

MÈTODES DE MONTECARLO I ESPECTROSCÒPIES D'ELECTRONS

per

FRANCESC SALVAT I JUAN DE DIOS MARTINEZ

Física Atòmica, Molecular i Nuclear
Facultat de Física. Universitat de Barcelona

RESUM

Després de presentar un model de *scattering* general per a descriure les col·lisions d'electrons d'energia mitjana en medis sòlids, hom descriu breument el mètode de Montecarlo emprat per a simular numèricament les trajectòries dels electrons en el medi. Dels resultats de la simulació poden ésser avaluades diferents quantitats mesurables experimentalment. Hom mostra les possibilitats del mètode de simulació per inferir informació quantitativa referent a l'estructura de la mostra a partir dels resultats proporcionats per diferents espectroscòpies d'electrons.

INTRODUCCIÓ

En els darrers anys hom ha dedicat un interès creixent al problema de l'anàlisi quantitativa en espectroscòpies d'electrons. Són diverses les tècniques de superfície que utilitzen electrons, bé com a radiació excitant [e.g. AES (Auger Electron Spectroscopy), EPM (Electron Probe Microanalysis), SEM (Scanning Electron Microscopy)], bé com a radiació emesa [e.g. AES, SEM, ESCA (Electron Spectroscopy for Chemical Analysis o també XPS = X-ray Photoelectron Spectroscopy), CEMS (Conversion Electron Mössbauer Spectroscopy)]. La característica comuna de totes aquestes tècniques rau en la sensibilitat superficial, conseqüència del curt abast dels electrons. L'excel·lent treball de revisió de Werner i Garten¹ conté una descripció bàsica de les característiques i aplicacions pràctiques d'aquestes tècniques.

Els electrons, en moure's per l'interior del material, experimenten col·lisions elàstiques i inelàstiques; aquestes darreres provoquen excita-

cions en el medi amb la conseqüent pèrdua d'energia de l'electró. Les excitacions del sòlid amb energies de l'ordre de, o superiors als, 100 eV corresponen principalment a ionitzacions de les capes internes dels àtoms individuals. Un àtom amb un forat en una capa interna es desexcita per emissió de raigs X i/o electrons Auger amb energies característiques. Aquestes radiacions emeses poden ésser detectades i discriminades en energia; l'espectre obtingut mostra una sèrie de pics, les energies dels quals permeten de determinar els elements presents en la regió explorada de la mostra. En general, l'anàlisi qualitativa és gairebé trivial a partir de l'espectre.

L'abast de Bethe R_s és definit com el recorregut mitjà d'un electró abans de perdre pràcticament tota la seva energia cinètica, i és funció de l'energia i de la composició i estructura de la mostra. Per energies de l'ordre del keV, R_s és de l'ordre de 10 μm . En alguns casos (EPM, CEMS, ...), l'abast de Bethe fixa una cota superior per al gruix de la capa superficial del sòlid que pot ésser explorada amb aquestes tècniques. En altres casos, però, una única col·lisió inelàstica comporta la pèrdua total de la informació que transporta l'electró (e.g. AES, ESCA). En aquesta última situació, només hi contribueixen en un pic donat els electrons que no han col·lisionat inelàsticament en llur trajectòria entre l'emissió i la superfície; el recorregut lliure mitjà inelàstic λ_{in} determina el gruix de la capa superficial explorada; donat que $\lambda_{in} \ll R_s$, la sensibilitat superficial és òptima per AES i ESCA. Convé remarcar que les tècniques esmentades, bé que són conegudes com a espectroscòpies de superfície, són de fet espectroscòpies de capes superficials de gruixàries més grans que una monocapa atòmica.

Malgrat que, tal com ja hem esmentat, l'anàlisi elemental qualitativa és relativament simple, l'obtenció d'informació quantitativa respecte a l'estructura i composició de la mostra és un problema molt més delicat. Per a cada una de les diferents tècniques experimentals, hom ha proposat mètodes empírics per a l'anàlisi quantitativa que, en general, depenen de paràmetres que cal determinar experimentalment (vegeu per exemple la referència²). La finalitat d'aquests mètodes és obtenir, a partir de l'espectre experimental, informació relativa a: 1) Quina és la regió de la mostra que correspon a l'espectre detectat? 2) Quina és la composició quantitativa d'aquesta regió?

La utilització de feixos d'electrons, fàcilment focalitzables, com a radiació excitant, permet una bona resolució lateral (àrees irradiades de l'ordre del μm). Si la radiació incident no pot ésser focalitzada eficaçment, com és el cas de les radiacions X i gamma emprades en ESCA i CEMS, l'espectre obtingut és la mitjana superficial de la regió irradiada. En qualsevol cas, suposarem que la regió de la mostra de la qual prové el senyal detectat és lateralment homogènia, és a dir, la composició i estructura varien únicament amb la fondària.

És clar que la resolució del problema d'anàlisi quantitativa és impossi-

ble si hom no disposa d'una descripció acurada del procés de transport dels electrons a l'interior de la mostra. Malauradament, però, aquesta descripció requereix resoldre l'equació de transport de Boltzmann amb les seccions eficaces i condicions de contorn corresponents a la composició i estructura de la mostra que vulguem analitzar. Suposant que fos possible de resoldre l'equació de Boltzmann exactament (que no ho és), podríem caracteritzar la mostra per un seguit de paràmetres (e.g. abundància relativa dels diferents elements, gruixos de les diferents fases en cas que hi fos sin, ...) que podrien ésser determinats per aproximacions successives tot imposant que la solució de l'equació de transport condueixi al resultat obtingut experimentalment. En última instància, un cop determinades les seccions eficaces per als diferents processos de col·lisió, el problema queda reduït a resoldre l'equació de Boltzmann. El mètode més eficient de què hom disposa per a la resolució d'aquesta equació (vegeu Berger³) és la simulació numèrica de trajectòries aleatòries o mètode de Montecarlo (MMC).

SECCIONS EFICACES I RECORREGUTS LLIURES

Abans d'entrar en el problema de la resolució de l'equació de transport, cal determinar les seccions eficaces dels diversos processos de col·lisió. Per tal de garantir la validesa dels resultats del MMC ens hem de limitar a considerar materials amorfs o bé policristal·lins, així com energies dels electrons per sobre d'uns 500 eV (cosa que garanteix que el *scattering* és incoherent, de tal manera que no apareixen efectes de *tunneling* alhora que s'eliminen els efectes de difracció resultants del *scattering* simultani per a diversos centres) i per sota d'uns 100 keV (per tal d'evitar efectes de polarització i pèrdues d'energia per radiació.⁴ En aquesta situació, les propietats de *scattering* del medi queden caracteritzades per les seccions eficaces per *scattering* elàstic i inelàstic amb els àtoms del material.

En general, l'avaluació teòrica d'aquestes seccions eficaces resulta molt complicada,⁵ de manera que cal introduir-hi algunes simplificacions. Afortunadament, per a l'interval d'energies que ens interessa, hom disposa de mètodes aproximats que permeten d'obtenir seccions eficaces força acurades. Convé insistir en el fet que les seccions eficaces no poden ésser massa complicades de calcular si hom les vol utilitzar d'una manera sistemàtica en procediments de MC. Les que comentem ací, per bé que són relativament sofisticades comparades amb les utilitzades a la literatura, són encara prou simples com per a ésser incorporades en programes de simulació.

Per tal de no complicar els raonaments, considerarem només materials monoatòmics. La generalització al cas de materials compostos és pràcticament immediata. Suposarem també que els àtoms en el medi es

troben orientats a l'atzar, de manera que totes les seccions eficaces resulten independents de l'angle de *scattering* atzimuthal.

La secció eficaz diferencial per a les col·lisions elàstiques, $d\sigma_{el}/d\theta$, pot ésser determinada a partir de la densitat electrònica obtinguda mitjançant càlculs autoconsistents del tipus Hartree-Fock (sota condicions de contorn que introdueixin els efectes de reducció del volum atòmic degut a la presència dels àtoms veïns). Un cop obtinguda la densitat, és possible de calcular el potencial d'interacció electró-àtom i determinar la secció eficaz diferencial per a cada energia utilitzant el mètode dels desfasaments, o bé l'aproximació de Born si l'energia de l'electró lliure és prou alta.⁶ La secció eficaz total elàstica és donada per

$$\sigma_{el} = \int_0^\pi \frac{d\sigma_{el}}{d\theta} d\theta. \quad (1)$$

La figura 1 mostra la secció eficaz total per a l'argó en funció de l'energia de l'electró. El recorregut lliure mitjà d'un electró en un medi amb el qual només interacciona elàsticament és

$$\lambda_{el} = 1/N\sigma_{el}, \quad (2)$$

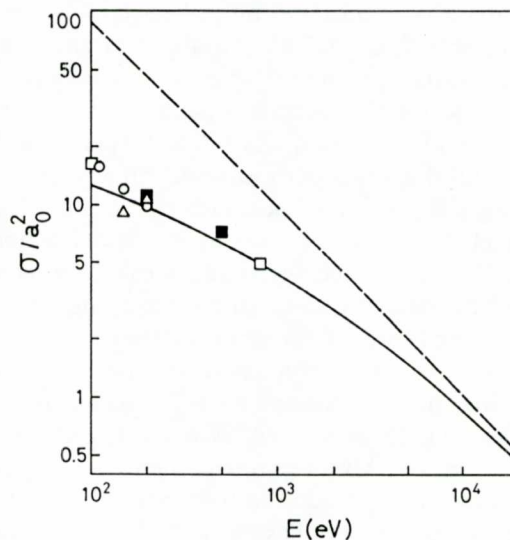


Figura 1. Secció eficaz total per *scattering* elàstic d'electrons per a àtoms d'argó en funció de l'energia dels electrons. La corba trencada és el resultat de l'aproximació de Born, la corba contínua ha estat calculada mitjançant el mètode dels desfasaments. Els resultats experimentals són de diversos autors.

on N és el nombre d'àtoms per unitat de volum, que pot ésser escrit $N_A \rho / A$, essent N_A el nombre d'Avogadro, ρ la densitat del medi i A el pes atòmic. La distribució de recorreguts lliures entre col·lisions elàstiques (en aquest medi hipotètic) és donada per

$$p_{el}(s) = \lambda_{el}^{-1} \exp(-s/\lambda_{el}). \quad (3)$$

Finalment, la distribució angular dels electrons després d'haver xocat elàsticament és proporcional a la secció eficaç diferencial. La probabilitat d'obtenir un angle de *scattering* entre θ i $\theta + d\theta$ després d'una col·lisió elàstica pot ésser expressat així:

$$p_{el}(\theta) = \frac{1}{\sigma_{el}} \frac{d\sigma_{el}}{d\theta} d\theta. \quad (4)$$

Les seccions eficaces diferencials per al cas de les col·lisions inelàstiques, $d\sigma_i/(dW d\theta)$, depenen del tipus d'excitació. En general són funcions de la pèrdua d'energia W i de *scattering* θ . És una bona aproximació de considerar que les possibles excitacions (excepte quan aquestes tenen lloc a la banda de conducció) es redueixen a xocs binaris entre l'electró incident i un electró atòmic en una capa determinada (a la qual fa referència l'índex 'i') que, en sòlids, donen lloc necessàriament a ionització, ja que el principi d'exclusió prohibeix transicions de l'electró fitó a estats per sota del nivell de Fermi. Per a ionitzacions de capes lligades, la secció eficaç pot ésser calculada aproximadament en funció d'únicament l'energia de lligadura dels electrons en aquesta capa.^{7 i 8} Les excitacions de la banda de conducció donen lloc tant a parells electró-forat com a oscil·lacions col·lectives o plasmons; aquestes excitacions són tractades considerant la banda de conducció com un gas d'electrons lliures.

En general, les deflexions angulars en les col·lisions inelàstiques són molt petites, de manera que, amb una bona aproximació, les seccions eficaces podem considerar-les funcions de només la pèrdua d'energia:

$$\frac{d\sigma_i}{dW} = \int \frac{d\sigma_i}{dW d\theta} d\theta \quad (5)$$

La secció eficaç total per excitació des de la capa i -èsima (que pot ésser també la banda de conducció) és donada per

$$\sigma_i = \int \frac{d\sigma_i}{dW} dW. \quad (6)$$

La distribució de pèrdues d'energia W en aquestes col·lisions és proporcional a la secció eficaç diferencial respecte a la pèrdua d'energia.⁵ El corresponent recorregut lliure mitjà és

$$\lambda_{in} = (N \sum_i \sigma_i)^{-1} \quad (7)$$

La figura 2 mostra el recorregut lliure mitjà per a electrons en alumini metàl·lic en funció de l'energia. La distribució de recorreguts lliures entre col·lisions en un medi hipotètic amb el qual només hi ha interaccions inelàstiques és

$$p_{in}(s) = \lambda_{in}^{-1} \exp(-s/\lambda_{in}). \quad (8)$$

La distribució angular dels electrons després d'experimentar una col·lisió inelàstica depèn de la pèrdua d'energia W ; aquesta distribució pot ésser calculada aproximadament a partir de criteris de conservació de l'energia i la quantitat de moviment.

El recorregut lliure mitjà λ d'un electró entre col·lisions, de qualsevol tipus, és donat per

$$\lambda^{-1} = \lambda_{el}^{-1} + \lambda_{in}^{-1} = N (\sigma_{el} + \sum_i \sigma_i) \quad (9)$$

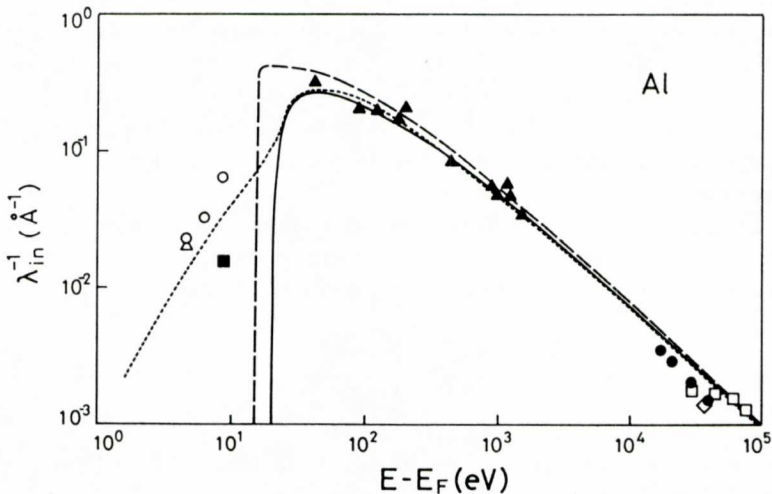


Figura 2. Recorregut lliure mitjà inelàstic per a electrons en alumini metàl·lic en funció de l'energia cinètica d'aquests referida al nivell de Fermi. Els resultats experimentals són de diversos autors. Les corbes són estimacions teòriques: la corba contínua és donada per una expressió analítica simple en termes de les energies dels electrons atòmics (per a més detalls vegeu la ref. 8).

MÈTODE DE MONTECARLO

Per tal d'aclarir una mica la base del mètode, considerem novament materials constituïts per un únic tipus d'àtoms. Tal com ja hem comentat abans, suposem que aquests es troben distribuïts a l'atzar amb una densitat uniforme en el volum de la mostra. La trajectòria d'un electró és idealitzada con una línia trencada, és a dir, com una successió de segments rectilinis (recorreguts lliures) cada un dels quals acaba bruscament en una col·lisió. La longitud de cada recorregut lliure, així com les deflexions angulars i la pèrdua d'energia en la col·lisió que té lloc al final del trajecte, són considerades variables aleatòries que segueixen distribucions de probabilitat fixades per les seccions eficaces adoptades. El MMC consisteix en la simulació numèrica d'un gran nombre de trajectòries aleatòries construïdes a partir d'aquestes distribucions de probabilitat. Ens enfrontem, doncs, a un únic problema: el de la simulació numèrica de processos aleatoris que segueixen distribucions de probabilitat donades. El text de Rubinstein⁹ dona una descripció detallada d'un bon nombre de tècniques de sorteig numèric.

La simulació aleatòria de cada trajectòria comença en la posició de la font d'electrons. La posició i l'energia inicials de l'electró, així com la direcció del primer recorregut lliure, són seleccionades d'acord amb les característiques de la font. Un cop fixades les condicions inicials, determinem els successius segments de la trajectòria mitjançant sorteig numèric de les corresponents variables a partir de les distribucions de probabilitat deduïdes del model de *scattering* utilitzat (per a una descripció detallada del procediment numèric de simulació, vegeu per exemple la referència¹⁰). Immediatament abans de cada col·lisió, cal comprovar que l'electró resti encara dins la mostra; si no és així, acaba la simulació de la trajectòria. L'energia de l'electró és controlada també després de cada col·lisió. La trajectòria acaba en el moment que l'energia es fa més petita que un valor prèviament fixat, cas en el qual suposem que l'electró ha estat absorbit en el medi. D'aquesta manera podem generar, amb l'ajut d'un ordinador, un gran nombre de trajectòries aleatòries. De la mostra estadística així construïda hom pot derivar les mateixes quantitats que poden ésser mesurades en un experiment.

El MMC permet de simular condicions experimentals arbitràries incloent àdhuc efectes del detector, com per exemple la dependència de l'eficiència respecte de l'energia i la direcció dels electrons detectats. Aquesta és la raó per la qual ha estat deixat de banda el problema de la resolució de l'equació de transport (que durant decennis ocupà un bon nombre de físics teòrics i que presenta problemes molt delicats referents a les condicions de contorn). La fiabilitat dels resultats de la simulació depèn només de les seccions eficaces adoptades. Per tal de comprovar que aquestes són prou acurades, cal només comparar els resultats de la simulació amb determinats re-

sultats experimentals obtinguts en condicions ben controlades (principalment en tot allò que fa referència a la geometria de l'experiment i les energies dels electrons) i escollides adequadament. Un cop garantida la qualitat del model de *scattering* adoptat, i fixada la geometria i les característiques del detector emprat en l'experiment, podem utilitzar la simulació MC per tal d'obtenir la mateixa informació que ens proporcionaria un mesurament experimental. El fet que, almenys en teoria, la simulació MC pugui substituir la feina enfarfegadora que comporta qualsevol mètode de calibració, és la causa de la popularitat creixent del MMC. Si hom considera que, cada dia més, els equips experimentals acostumen a estar connectats a un ordinador per al tractament de dades, no és exagerat de considerar un programa de simulació MC com part integrant de l'equip 'experimental'.

Una de les limitacions més importants del MMC rau en el seu caràcter estadístic. Com a conseqüència d'aquest, tots els resultats numèrics són afectats per un error estadístic originat pel nombre finit, diguem-ne N , de trajectòries simulades (també els resultats experimentals són afectats per aquesta mena d'errors). La magnitud de l'error és, per a una mostra suficientment nombrosa, proporcional a $1/\sqrt{N}$. Si tenim en compte que N és, alhora, proporcional al temps de càlcul invertit en la simulació, resulta clar que l'error estadístic no pot ésser reduït indefinidament (si el temps de càlcul es multiplica per cent, l'error es redueix només en un factor 10). Cal doncs tenir present que les limitacions de temps de càlcul són les que, en última instància, determinen la possibilitat d'una simulació.

APLICACIONS

Per tal d'il·lustrar la potencialitat (i posar de manifest les possibles limitacions) de les tècniques de simulació en problemes d'anàlisi quantitativa, mostrarem algunes de llurs aplicacions. No cal dir que les considerades ací no són sinó una petita mostra de les possibles; esperem, però, que siguin suficients per a indicar el tipus de problemes que hom pot abordar amb MCC.

Transmissió i backscattering de feixos d'electrons en làmines primes

Els resultats d'experiments de transmissió i *backscattering* (o retrodispersió) de feixos d'electrons en làmines primes (sense suport) resulten particularment adequats per a confirmar la precisió del model de *scattering* adoptat en la simulació. En aquests experiments hom determina les fraccions d'electrons transmesos i reflectits (*backscattered*) així com llurs distribucions angulars i en energia. A les figs. 3-5 comparem diferents resul-

tats experimentals amb el resultat de la nostra simulació MC. Com ja hem comentat abans, podem esperar un acord semblant en altres geometries.

Aquest tipus de mesuraments ofereix una primera aplicació del MMC per a l'anàlisi quantitativa, en aquest cas la determinació del gruix de la làmina. Aquest pot ésser determinat comparant la fracció d'electrons transmesos o reflectits mesurada amb el resultat de la simulació per a diferents gruixos (vegeu fig. 3). Per tal d'evitar efectes de *tunneling*, és preferible d'utilitzar la fracció reflectida. Una altra raó per a basar el mesurament del gruix en la fracció reflectida és la següent: com que els electrons reflectits són aquells que han sofert col·lisions elàstiques amb angles de *scattering* grans i, per tant, transferències de moment també relativament grans, la descripció basada en el nostre model de col·lisions individuals resulta adient fins i tot per a materials amb bona estructura cristal·lina. Podem observar que la magnitud de l'error en el gruix determinat d'aquesta manera creix a mesura que creix el gruix.

El mesurament de gruixos de làmines primes sobre suports pot ésser fet també mitjançant mesures de *backscattering* de feixos d'electrons monoenergètics. Si els nombres atòmics –la mitjana– de la làmina i el suport són Z_F i Z_S , la fracció reflectida és únicament funció del gruix de la làmina superficial (figura 6). En aquest cas, el mesurament no és possible si $Z_F \approx Z_S$ o si el gruix de la làmina és comparable a l'abast dels electrons.

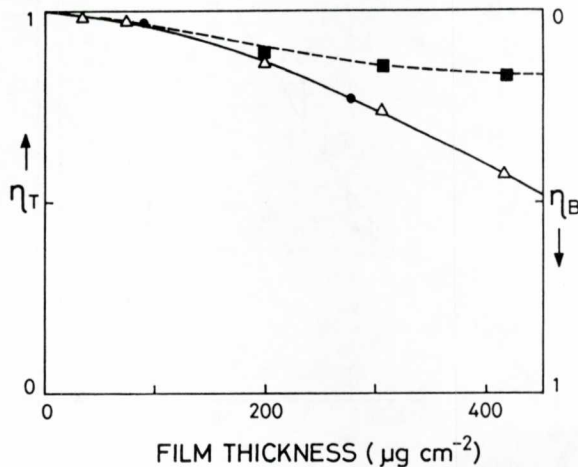


Figura 3. Fraccions transmesa n_T i reflectida n_B per a electrons d'un feix paral·lel de 20 keV incident normalment sobre una làmina d'alumini en funció del gruix d'aquesta. Els símbols corresponen a mesuraments experimentals de diversos autors.

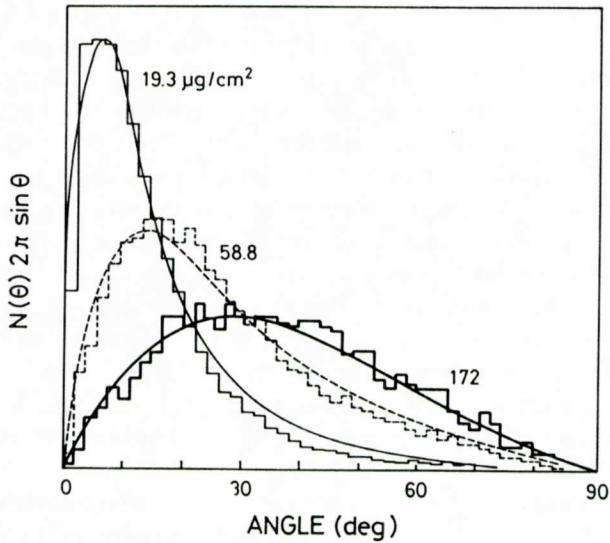


Figura 4. Distribució angular dels electrons d'un feix paral·lel de 20 keV (incidència normal) transmesos a través de làmines d'alumini de diferents gruixos. Les corbes són resultats experimentals, els histogrames mostren els resultats de la simulació MC.

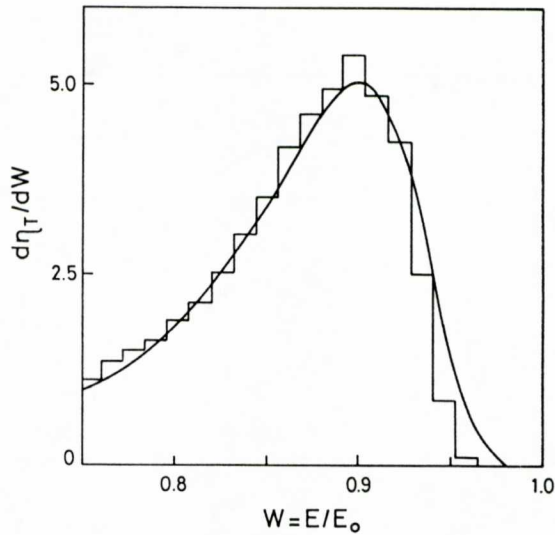


Figura 5. Distribució energètica dels electrons d'un feix paral·lel de 20 keV (incidència normal) transmesos a través d'una làmina d'alumini de 20 μg/cm². La corba és el resultat experimental, l'histograma mostra el resultat del càlcul de MC.

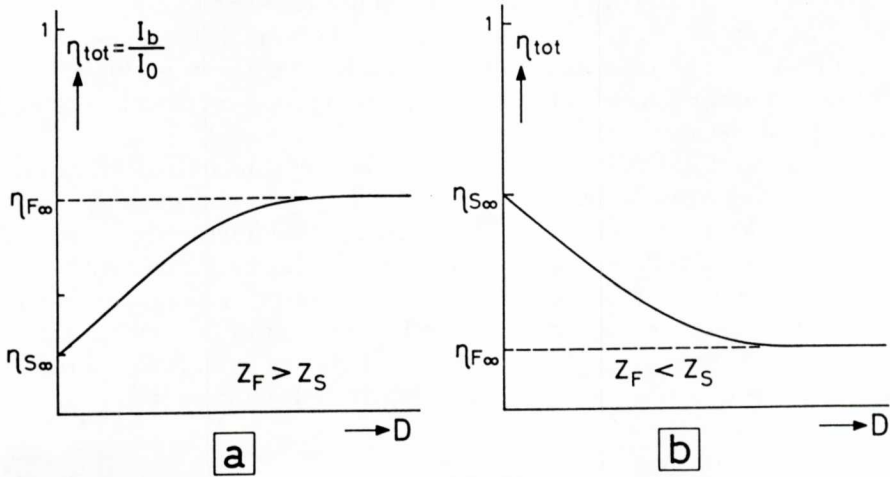


Figura 6. Fracció reflectida n per una mostra constituïda per una làmina fina de nombre atòmic Z_F sobre un substrat (de gruix molt més gran que l'abast màxim dels electrons) de nombre atòmic Z_S , en funció del gruix D de la làmina. Si els nombres atòmics són prou diferents (com en els casos considerats a la figura) un mesurament de n permet de determinar el gruix de la làmina.

Espectroscòpies Auger i ESCA

Tal com hem comentat a la introducció, en espectroscòpia Auger els electrons perden la informació característica per efecte d'una única col·lisió inelàstica. Aquest fet simplifica notablement el problema d'anàlisi quantitativa, ja que el senyal Auger degut als àtoms situats a una determinada fondària x resulta que és simplement proporcional al producte de la intensitat del feix d'electrons incident, la corresponent secció eficaç per excitació de la capa interna i $\exp(-x \cdot \sec\theta / \lambda_{in})$ on λ_{in} és el recorregut mitjà total inelàstic pels electrons emesos i θ és l'angle de sortida dels electrons detectats respecte a la normal a la superfície de la mostra. L'anàlisi quantitativa elemental respecte a mostres homogènies pot ésser realitzada emprant una fórmula semiempírica que conté com a paràmetres les diferents seccions eficaces, els rendiments de fluorescència i un factor empíric R anomenat factor de *backscattering*. Aquest factor dóna compte de l'augment del senyal degut a electrons incidents que penetren a l'interior de la mostra, pateixen *backscattering*, tornen cap a la superfície i produeixen excitació de capes internes a prop d'aquesta amb la conseqüent emissió d'electrons Auger.

El factor R , que resulta essencial per a l'anàlisi quantitativa, pot ésser calculat mitjançant MMC. Si el factor de *backscattering* calculat l'escriuim $R = 1 + r$, r pren valors de l'ordre d'algunes dècimes per a materials de

nombre atòmic petit i de l'ordre de la unitat per a materials de nombre atòmic gran, i decreix en augmentar l'energia de lligadura de la capa on té lloc la ionització. Si hom considera que, en cas de no haver-hi *backscattering* és $r = 0$, resulta evident la utilitat de la simulació fins i tot per a una espectroscòpia d'alta sensibilitat superficial.

En el cas d'ESCA, no es presenten problemes similars al del factor de *backscattering* en AES. Tant en AES com en ESCA, el senyal conté contribucions d'electrons que, inicialment emesos cap a l'interior de la mostra, abandonen aquesta després de patir una col·lisió elàstica. Aquest efecte pot ésser inclòs a les fórmules semiempíriques d'anàlisi quantitativa si hom el simula prèviament. La dificultat característica en ESCA és l'anisotropia en l'emissió dels fotoelectrons, que són emesos des de l'àtom fitó en direcció preferentment paral·lela a la del camp elèctric de la radiació incident.

EPM (Electron Probe Microanalysis)

Aquesta tècnica utilitza la radiació X emesa pels àtoms de la mostra excitats mitjançant un feix d'electrons focalitzat sobre la superfície. Com que els raigs X pràcticament no s'atenuen en el curt trajecte entre la regió excitada pels electrons i la superfície, el senyal detectat correspon a la regió de la mostra on els electrons perden llur energia, i per tant on es provoquen excitacions. La intensitat del senyal procedent d'una determinada posició dins la mostra és, en una primera aproximació, proporcional a la funció dosi que definim com l'energia absorbida del feix d'electrons per unitat de volum (eV/cm^3) en la posició donada. La funció dosi pot ésser calculada fàcilment mitjançant simulació MC (fig. 7).

Espectroscòpia CEMS

Aquesta tècnica és una combinació d'espectroscòpia Mössbauer i espectroscòpia beta. L'espectre experimental és obtingut detectant els electrons emesos en les desexcitacions ressonants dels nuclis absorbents mitjançant conversió interna. Aquests nuclis són excitats mitjançant radiació ressonant procedent de la font Mössbauer. Els electrons de conversió interna són emesos isotropament pels àtoms del isòtop Mössbauer en la mostra, de manera que la situació és paral·lela a la que hom té en AES si els electrons es discriminen en energia. Si són detectats essencialment tots els electrons que abandonen la superfície de la mostra (mètode integral o ICEMS), l'espectre Mössbauer obtingut és una superposició dels espectres característics de cada una de les fases que constitueixen la mostra. Per a mostres multilaminars, els diferents espectres parcials contribueixen amb pesos que depe-

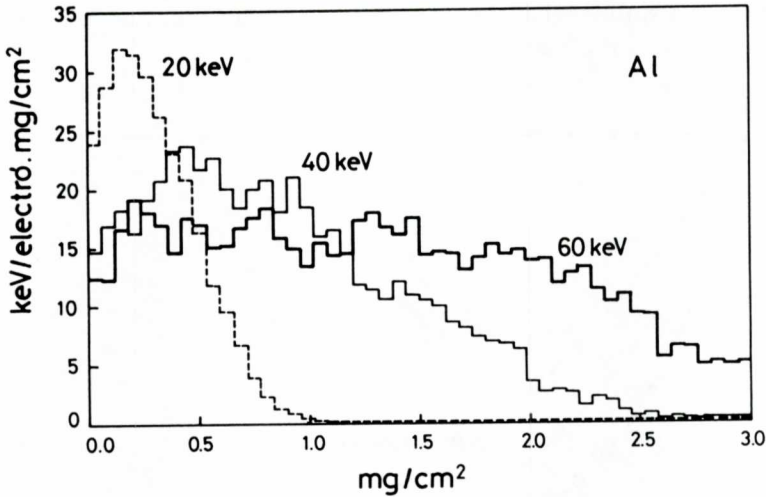


Figura 7. Funcions dosi-fondària (energia perduda per electró i per unitat de gruix) per a electrons de diferents energies en alumini (incidència normal) calculades per simulació MC. El senyal EPM (aproximadament proporcional a la dosi) s'origina a fondàries progressivament més grans a mesura que l'energia dels electrons augmenta.

nen del gruix i la fondària de la fase corresponent. Aquests pesos poden ésser determinats tot basant-nos en simulacions MC, cosa que fa possible l'anàlisi quantitativa. La figura 8 representa els percentatges d'àrea mesurats i calculats per a mostres d'estructura coneguda preparades amb el propòsit de comprovar la precisió del mètode d'anàlisi quantitativa.

COMENTARIS FINALS

Les tècniques de simulació de processos de transport per MMC permeten d'obtenir informació quantitativa referent a l'estructura de la mostra a partir de les dades fornides per diverses espectroscopies d'electrons. Cal tenir present que:

i) Per a materials cristal·lins, l'aplicabilitat d'aquestes tècniques és limitada, per la imatge de trajectòries emprada en el MMC, a energies per sobre d'un cert límit inferior (per dessota del qual la hipòtesis de *scattering* incoherent no es verifica) que podem situar al voltant dels 500 eV.

ii) Els resultats del MMC *sempre* porten associat un cert error estadístic, la magnitud del qual (difícilment reduïble per sota de un cert nivell) pot impossibilitar l'ús d'aquestes tècniques.

iii) Hi ha una certa indeterminació resultant del model de *scattering* utilitzat (principalment pel que fa a seccions eficaces inelàstiques). En par-

ticular, per a simular distribucions d'energia d'alta resolució, cal utilitzar seccions eficaces molt acurades.

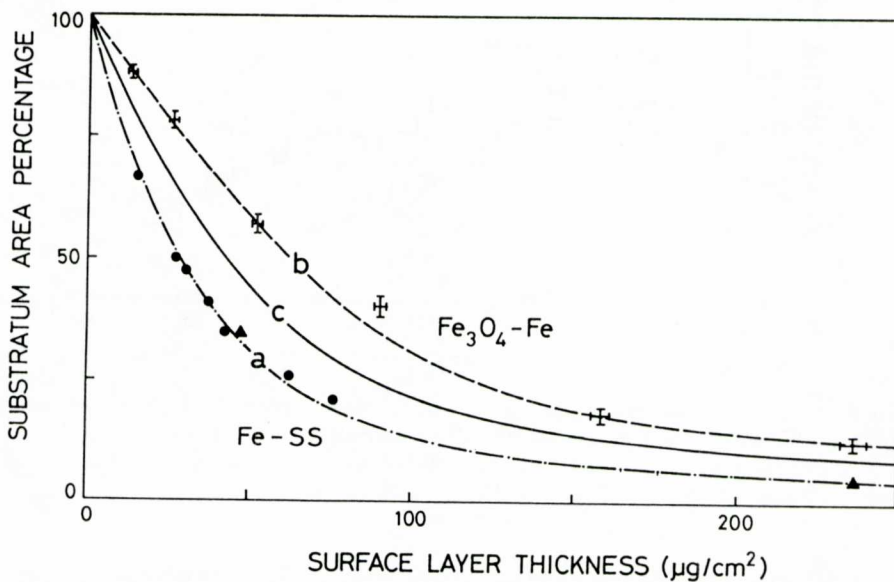


Figura 8. Percentatge de senyal ICEMS originat en el substrat de mostres constituïdes per una làmina fina dipositada sobre un substrat. Les corbes representen resultats teòrics; els símbols, resultats experimentals de diversos autors. La corba superior correspon a magnetita sobre ferro, i la inferior a ferro sobre acer inoxidable.

REFERÈNCIES

1. H. W. WERNER and R. P. H. GARTEN, Rep. Progr. Phys. 47 (1984) 221.
2. "Quantitative Surface Analysis of Materials". Ed. per J. B. Wheeler, H. M. Hoersch, E. J. McGlinchey i S. G. Pulver, American Society for Testing and Materials, 1978.
3. M. J. BERGER, Methods in Computational Physics, 1 (1963) 135.
4. R. D. BIRKHOFF, Encyclopedia of Physics. Ed. per S. Flügge. Springer-Verlag, 34, 1953.
5. B. H. BRANSDEN, "Atomic Collision Theory." 2nd ed. Lecture notes and Supplements in Physics. Ed. per D. Pines. Benjamin/Cummings Publishing Co. U.S.A.
6. F. SALVAT, R. MAYOL, E. MOLINS i J. PARELLADA, J. Phys. D: Appl. Phys. 18 (1985) 1401.
7. D. LILJEQUIST, J. Appl. Phys. 57 (1985) 657.
8. F. SALVAT, J. D. MARTÍNEZ, R. MAYOL i J. PARELLADA, J. Phys. D: Appl. Phys. 18 (1985) 299.
9. R. Y. RUBINSTEIN, "Simulation and the Monte Carlo Method." Ed. John Wiley & Sons, Inc., Nova York, 1981.
10. F. SALVAT, J. D. MARTÍNEZ, R. MAYOL i J. PARELLADA, Comp. Phys. Com. 41 (1986).