CALCULO POR MONTE CARLO DE LA DENSIDAD DE ENERGIA DEPOSITADA EN UN MATERIAL POR UN HAZ DE ELECTRONES DE DECENAS DE keV

J.I.Etcheverry[1], O.E.Martínez[2]

[1]Dto. Matemáticas, FCEN, UBA - Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428, Buenos Aires, Argentina.

[2]Dto. Física, FCEN, UBA -- Pabellón I, Ciudad Universitaria, 1428, Buenos Aires, Argentina.

Resumen

En este trabajo se modela la interacción de un haz de electrones de energías del orden de las decenas de keV con un material isótropo homogéneo, compuesto por átomos de varios elementos diferentes. Se utiliza un método de Monte Carlo para calcular tanto el coeficiente de retrodispersión como la densidad de energía depositada por el haz en función de la distancia a la superficie del material. Se presentan expresiones que permiten ajustar los datos obtenidos, con mayor exactitud que las fórmulas usuales en la literatura.

Abstract

Monte Carlo simulation was used to calculate the backscattering coefficient and the energy deposition profiles for electrons of tens of keV impinging on an isotropic homogeneous material. The material is taken as composed by atoms of different elements. Expressions fitting the obtained energy dissipation curves and backscattering coefficients are presented, showing better adjustement than usual literature expressions.

Introducción

Los haces de electrones se utilizan desde hace ya mucho tiempo en numerosos procesos de gran importancia práctica. Por ejemplo, en tratamiento superficial de materiales, fabricación de fases metaestables, etc. Además, las técnicas de litografía electrónica constituyen una herramienta esencial en la fabricación de microcomponentes electrónicos, circuitos integrados, etc.

Para modelar adecuadamente muchas de estas aplicaciones, es esencial poder describir con precisión la forma en que el haz de electrones deposita su energía en el material. Esto involucra el conocimiento del porcentaje de energía retrodispersada y la distribución espacial de la energía depositada dentro del material. Los trabajos teóricos que describen electrones de decenas de keV (ver Murata et al. [1], Kotera et al. [2], Valkealahti et al. [3]) están habitualmente basados en técnicas de Monte Carlo. Por otro lado, estudios experimentales, [4], [5], [6], dan expresiones aproximadas de la densidad de energía depositada en función de la profundidad para algunos materiales y ciertos rangos de energía. Sin embargo, estos resultados son de difícil extrapolación a otras energías y/o materiales. Además, tienen la desventaja de no dar información tridimensional.

En este trabajo se calcularán la reflectividad y los perfiles de energía depositada en función de la posición para varios materiales, mediante un método de Monte Carlo basado esencialmente en los trabajos de Murata et al. [1] y Kotera et al. [2]. El material se supone homogéneo pero puede estar compuesto por varias sustancias diferentes (por ejemplo, una mezcla de gases, o líquidos, o una aleación de composición homogénea).

Método de Monte Carlo

El mecanismo principal de pérdida de energía de un electrón de energía menor que las decenas de keV es la interacción coulombiana con los demás electrones. Las interacciones con los núcleos son prácticamente elásticas debido a la gran diferencia de masa, pero alteran significativamente la forma de la trayectoria, y deben por lo tanto ser tenidas en cuenta.

El método de Monte Carlo utilizado [1] permite simular este proceso haciendo recorrer al electrón un segmento de recta de longitud del orden del camino libre medio Λ de un electrón en el material, y luego dispersándolo por una colisión elástica con un núcleo, modelada como una dispersión de Rutherford apantallada. En cada segmento rectilíneo, se supuso una pérdida continua de energía dada por las fórmulas de Bethe usuales ([7], [8]) para el poder frenador. La trayectoria se continuó hasta que la energía del electrón fuera inferior a un valor mínimo (500 eV).

Consideramos un material homogéneo, compuesto por fracciones en peso w_i de diferentes elementos. La cantidad de átomos de la especie i por unidad de volumen de material es entonces $n_i = \dfrac{\rho N_A w_i}{A_i}$ donde ρ es la densidad del compuesto, N_A es el número de Avogadro, y A_i el peso atómico de la especie i. Las fracciones atómicas están dadas entonces por $\omega_i = \frac{n_i}{\sum_i n_i}$. Notaremos con N a la cantidad total de átomos por unidad de volumen, $N = \sum_i n_i$. El camino libre medio en el material se calcula según $\Lambda = \frac{1}{N\Sigma_T} = \frac{1}{N\sum_i \omega_i \Sigma_i}$, donde Σ_T es la sección eficaz total y Σ_i la sección eficaz total del componente i-ésimo. La longitud l del segmento rectilíneo entre dos colisiones elásticas se calculó según la fórmula $l = -\Lambda \log(R)$, donde R es un número elegido aleatoriamente con distribución uniforme en el intervalo (0,1). Una vez recorrido el segmento rectilíneo, el electrón se dispersa elásticamente contra un núcleo del componente i, elegido al azar con una probabilidad proporcional a la fracción atómica del elemento i. La probabilidad de resultar dispersado en el ángulo sólido $d\Omega$= sen θ dθ dφ está dada por $P(\theta)d\Omega = \left(\frac{1}{\Sigma_i}\frac{d\sigma_i(\theta)}{d\Omega}\right)d\Omega$, donde $d\sigma_i/d\Omega$ es la sección eficaz diferencial de dispersión para el componente i. La sección eficaz diferencial para cada elemento se calcula con una fórmula de dispersión de Rutherford apantallada:

$$\frac{d\sigma_i(\theta)}{d\Omega} = \frac{Z(Z+1)e^4}{p^2 v^2}\frac{1}{(1-\cos(\theta)+2\beta_i)^2}$$

Aquí p es el impulso del electrón, e su carga, v su velocidad, y la constante de apantallamiento β_i se calcula usando un modelo de Thomas-Fermi (a_0 es el radio de Bohr) (ver Murata et al. [1]):

$$\beta_i = \frac{1}{4}\left(1.12\frac{\hbar\lambda_0}{p}\right)^2 \qquad\qquad \lambda_0 = Z_i^{\frac{1}{3}}/0.885a_0$$

La sección eficaz total para el componente i, Σ_i , se obtiene integrando la sección diferencial σ_i en el ángulo sólido, $\Sigma_i = \frac{2\beta_i(1+\beta_i)p^2v^2}{2\pi Z_i(Z_i+1)e^4}$. Denotando con F($\theta$) a la función de probabilidad acumulada de P(θ), la desviación de un electrón se calcula sustituyendo F(θ) por un número aleatorio generado uniformemente en [0,1] en la expresión: $\cos(\theta) = 1 - \frac{2\beta_i F(\theta)}{1+\beta_i - F(\theta)}$.

El poder frenador de una mezcla debido a excitación o ionización se expresa (fórmula de Bethe):

$$\frac{dE}{ds} = \frac{4\pi e^4}{mv^2} \sum_i n_i Z_i \ln\left(1.166 \frac{E}{I_i}\right) \tag{I}$$

donde E es la energía del electrón, ds un diferencial de camino recorrido, m la masa en reposo del electrón, v la velocidad del electrón, y n_i es la cantidad de átomos del elemento i (de peso atómico Z_i) por unidad de volumen. Se denota con I_i al potencial de excitación medio del elemento i que puede ser aproximado para Z>12 por la expresión empírica (I en eV) (ver [8]):

$$I=(9.76+58.8\ Z^{-1.19})\ Z \tag{II}$$

Los resultados obtenidos con este método de Monte Carlo fueron verificados comparando los valores obtenidos para el rango con los proporcionados por fórmulas semi-empíricas [8], para varios materiales a varias energías, así como comparando los coeficientes de retrodispersión con resultados experimentales para varios materiales. Se obtuvo en todos los casos una concordancia muy satisfactoria para energías en el rango de interés 10 keV-100 keV.

Coeficientes de Reflectividad y Retrodispersión

Realizando estadística sobre un gran número de trayectorias para varios materiales y varias energías, se obtiene información sobre la cantidad y la energía de los electrones retrodispersados (coeficiente de retrodispersión y reflectividad respectivamente). Ambos dependen en forma aproximadamente lineal de la energía, y crecen con Z. En conjunto, la forma cuadrática (E en keV)

$$a_0 + a_1 Z + a_2 E + a_{20} Z^2 + a_{11} Z E + a_{02} E^2 \tag{III}$$

con los coeficientes resumidos en la Tabla **1** ajusta dentro de un 0.5 % a los datos obtenidos realizando estadística sobre 20000 electrones para Al, Fe, Cu, Ag, Au.

	a0	a1	a2	a20	a11	a02
Reflectividad ($\mathfrak{R}$)	-3.259	0.8744	0.02633	-0.00451	0.000188	0.000097
Coef. Retrodispersión	-1.267	1.155	0.04829	-0.006723	-0.0000866	0.0001151

Tabla 1: Coeficientes del ajuste de la reflectividad y el coeficiente de retrodispersión. 20000e-.

Densidad de energía depositada en el material

La densidad de energía depositada en el material se calcula dividiendo el espacio en celdas de tamaño pequeño respecto del rango de los electrones en el material y acumulando en cada celda la energía perdida por los electrones al atravesarla. Integrando sobre planos paralelos a la superficie, se obtiene la energía total depositada en función de la profundidad.

Las Figuras 1 y 2 muestran los resultados obtenidos variando el material y la energía, respectivamente. En ambos casos las curvas se presentan normalizadas a área unitaria, y en función de z/R, la profundidad normalizada con el rango de los electrones en el material. Una de las dos alternativas más utilizadas en la literatura para ajustar una función f(z/R) a la densidad normalizada de energía depositada, consiste en ajustar un polinomio de grado 3 (Everhart et al. [5]) a la curva obtenida experimentalmente, similar a las mostradas en las Figuras 1, 2. La otra alternativa consiste en ajustar a dichas

curvas una gaussiana desplazada hacia el interior del material [3]. Esta alternativa, si bien provista de cierta base física [9], es poco adecuada (claramente las curvas son asimétricas respecto del máximo). Por su mucho mejor ajuste, se eligió para representar las curvas obtenidas:

$$f(z/R) = (a\sqrt{z/R} + b)\exp(-c(z/R)^2) \qquad \text{(IV)}$$

La Figura 3 muestra los resultados obtenidos para electrones de 50keV incidiendo sobre una muestra de hierro, juntamente con la curva universal de Everhart y Hoff, y el mejor ajuste con la expresión (IV). La **Tabla 2** muestra los valores obtenidos ajustando los parámetros de la expresión (IV) a las curvas de densidad de energía depositada en hierro.

Energía	10 keV	30 keV	50 keV	70 keV	90 keV
a	5.145	3.936	3.609	3.415	3.281
b	0.588	0.577	0.596	0.622	0.656
c	6.124	4.566	4.204	4.028	3.953

Tabla 2: Valores de los parámetros para la densidad de energía depositada en función de z/R. Material: Fe.

Obsérvese que a energías mayores que 30 keV los parámetros son muy similares (cf. Figura 2).

Para la mayoría de las aplicaciones, es de esencial importancia la evaluación de la densidad de energía depositada por unidad de tiempo en el material por un haz de intensidad I_0. Esta se calcula según la expresión:

$$\Phi(z)=(1-\Re)\ I_0\ 1/R\ \ f(z/R)$$

donde $\Re$ es la reflectividad para un haz de electrones de energía E, R el rango, y z la profundidad.

Conclusiones

Se demuestra que el algoritmo de Monte Carlo utilizado permite calcular los perfiles de energía depositada y la reflectividad de un material homogéneo compuesto, datos esenciales para el modelado de numerosas situaciones de procesamiento de materiales con haces de electrones, a partir de expresiones generales, no siendo necesario usar valores específicos para cada sustancia particular.

La expresión empleada para ajustar las curvas de densidad de energía depositada en función de la profundidad fue elegida por su simplicidad, y por ajustar en forma mucho más adecuada los datos que el perfil gaussiano utilizado habitualmente.

Agradecimientos

Este trabajo fue realizado con el aporte de subsidios de la Universidad de Buenos Aires.

Referencias

1. K.Murata, T.Matsukawa, R.Shimizu. Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 10, No. 6, 1971.

2. M.Kotera, K. Murata, K. Nagami. J. Appl. Phys. 52 (2), 1981.

3. S. Valkealahti, J. Schou, R. M. Nieminen. J. Appl. Phys. 65 (6), 1989.

4. A.E.Grün. Z.Naturforsh. 12A, 89, 1957.

5. T.E.Everhart, P.H.Hoff. J. Appl.Phys. 42 (13), 1971.

6. T. Matsukawa, R. Shimizu, K.Harada, T. Kato. J.Appl.Phys. 45 (2), 1974.

7. Evans, R.D. The Atomic Nucleus. McGrawHill, New-York, 1972.

8. Tsoulfanidis. Measurement and Detection of Radiation, Mc GrawHill, NY, 1983.

9. H.A.Bethe, M.E.Rose, L.P.Smith. Proc. Am. Phil. Soc. 78, 573, 1938.

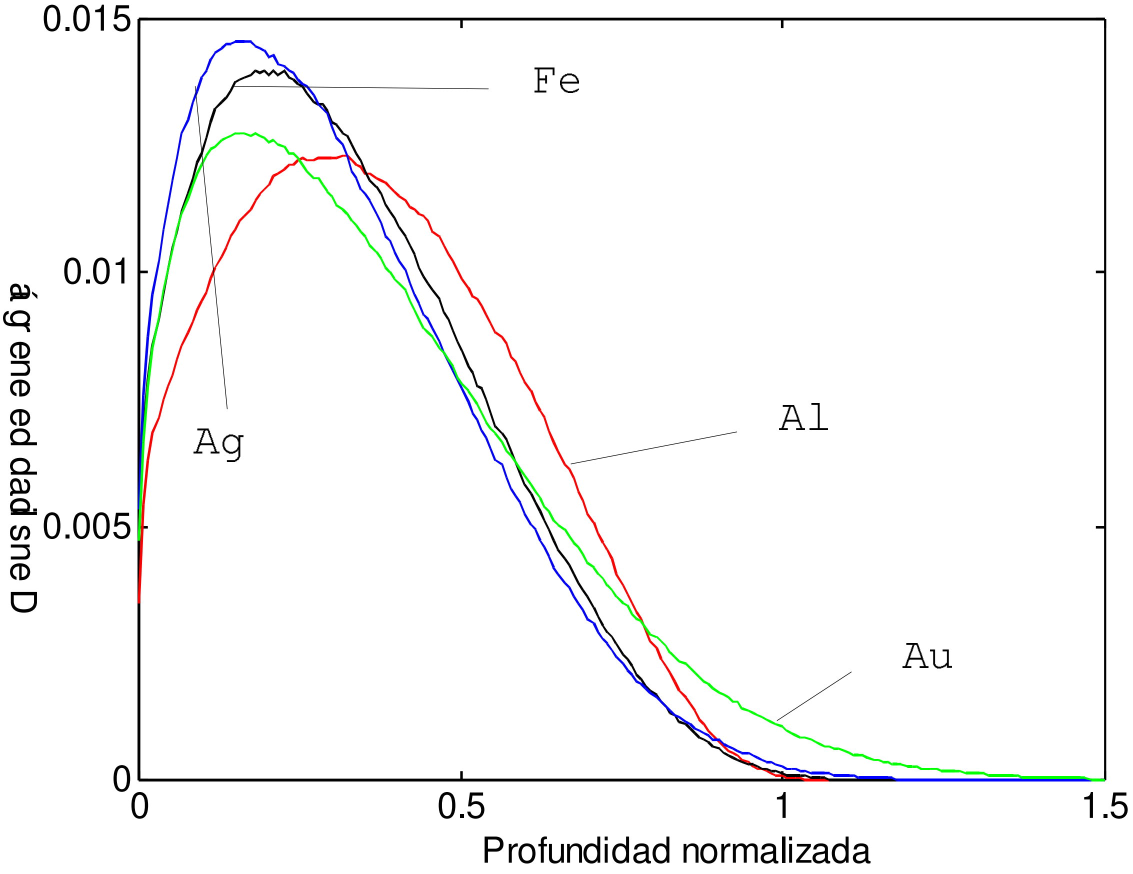

Figura 1: Densidad de energía depositada normalizada a área unitaria en función de la profundidad normalizada al rango, para varios materiales. Energía del haz: 50 keV. N° de e-: 20000.

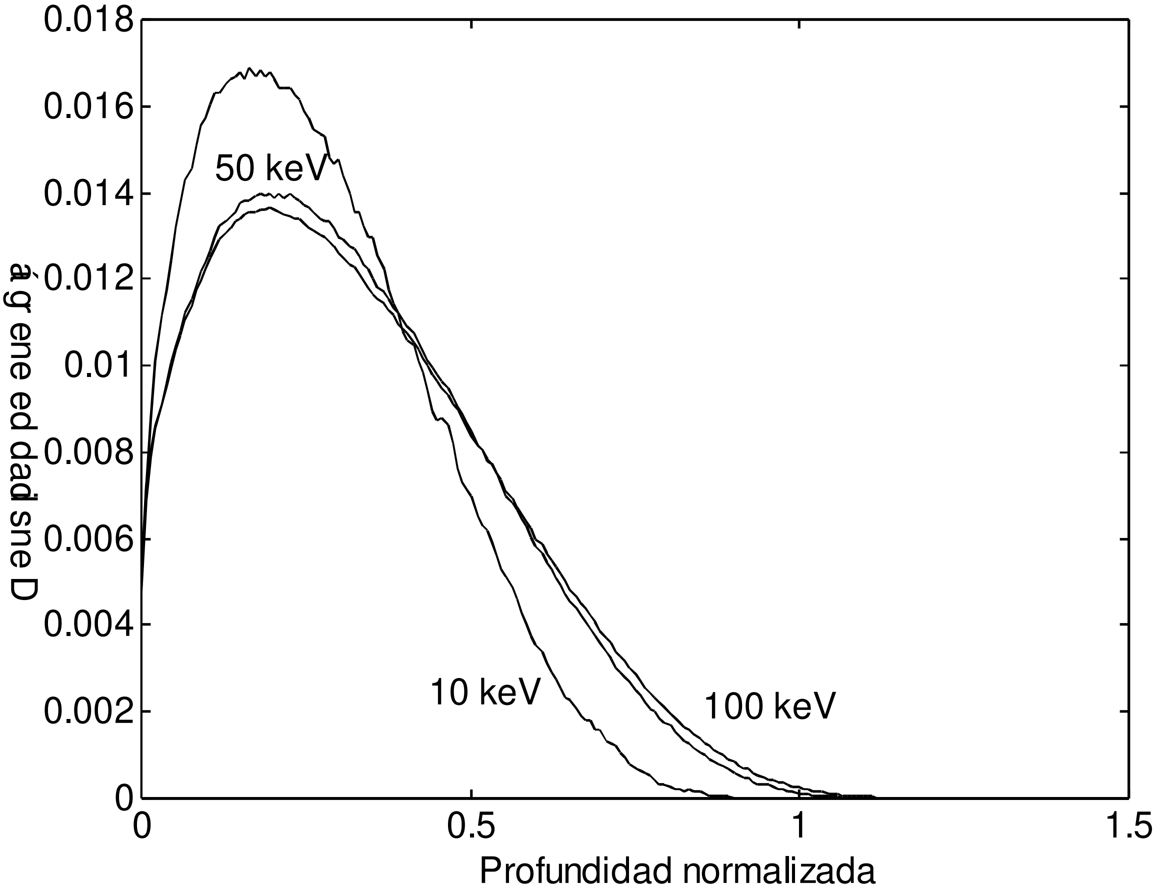

Figura 2: Densidad de energía depositada normalizada a área unitaria en función de la profundidad normalizada al rango. Material: Fe. Energías: 10 keV, 50 keV, 100 keV. N° de e-: 20000.

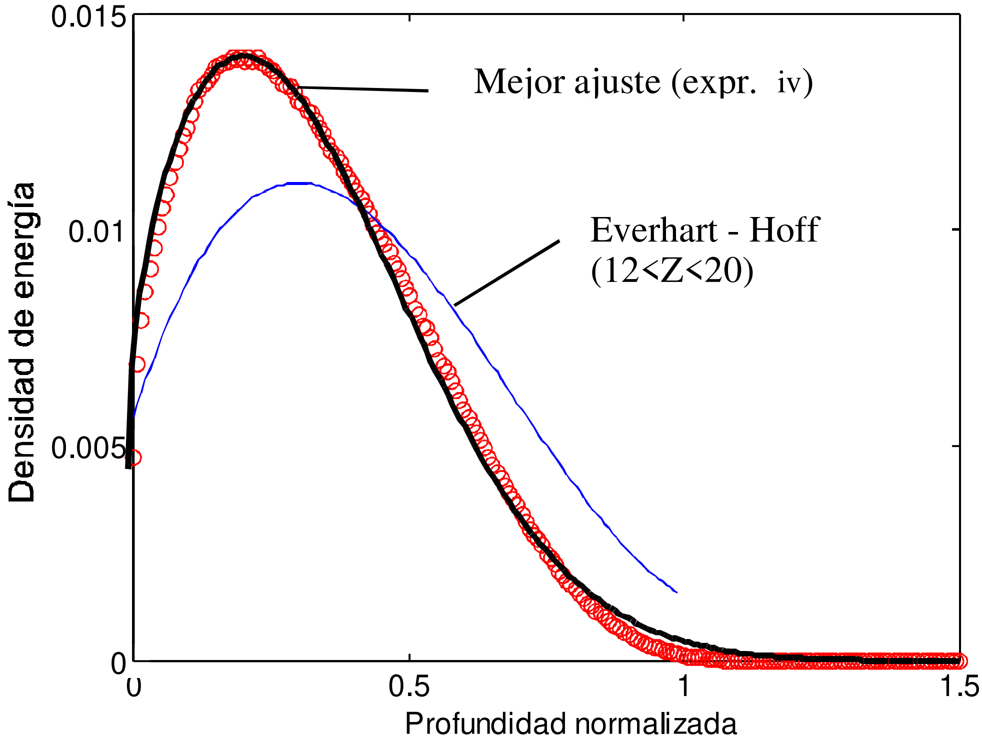

Figura 3: Densidad de energía depositada normalizada a área unitaria en función de la profundidad normalizada al rango. Material: Fe. Energía del haz: 50 keV. N° de e-: 20000.

Título en inglés:

MONTE CARLO CALCULATION OF THE keV ELECTRON ENERGY DISSIPATION CURVES IN COMPOUND MATERIALS

Leyenda de las Figuras:

Figura 1: Densidad de energía depositada normalizada a la energía total ingresada al material en función de la profundidad normalizada al rango, para varios materiales. Energía del haz: 50 keV. N° de e-: 20000.

Figura 2: Densidad de energía depositada normalizada a la energía total ingresada al material en función de la profundidad normalizada al rango. Material: Fe. Energías utilizadas: 10 keV, 50 keV, 100 keV. N° de e-: 20000.

Figura 3: Densidad de energía depositada normalizada a la energía total ingresada al material en función de la profundidad normalizada al rango. Material: Fe. Energía del haz: 50 keV. N° de e-: 20000.