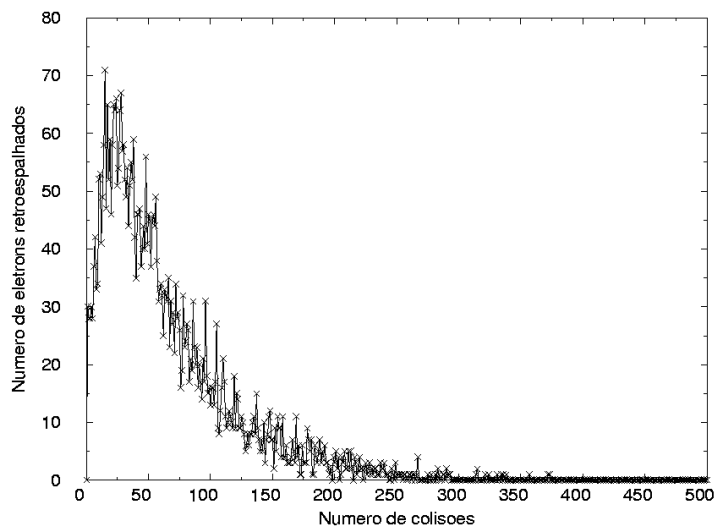


Figura 5.21: número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Al,  $E = 2.0$  keV, modelo de Mott perturbativo.

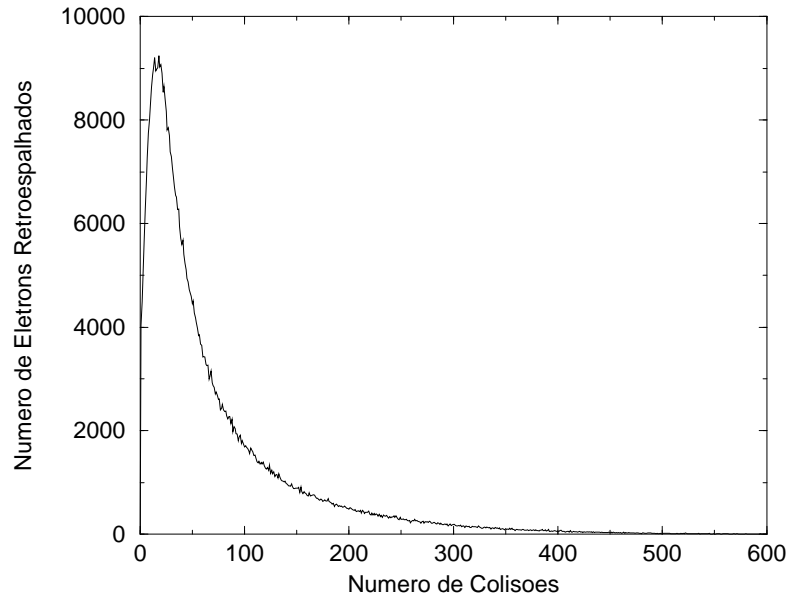


Figura 5.22: número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Cu,  $E = 2.0$  keV, modelo de Rutherford Blindado.

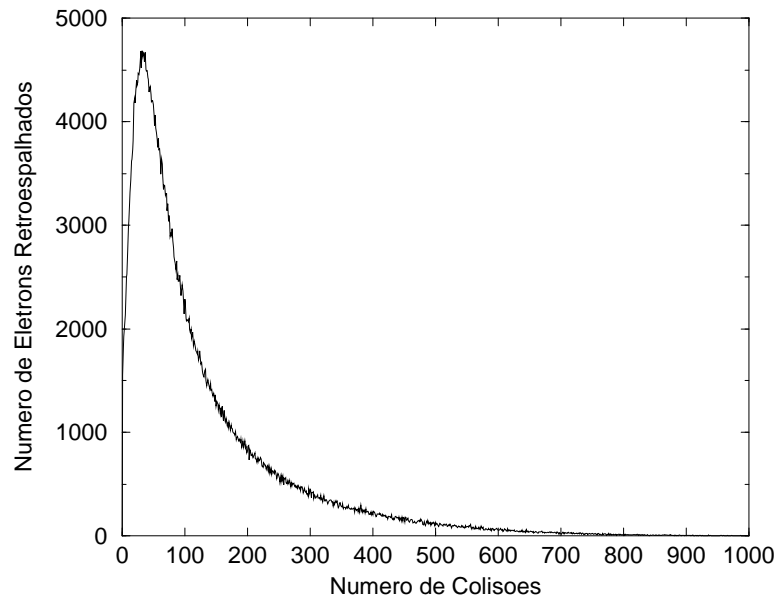


Figura 5.23: número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Cu,  $E = 5.0$  keV, modelo de Rutherford Blindado.

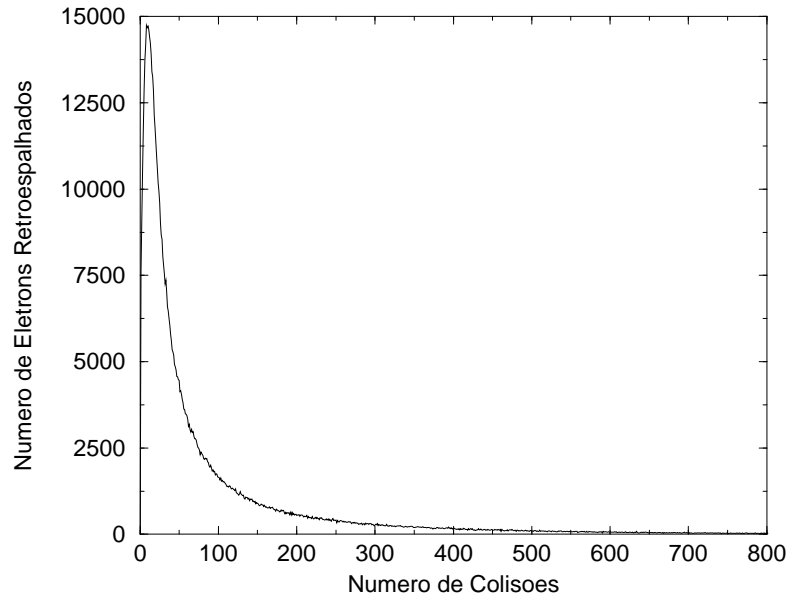


Figura 5.24: número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Au,  $E = 2.0$  keV, modelo de Rutherford Blindado.

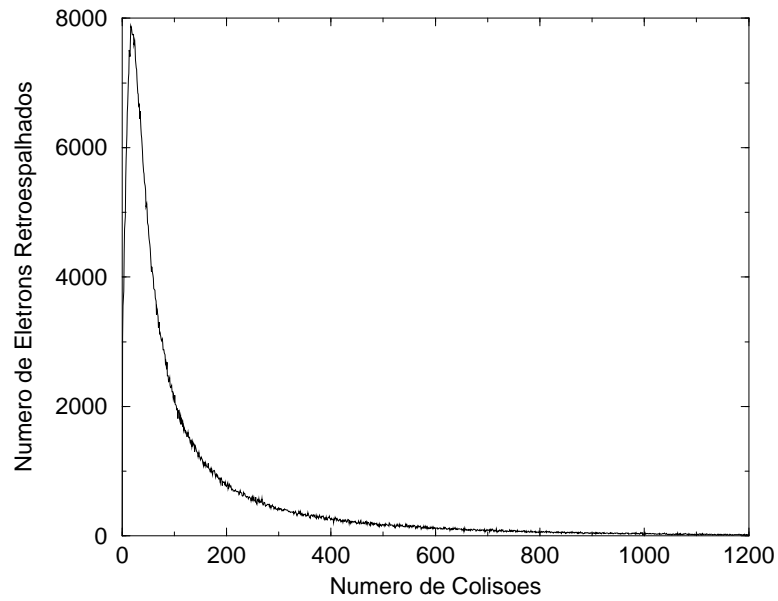


Figura 5.25: número de elétrons retroespalhados versus número de colisões para o Au,  $E = 5.0$  keV, modelo de Rutherford Blindado.

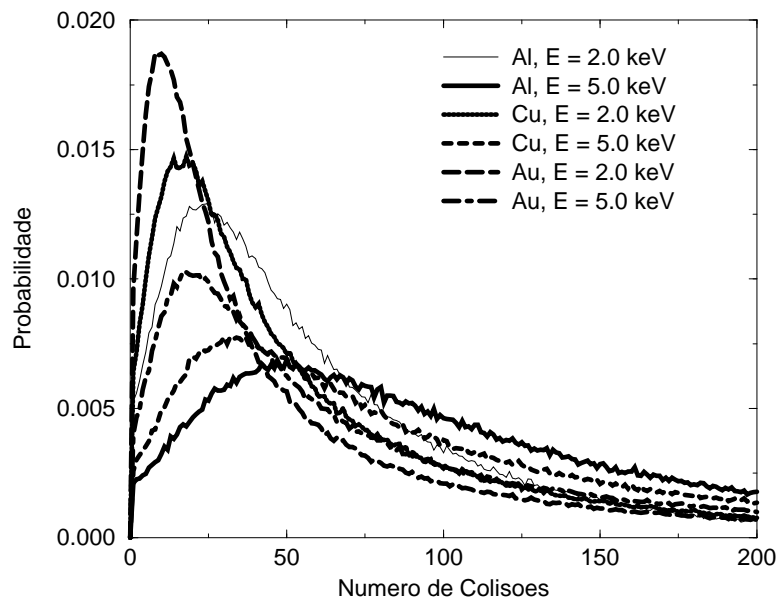


Figura 5.26: probabilidade X número de colisões para três materiais e duas energias.

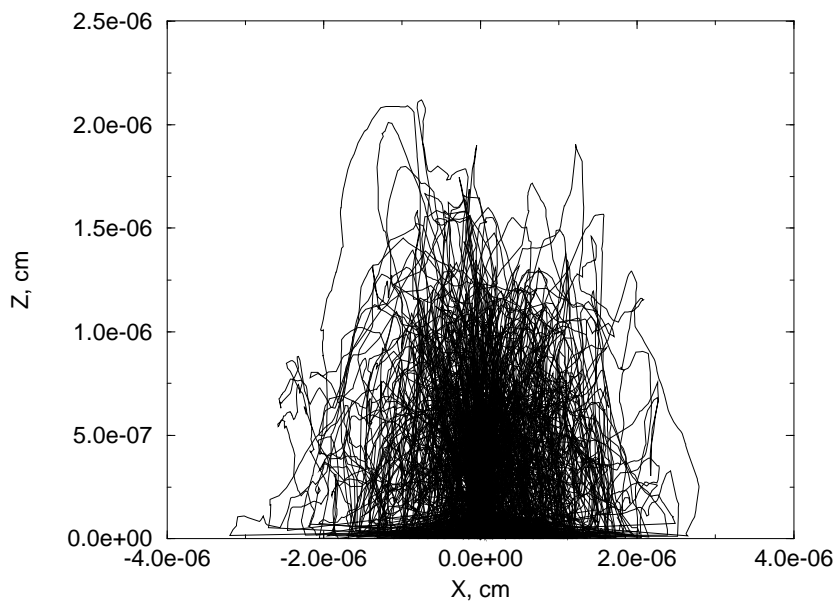


Figura 5.27: Gráfico Z versus X para o Al, E = 2.0 keV e Modelo de Rutherford Blindado.

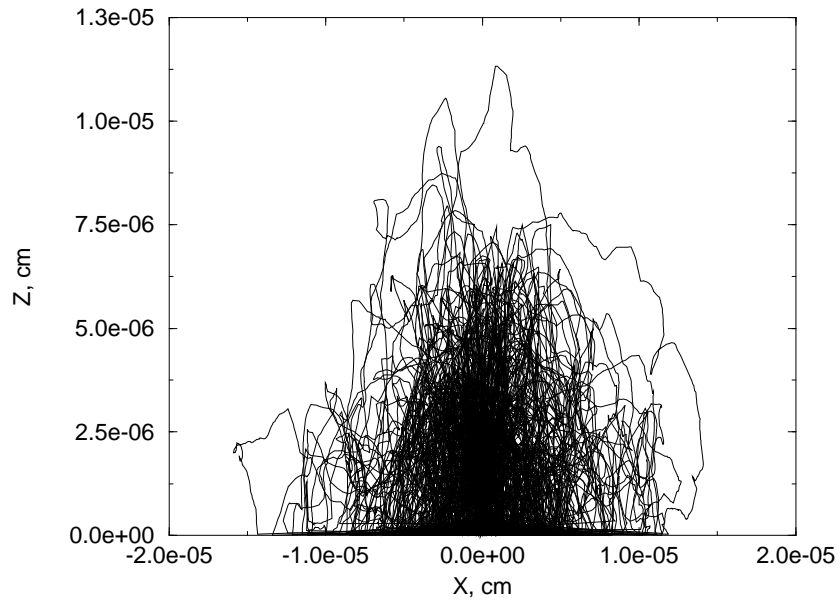


Figura 5.28: Gráfico Z versus X para o Al,  $E = 5.0$  keV e Modelo de Rutherford Blindado.

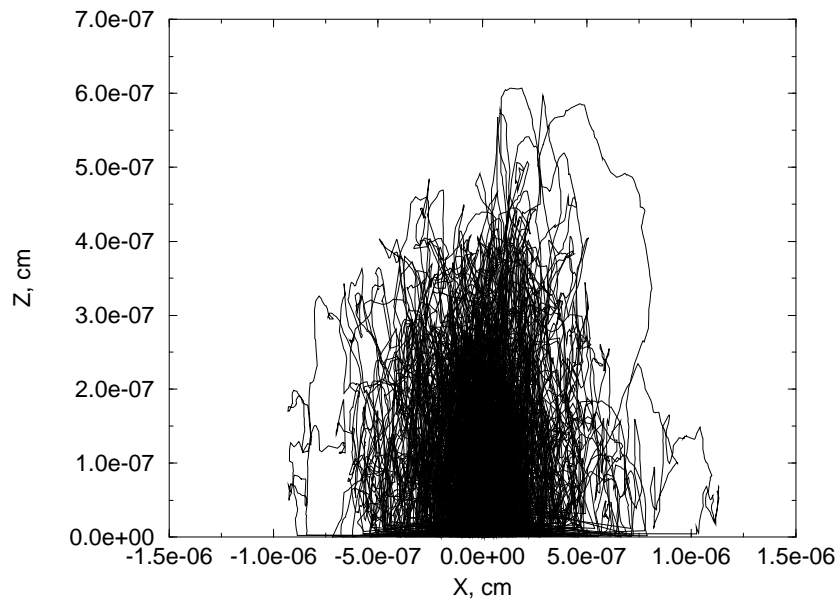


Figura 5.29: Gráfico Z versus X para o Cu,  $E = 2.0$  keV e Modelo de Rutherford Blindado.

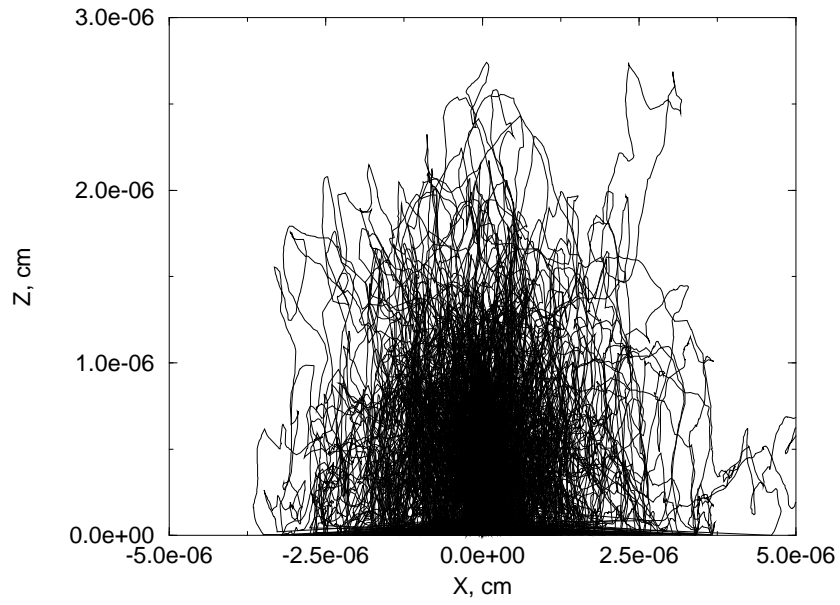


Figura 5.30: Gráfico Z versus X para o Cu,  $E = 5.0$  keV e Modelo de Rutherford Blindado.

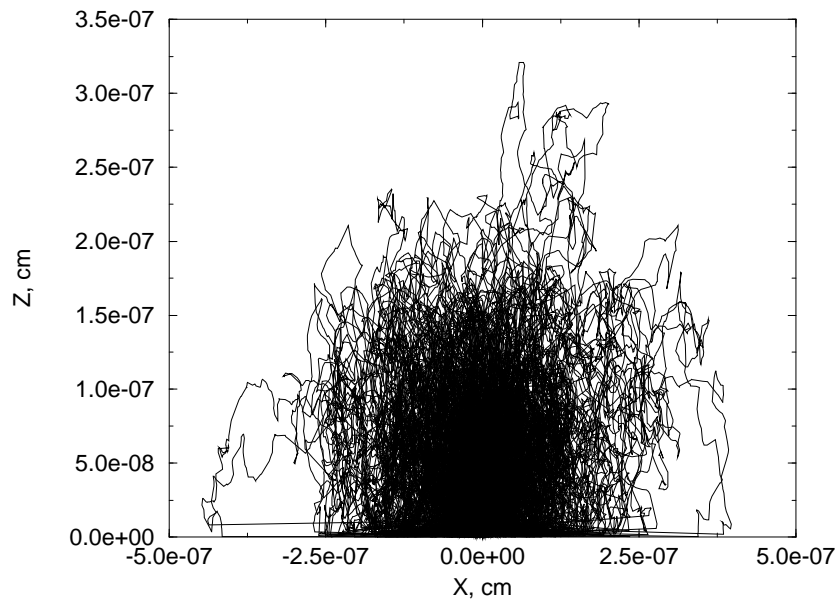


Figura 5.31: Gráfico Z versus X para o Au,  $E = 2.0$  keV e Modelo de Rutherford Blindado.

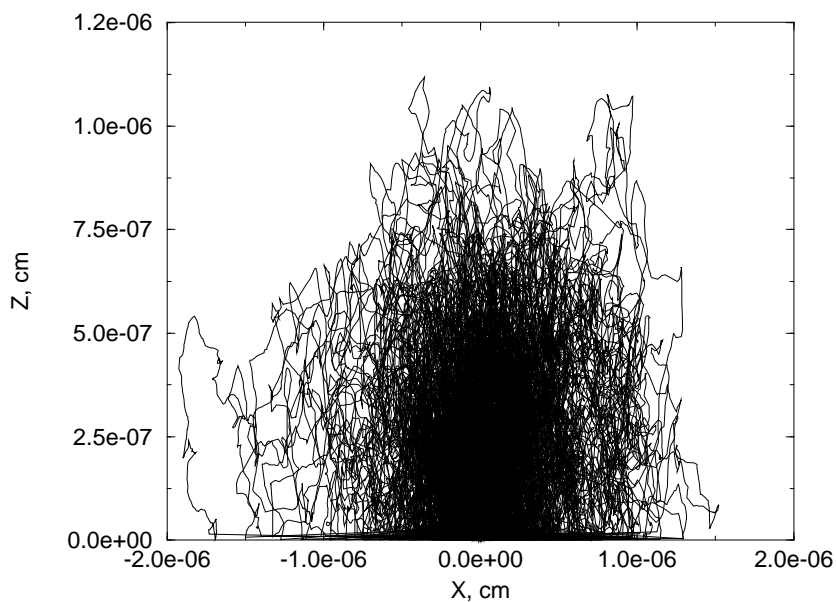


Figura 5.32: Gráfico Z versus X para o Au,  $E = 5.0$  keV e Modelo de Rutherford Blindado.

mesma energia inicial de feixe a região de interação de elétrons retroespalhados com o material é superestimada no primeiro modelo. De fato, isso deveria acontecer pois considerando o efeito de blindagem no segundo modelo, tornamos eventos correspondentes a pequenos ângulos de espalhamento pouco prováveis, ao passo que, no primeiro modelo, eventos correspondentes a ângulos cada vez mais próximos de zero são cada vez mais prováveis. Some-se a isso o fato de que no primeiro modelo interações inelásticas são completamente desprezadas.

# Capítulo 6

## Conclusões

### 6.1 Introdução

Como vimos no decorrer desse trabalho, simulações de Monte Carlo fornecem informações acerca da maneira como feixes de elétrons interagem com um espécime. Além disso, dão uma idéia qualitativa da região de interação desses feixes com o sólido. Por fim, os resultados obtidos com simulações de Monte Carlo variam com o uso de diferentes seções de choque elásticas e inelásticas.

Neste capítulo, introduzimos a equação de Fokker-Planck que acreditamos explicar os resultados obtidos em simulações apresentados nos capítulos precedentes.

### 6.2 Equação de Fokker-Planck multivariada

Para o caso em que há  $r$  variáveis  $X_i$ :

$$\frac{\partial P(X_i, t)}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial}{\partial X_i} A_i(X) P + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial X_i \partial X_j} B_{i,j}(X) P \quad (6.1)$$

Os coeficientes  $A_i$  e  $B_{i,j}$  poderiam ser quaisquer funções diferenciáveis com a restrição que  $B_{i,j}$  fosse uma matriz simétrica devendo ser definida positiva. Mais precisamente, a cada ponto  $X_i$  no espaço  $r$ -dimensional,  $B_{i,j}(X)$  deve ser semi-definida não-negativa:

$$\sum_{i,j=1}^r B_{i,j}(X) X_i X_j \geq 0 \quad (6.2)$$

para qualquer vetor  $X_i$ . A interpretação física dos coeficientes é tal que para  $\Delta t \rightarrow 0$ ,

$$\frac{\langle \Delta X_i \rangle_X}{\Delta t} = A_i(X) , \quad \frac{\langle \Delta X_i \Delta X_j \rangle_X}{\Delta t} = B_{i,j}(X)$$

### 6.3 O Problema

Para o presente caso, em vista dos resultados obtidos, para obtermos a expressão analítica para a evolução temporal da componente  $z$  do vetor unitário na direção de movimento do elétron, resolve-se a equação (6.1) sobre uma superfície esférica de raio unitário. De fato, é razoável estabelecer que  $P = P(z, \theta, t)$ , a princípio, e a cada ponto  $\mathbf{r}(t)$ , com respeito ao “ponto de partida” do elétron, o vetor unitário  $\mathbf{p}$  (que define a direção de movimento instantânea do elétron) difunde sobre uma tal superfície. A partir de (6.1),

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\cos\theta \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{D}{2} \nabla^2 P \quad (6.3)$$

onde o operador  $\nabla^2$  é tomado com respeito às variáveis angulares, e,  $D$  é o coeficiente de difusão. Devemos resolver (6.3) com a condição inicial

$$P^{(\pm)}(z, \theta, 0) = \delta(z \mp \epsilon) \delta(\cos\theta \mp 1) \quad (6.4)$$

e com a condição de fronteira absorvente a  $z = \pm\epsilon$ :

$$P^{(\pm)}(\cos\theta = \pm 1, z = \pm\epsilon, t) = 0 \quad (6.5)$$

De fato, consideramos o fenômeno de espalhamento causado por uma fonte de elétrons posicionada a  $z = \pm\epsilon$  em que todos os elétrons do feixe percorrem, inicialmente, uma certa direção  $z$  (lembre-se que adotamos a direção  $z$  como sendo ortogonal ao plano em que jaz a superfície da amostra) e, a partir daí, descrevem trajetórias bem particulares, especificamente nas regiões  $z > 0$  (para a fonte de elétrons a  $z = \epsilon$ ) ou  $z < 0$  (para a fonte de elétrons a  $z = -\epsilon$ ). Mais tarde, de modo a aplicar a condição de fronteira absorvente a  $z = 0$ , estabelecemos que a densidade de probabilidade que “descreve” a situação de espalhamento na região  $z > 0$  (região do material), na verdade escreve-se:

$$P(z, \theta, t) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [P^{(+)}(z, \theta, t) - P^{(-)}(z, \theta, t)] \quad (6.6)$$

## Referências Bibliográficas

- [1]. R. Browning, T. Eimori, E. P. Traut, B. Chui & R. F. W. Pease *An Elastic cross section model for use with Monte Carlo simulations of low energy electron scattering from high atomic number targets*, J. Vac. Sci. Technol. B. **9**,6(1991).
- [2]. R. Browning, *Universal elastic scattering cross sections for electrons in the range 1-100 KeV*, Appl. Phys. Lett. **58**, 24(1991).
- [3]. Z. Czyzewski, *Calculations of Mott scattering cross section*, J. Appl. Phys., **68**, 7(1990).
- [4]. M. Kotera, K. Murata & K. Nagami, *Monte Carlo simulation of 1-10 KeV electron scattering in a gold target*, J. Appl. Phys., **52**, 2(1981).
- [5]. V. Stary & J. Zemek, *Low energy electron elastic reflection from solid surfaces*, Surface Science **566-568**, (2004).
- [6]. H. -J. Fitting, *Six laws of low-energy electron scattering in solids*, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **136**, (2004).
- [7]. A. Jablonski, F. Salvat, & C. Powell, *Effect of Different Electron Elastic-Scattering Cross Sections on Inelastic Mean Free Paths Obtained from Elastic-Backscattering Experiments*, Microchim. Acta **145**, (2004).
- [8]. C. M. Kwei, C. J. Hung, P. Su & C. J. Tung *Spatial distributions of elastically backscattered electrons from copper and silver*, J. Phys. D: Appl. Phys. **32**, (1999).
- [9]. D. C. Joy & S. Luo, *An Empirical Stopping Power Relationship for Low-Energy Electrons*, Scanning **11**, (1989).
- [10]. R. Browning, T. Z. Li, B. Chui, J. Ye, R. F. W. Pease, Z. Czyzewski & D. C. Joy, *Low-Energy Electron/Atom Elastic Scattering Cross-Sections from 0.1-30 KeV* Scanning, **17**, (1995).
- [11]. D. C. Joy, *Monte Carlo Modeling for Electron Microscopy and Microanalysis*, 1. ed., New York, Oxford, 1995.
- [12]. J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition, Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [13]. J. J. Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics*, 1. ed., Addison-Wesley Publishing Company, 1967.
- [14]. D. C. Joy, A. D. Romig, Jr. & J. I. Goldstein *Principles of analytical electron microscopy*, 1. ed., New York & London, Plenum Press, 1986.
- [15]. Goldstein et. al., *Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis: A text for biologists, materials scientists, and geologists*, 2. ed., New York & London, Plenum Press.
- [16]. Reimer, L., *Scanning electron microscopy: physics of image formation and microanalysis*, Berlin & New York, Springer-Verlag, 1985.