

Cómo las radiaciones alteran los objetos

J. Rickards

Instituto de Física, UNAM

Received 15 November 2017; accepted 11 January 2018

Se presenta una enumeración de tópicos sobre los que se desarrolla un curso de posgrado sobre interacción de radiación con materia. Abarca los fenómenos físicos mediante los cuales las radiaciones producen modificaciones estructurales en los materiales, y algunos métodos que se emplean para estudiarlos. Comenzando con los primeros eventos binarios, se describe la secuencia de sucesos típicos de paso de radiaciones por materia con énfasis en los desplazamientos atómicos y su evolución en cascadas. Se esbozan procesos en que intervienen gran número de eventos en los que se usan métodos estadísticos como cálculos de tipo Monte Carlo y dinámica molecular. Estos desembocan en la descripción de efectos macroscópicos, conduciendo finalmente a teorías de funciones continuas.

Descriptores: Radiación; daños; estructura.

An outline of topics that constitute a graduate course on interaction of radiation with matter is presented. The list covers the physical events that produce structural changes in materials, and some of the techniques used to study them. Starting with the initial binary event, a sequence of typical processes that take place as radiation passes through matter is described, with emphasis on atomic displacements and the evolution of cascades. Procedures that involve large numbers of events and use statistical methods, like Monte Carlo and molecular dynamics, are sketched, leading to the description of macroscopic effects, and eventually continuum theories.

Keywords: Radiation; damage; structure.

PACS: 61.80.Jh

1. Introducción

Hoy en día las radiaciones se conocen y se usan ampliamente. Mencíónense como ejemplos la radioterapia, la exploración geofísica, la generación de energía o la manufactura de microcircuitos. La aplicación de las radiaciones implica la transferencia de energía de un objeto a otro. El que recibe la energía (llamémosle el blanco) sufre múltiples efectos, a veces con propósito, a veces no esperados, pero siempre induciendo cambios que pueden ser de interés y deben entenderse. Como ejemplo, en la Fig. 1 se muestra la simulación de la inyección de 10 iones de Au de energía 1 MeV a un blanco de Ti. Por más de cien años se ha acumulado una gran riqueza de conocimientos sobre los efectos de las radiaciones en los materiales (1–6), y sin embargo continúa la exploración y la búsqueda de avance en las aplicaciones.

Sobresalen dos áreas de práctica extensa en que son relevantes los efectos de las radiaciones en los materiales. Una de ellas es la implantación de iones (7), que se usa en la fabricación de circuitos integrados, en la búsqueda de miniaturización. No es extraño que producir un microcircuito requiera hasta treinta pasos de iones implantados, afectando su conductividad eléctrica en una plantilla complicada de silicio; las empresas fabricantes de “chips” usan cientos de implantadores de iones. Por las dimensiones involucradas, los iones se implantan con energías típicas de keV.

La otra área afectada por daños por radiación es la industria nuclear (8). El calor producido en un reactor nuclear proviene de las colisiones de los productos de la fisión con el medio circundante. Los productos de la fisión, que son átomos con gran energía cinética (decenas de MeV), transfieren su energía al medio por colisiones, dando lugar a un aumento de temperatura, el cual se aprovecha para generar electrici-

dad.

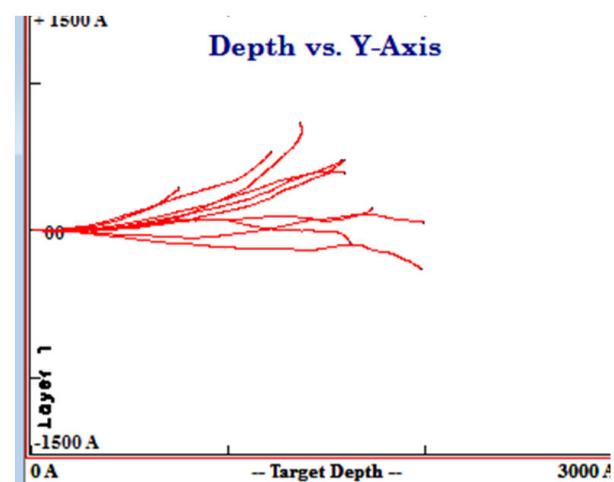


FIGURA 1. Simulación con el programa SRIM de la introducción de 10 iones de Au de 1 MeV en un blanco de Ti. Nótese en este caso el alcance promedio de entre 100 y 200 nm, y que hay espaciamiento tanto lateral como frontal.

Simultáneamente los materiales sufren daños estructurales y degradación debidos a las colisiones atómicas en grandes cantidades. A su vez, la moderación de energía de los neutrones producto de reacciones de fisión nuclear, de la que depende la reacción en cadena, se logra por medio de colisiones múltiples de los neutrones con núcleos de un material ligero, como agua o grafito, requiriendo aplicación de interacción de radiación con materia. Adicionalmente, el manejo de desechos radiactivos de un reactor nuclear es otra área donde los daños juegan un papel importante. Se deben almacenar estos desechos en un material que, además de tener estabilidad

mecánica, térmica y química a largo plazo, presente una alta resistencia a la radiación.

Consideremos las radiaciones con energía (cinética o radiativa) mayor a unos cuantos electrón-volts (eV), suficiente para inducir cambios de estado o estructurales en el blanco absorbido. Esto abarca típicamente rayos alfa y otros iones, beta, gamma, X y neutrones, que son las radiaciones que más suelen conducir a aplicaciones. En el marco de la física actual presentan sendas características corpusculares u ondulatorias, pero todas ellas pueden ceder su energía (o por lo menos una parte) al medio circundante, formado esencialmente por átomos en diversos arreglos (moléculas, materia condensada, tejido, etc.). Una vez transferida esta energía, el absorbido evoluciona de acuerdo con las características particulares del caso. Esta evolución eventualmente da lugar a posibles usos, debido a la modificación de las propiedades estructurales, eléctricas, mecánicas, ópticas, químicas, térmicas, etc.

Los dos procesos que dominan la interacción de las radiaciones con la materia son: la ionización (y excitación atómica) y los cambios de estructura. El propósito aquí es revisar los mecanismos físicos que conducen a cambios estructurales (daños) en los materiales. Sin embargo, para situar el tema dentro del panorama general, conviene señalar también la ionización (y excitación) del blanco, mecanismo dominante en algunos eventos con energías de proyectil del orden de MeV. La ionización da lugar al frenado del proyectil, llamado frenado electrónico. La energía de ionización I (necesaria para despojar un átomo de un electrón) de los elementos varía dependiendo del número atómico Z del elemento y la capa atómica del electrón despojado, desde unos cuantos eV hasta del orden de 100 keV. En los elementos de número atómico Z grande la fuerza de Coulomb a vencer para ionizar es grande; por otro lado, en las capas atómicas internas la proximidad al núcleo eleva a energía de ionización. En promedio, la energía de ionización de un absorbido de número atómico Z_2 se puede aproximar por

$$\langle I \rangle \approx 10Z_2 \text{ eV} \quad (1)$$

Como ejemplo, una sola partícula alfa proveniente del decaimiento de ^{226}Ra con energía 4.78 MeV incidente en un absorbido de carbono (energía promedio de ionización 79 eV) puede generar secuencialmente decenas de miles de ionizaciones. Considerando que cada ionización puede dar lugar a enlaces químicos libres, los cambios químicos pueden ser considerables y predominan en los estragos que pueden producir muchas de las radiaciones.

Las radiaciones que presentan características corpusculares y carga eléctrica (alfas, protones, iones pesados, electrones) al atravesar un material pierden energía cinética en un gran número de pequeños pasos que pueden idealizarse como una función continua. Se define entonces el poder de frenado ($-dE/dx$) como la energía cinética dE perdida por el proyectil en una distancia recorrida dx . Esta energía cinética es transferida al absorbido, ya sea como ionización o como

daño estructural. En ambos procesos el mecanismo físico dominante es a fuerza de Coulomb entre el proyectil cargado y la carga distribuida en el absorbido. El frenado debido a la ionización y excitación atómica se llama frenado electrónico; el debido a colisiones con átomos completos y desplazamientos atómicos se llama frenado nuclear. A partir de la energía inicial, después de cada pérdida dE el proyectil sigue su marcha hasta agotar su energía cinética y quedar implantado dentro del material. En el caso de iones energéticos, su alcance en un sólido es desde unos nanómetros (nm) hasta algunos micrómetros (μm), dependiendo de sus propiedades, principalmente su energía. Los neutrones, en cambio, transfieren su energía por otros mecanismos, esencialmente colisiones con los núcleos, o reacciones nucleares. Como estos eventos son menos probables, los neutrones pueden penetrar algunos centímetros dentro del material. En lugar de frenado, se habla de moderación de energía debida a algunos choques discretos mucho menos frecuentes.

Volviendo a los cambios estructurales, que sólo tienen sentido en los sólidos, los daños se producen cuando los átomos son desplazados permanentemente de su posición en el sólido, dando lugar a defectos en la red cristalina que evolucionan en el espacio y en el tiempo. Uno puede explorar el progreso de un proyectil que penetra en un blanco, comenzando con la primera interacción, supuesta binaria, hasta llegar a los efectos colectivos macroscópicos. Este ha sido motivo de múltiples experimentos, teorías, modelos y cálculos hasta lograrse una cabal comprensión del problema, aunque muchos detalles requieren atención y los modelos pueden ser perfeccionados. Una teoría que explique todas las observaciones es imposible dada la gran complejidad de condiciones, como lo esboza la Fig. 2. Aunque en principio los procesos son determinísticos, muchas de las explicaciones recurren a números aleatorios.

Por ser de interés para la tecnología de implantación de iones en la industria electrónica y la mejora de materiales en la industria de reactores nucleares, se puede esquematizar lo que sigue del arribo de un ion energético, o un neutrón, a un sólido, con la siguiente secuencia:

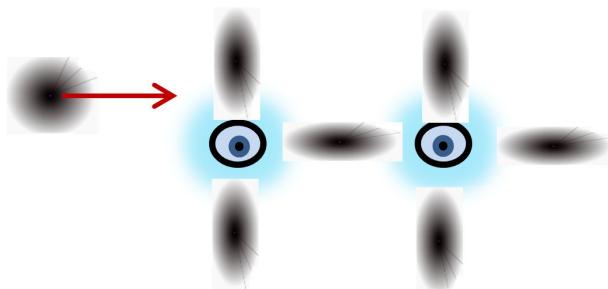


FIGURA 2. Un esbozo bidimensional de la incidencia de un ion sobre un cristal. El proyectil está representado por una nube de probabilidad. El blanco muestra claramente una anisotropía. Las capas electrónicas internas se suponen con simetría esférica; la ubicación de los electrones de las capas externas depende de la estructura cristalina.

- 1.- Evento primario, supuestamente una colisión binaria.
- 2.- Desplazamiento atómico, que genera defectos en el sólido.
- 3.- Cascadas, que multiplican y esparcen las perturbaciones.
- 4.- Monte Carlo, método que simula los efectos usando números aleatorios.
- 5.- Dinámica molecular, que abarca las interacciones de todos los átomos de un sistema.
- 6.- Monte Carlo cinético, que puede extender para incluir efectos térmicos.
- 7.- Teorías de continuo, cuando los eventos individuales se desenvuelven a procesos macroscópicos.

2. Evento primario (iones y neutrones)

Iones.- La representación más simplificada de las colisiones binarias entre iones y átomos es la llamada dispersión de Rutherford, colisión elástica entre partículas puntuales cargadas, debida a la fuerza de Coulomb. Como se sabe, el núcleo atómico fue descubierto en un experimento de dispersión de partículas alfa por un blanco de oro. Tomando como centro el blanco (masa m_2 , carga Z_2), el proyectil (masa m_1 , carga Z_1 , energía cinética E_1) describe una trayectoria hiperbólica, como la que se muestra en la Fig. 3. El parámetro de impacto b es la separación de la dirección original y la dirección del choque de frente. En el sistema de referencia del laboratorio el proyectil es desviado en dirección θ_1 y el blanco retrocede en una dirección correspondiente θ_2 , cumpliendo la conservación de energía y cantidad de movimiento. El proyectil emerge con la energía

$$E'_1(\theta_1) = E_1 \left[\frac{\cos \theta_1 + \sqrt{A^2 - \sin^2 \theta_1}}{1 + A} \right]^2 \quad (2)$$

La constante A se define como la relación m_2/m_1 . La probabilidad (sección) de que el proyectil emerja en dirección θ_1 se calcula como

$$\sigma(\theta_1) = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_1} \right]^2 \frac{1}{A} \frac{(A \cos \theta_1 + \sqrt{A^2 - \sin^2 \theta_1})^2}{\sin^4 \theta_1 \sqrt{A^2 - \sin^2 \theta_1}} \quad (3)$$

Nótese que la sección es proporcional al cuadrado de cada uno de los números atómicos y es inversamente proporcional al cuadrado de la energía del proyectil.

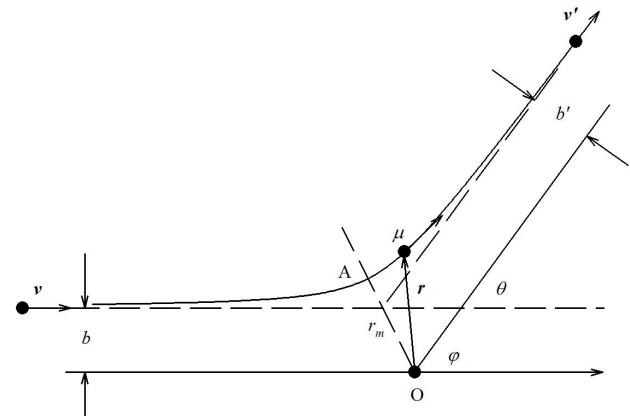


FIGURA 3. Trayectoria hiperbólica de un proyectil puntual con carga Z_1 y masa μ en la vecindad de un blanco puntual con carga Z_2 colocado en el origen (sistema de coordenadas relativo). El ángulo de dispersión es θ ; el parámetro de impacto es b . En el sistema de laboratorio tanto proyectil (1) como blanco (2) emergen con energía cinética.

Nuestro interés está principalmente en la energía cedida al blanco, pues esta energía transferida está relacionada con la modificación estructural del material. Definiendo la variable α como

$$\alpha = \frac{4m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad (4)$$

la energía transferida al blanco es

$$T = \alpha E_1 \cos^2 \theta_2, \quad (5)$$

cuyo valor máximo es $T_m = \alpha E_1$. La sección de transferencia de energía, o sea la probabilidad de transferir al blanco la energía T (siendo la energía incidente E_1), es

$$\sigma(T, E_1) = \frac{\pi (Z_1 Z_2 e^2)^2}{A E_1 T^2}. \quad (6)$$

Estas expresiones, correspondientes al caso más sencillo de colisión entre objetos puntuales cargados, ilustran dependencias en las masas, cargas y energías de los componentes. Sin embargo se esperaría que los hechos reales fuesen bastante más complicados, como lo sugiere la Fig. 4. Por ejemplo, al considerar cargas puntuales, se ha omitido la distribución de carga electrónica de los iones incidentes y los átomos del medio; se ha ignorado la estructura de capas de electrones en los iones y átomos; al suponer encuentros binarios, se han ignorado posibles interacciones con átomos vecinos; se ha ignorado la estructura cristalina de los sólidos. Para describir los datos experimentales se ha tenido que ir más allá del potencial de Coulomb, y se ha intentado una gran variedad de potenciales.

Cuando un ion atraviesa un material, dependiendo de su velocidad, puede ir intercambiando electrones con los átomos del material, así que su carga efectiva va variando a lo largo de su camino. Se observa que el parámetro importante es la velocidad relativa v_r , definida como el promedio de la diferencia de velocidades del ion y de los electrones del medio.

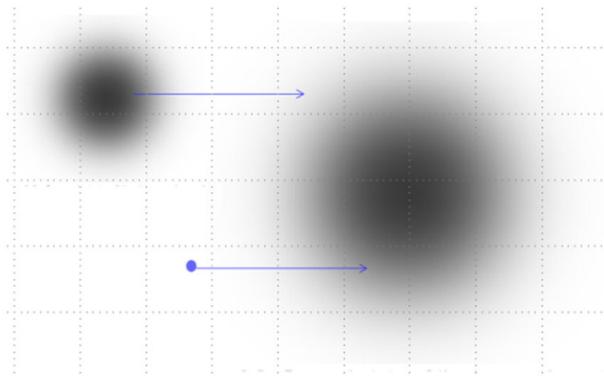


FIGURA 4. Representación simplificada de la colisión entre dos átomos aislados. Se omite la estructura de capas de ambos.

Si v_r es grande el ion viaja a alta velocidad, y pierde electrones fácilmente, siendo su carga efectiva $\sim Z_1$; contrariamente, si v_r es pequeña, conserva los electrones y su carga efectiva se acerca a cero.

Tanto en los proyectiles (iones) como en el blanco (átomos), los electrones atómicos sirven de pantalla al campo del núcleo. Para introducir este efecto es usual corregir el potencial de Coulomb del núcleo introduciendo un factor de pantalla $\phi(r)$ que simule esta presencia:

$$\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \rightarrow \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \phi(r) \quad (7)$$

El factor de pantalla debe ser la unidad en $r = 0$ y disminuir al aumentar r . Naturalmente el factor de pantalla modifica los valores de sección calculados. Se han hecho muchas propuestas para explicar los experimentos, notablemente aplicar factores distintos (potencias inversas) en diferentes intervalos de r , pero no se tiene un factor aplicable a todos los casos.

Un factor de pantalla que incluye la distribución electrónica de iones incidentes y átomos absorbidores es el llamado universal (9), que ha sido muy útil en cálculos de frenado y alcance de iones en materia con el código SRIM:

$$\begin{aligned} \phi_U = & 0.1818e^{-3.2x} + 0.5099e^{-0.9423x} + 0.2802e^{-0.4028x} \\ & + 0.02817e^{-0.2016x}. \end{aligned} \quad (8)$$

con

$$x = \frac{r}{a_U} \quad \text{y} \quad \frac{0.8854a_0}{Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23}} \quad (9)$$

a_0 es el radio de Bohr = 0.0529 nm.

Se obtuvo de la siguiente manera. Se propuso un potencial interatómico, aplicable a la colisión de dos átomos iguales o distintos, con tres componentes. La primera componente contiene el cálculo clásico de un potencial producido por una densidad de carga, con una geometría que incluye las cargas nucleares y el traslape de las cargas electrónicas de los dos átomos. La segunda componente calcula el efecto del Principio de Pauli en la región del traslape de electrones. La tercera componente toma en cuenta la fuerza de intercambio cuando

se acercan dos electrones con el mismo espín. La densidad de carga usada se obtuvo de cálculos de Hartree-Fock, en los que aparecen los efectos de capas, y es aplicable a todos los átomos. Luego se efectuaron los cálculos del potencial para 522 pares de átomos, tomados aleatoriamente, y se hizo un ajuste matemático a todos los resultados. Los coeficientes de la ecuación 8 no tienen significado físico, pues son resultado del ajuste.

Neutrones.- En el caso de la dispersión elástica de neutrones por núcleos el potencial más usado es el de esfera rígida con radio R . Las ecuaciones cinéticas de energías saliente y transferida (2), (4) y (5) son aplicables. En el sistema centro de masa la sección de dispersión es isotrópica:

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{4} R^2, \quad (10)$$

y la sección de transferencia de energía al núcleo de retroceso, que entonces se convierte en proyectil (ion energético), es

$$\sigma(T, E_1) = \frac{\pi R^2}{T_m}. \quad (11)$$

Las reacciones nucleares inducidas por neutrones producen típicamente dos iones con energías del orden de MeV que a su vez se convierten en proyectiles. En una reacción nuclear exoergética generada por un proyectil de masa m_1 sobre un blanco de masa m_2 , para generar productos m_3 y m_4 , la conservación de energía y cantidad de movimiento permiten calcular las energías cinéticas de los productos según

$$\sqrt{E_3} = V \pm \sqrt{V^2 + W}, \quad E_4 = E_1 + Q - E_3 \quad (12)$$

en donde se definen

$$\begin{aligned} V &= \frac{\sqrt{m_1 m_3 E_1}}{m_3 + m_4} \cos \theta_3, \\ W &= \frac{m_4 Q + (m_4 - m_1) E_1}{m_3 + m_4}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$Q = (m_1 + m_2 - m_3 - m_4)c^2. \quad (14)$$

Las secciones de reacciones nucleares son específicas de cada caso, y dependen de la energía del neutrón incidente.

La duración de un evento primario, calculada clásicamente, puede ser desde $\sim 10^{-17}$ s (iones ligeros o neutrones con energía de MeV) hasta $\sim 10^{-15}$ s (iones pesados con energía de keV). El volumen afectado por cada evento es del orden del volumen atómico ($\sim 0.03 \text{ nm}^3$).

3. Desplazamientos atómicos

La producción de defectos en la estructura del material sólido bombardeado es a través del desplazamiento de átomos afuera de su posición original, que se presupone se encuentra en una red cristalina (10). El átomo desplazado deja una vacancia en la red, y se coloca en una nueva posición intersticial

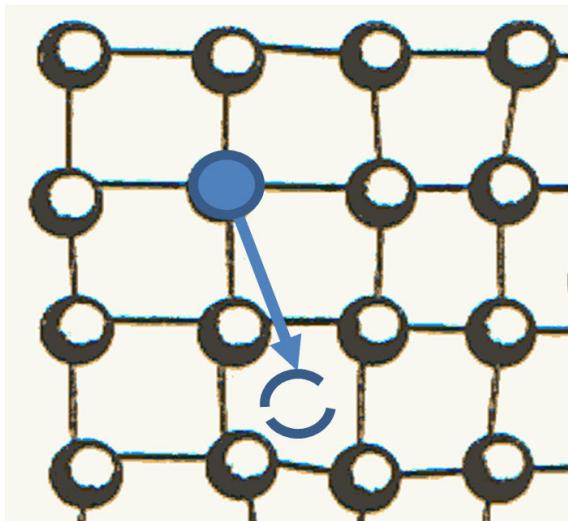


FIGURA 5. Desplazamiento de un átomo de la red para producir una vacancia y un intersticial (par de Frenkel). Para producirse el desplazamiento se necesita por lo menos la energía E_d .

dentro de la red (Fig. 5). Tanto la vacancia como el intersticial provocan el relajamiento de la red para adecuarse a los cambios; la combinación de una vacancia y un intersticial se llama par de Frenkel.

Para generar una vacancia permanente (sin que haya recombinación) se necesita vencer una barrera de potencial. La energía mínima necesaria para esto se llama energía de desplazamiento E_d . Los valores de la energía de desplazamiento varían de material a material; en los sólidos comunes E_d es del orden de unas decenas de eV. En un cristal, en las direcciones de índices bajos los vecinos impiden el desplazamiento; entonces E_d es mayor que en otras direcciones más abiertas.

Si la energía transferida en el evento primario es menor que la energía de desplazamiento ($T < E_d$) no hay desplazamiento, y T se disipa en oscilaciones atómicas localizadas generando calor. Si es mayor, puede haber desplazamientos. En otras palabras, la probabilidad $p(\theta, \phi; T)$ de producirse un desplazamiento en dirección (θ, ϕ) es

$$p(\theta, \phi; T) = 0 \quad \text{si} \quad T < E_d, \quad (15a)$$

$$p(\theta, \phi; T) = 1 \quad \text{si} \quad T > E_d. \quad (15b)$$

Integrando sobre todas las direcciones se obtiene la llamada función de desplazamiento $P_d(T)$, que es la probabilidad de que haya desplazamiento sin importar la dirección:

$$P_d(T) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} p(\theta, \phi; T) d\Omega \quad (16)$$

Si $T \gg E_d$, el átomo desplazado se convierte a su vez en proyectil, pudiendo generar nuevos eventos primarios y nuevos desplazamientos. El nuevo proyectil suele llamarse PKA (primary knock-on atom) primer átomo golpeado. Nótese que el PKA es un átomo móvil del propio material blanco.

La duración de la creación de una vacancia es del orden de la del evento primario; la distancia afectada por el intersticial se considera típicamente del orden de unos diámetros atómicos.

4. Cascadas (iones y neutrones)

Iones.- Cada PKA producido puede ser el iniciador de una cascada y de sub-cascadas de átomos del mismo material en movimiento, generando los respectivos desplazamientos. Nótese que ahora se pasa de estudiar eventos individuales a considerar procesos colectivos y estocásticos. Suponiendo que las sub-cascadas no se traslanan, es de esperarse que el número de desplazamientos por unidad de volumen [1/cm³]

$$n_d = \Phi n_2 \sigma_d, \quad (17)$$

conduzca a los daños en la estructura del material. Aquí Φ es la afluencia de partículas incidentes [1/cm²]; n_2 es la densidad atómica del absorbedor [1/cm³]; $\sigma_d(E_1)$ es la sección de desplazamiento [cm²], o sea la probabilidad de que un proyectil de energía inicial E_1 produzca un desplazamiento. Esta sección es la integral sobre todos valores de T de $\sigma(T; E_1)$ por la función de desplazamiento.

$$\sigma_d(E_1) = \int_0^{T_m} P_d(T) \sigma(T; E_1) dT. \quad (18)$$

La evolución de una cascada o sub-cascada es muy variada. Cada uno de los átomos desplazados irá disipando su energía en múltiples colisiones, produciendo más vacancias. Eventualmente el promedio de energía de los átomos llegará a un régimen térmico, en donde puede uno considerar que se termina la cascada. El tamaño de una cascada o sub-cascada puede ser desde unos diámetros atómicos a energías de eV, hasta el alcance del PKA en el material, que llegará a micrómetros en el caso de MeV. Se vislumbra la forma final de una cascada como una región central rica en vacancias rodeada por una región rica en intersticiales. La duración de una cascada, que por cierto no es posible medir directamente, se estima en 10^{-13} a 10^{-12} s.

Puesto que hay desplazamientos laterales, el volumen afectado también crece con la energía inicial. Puede darse el caso en que haya átomos dispersados en dirección totalmente opuesta a la de la radiación incidente. Si esto sucede cerca de la superficie, y se vence la energía de sublimación del material, el átomo es expulsado produciéndose una erosión de la superficie, el llamado “sputtering”. Esta erosión iónica tiene amplias aplicaciones para limpiar o texturizar superficies y para generar recubrimientos y capas delgadas.

Si las masas de proyectil y blanco son grandes, puede darse el caso que el recorrido promedio del proyectil entre colisiones en una cascada sea del orden de la distancia interatómica. Entonces el modelo lineal no es aplicable, y se crea una cascada de alta densidad, o sea una región fuertemente

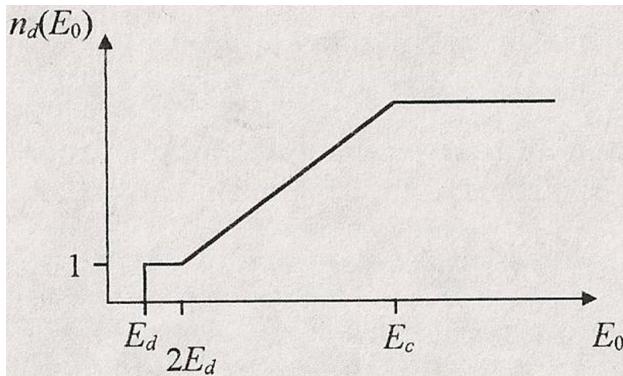


FIGURA 6. Número de desplazamientos en una cascada, según la teoría de Kinchin y Pease.

alterada, que se ha denominado “spike” o punzón. Se describe un punzón como un volumen en el que esencialmente todos los átomos se mueven, o bien un volumen en el que la densidad de defectos excede cierto valor crítico. Uno puede estimar la densidad de energía depositada, seleccionando un potencial apropiado. Si la densidad de energía depositada es mayor que la energía de fusión del material, se romperá todo el orden al fundirse localmente.

Al ir compartiendo la energía con cada vez más átomos, puede llegar el caso en que en promedio la energía no es suficiente para producir nuevas vacancias ($< E_d$). Entonces la energía transferida por colisión se disipa en forma de vibraciones de la red, produciendo calor. En 10^{-12} s la distribución de energías puede asemejarse a una distribución de Maxwell-Boltzmann, y es razonable aplicar el concepto de temperatura. Suele hablarse entonces de un punzón térmico con temperaturas locales de miles de grados Kelvin.

Una cantidad importante en la estimación de daños es el número de desplazamientos $n_d(E_0)$ producidos en una cascada, siendo E_0 la energía del proyectil que inicia la cascada. El modelo lineal más utilizado es el de Kinchin y Pease, que propone (Fig. 6):

$$\text{si } E_0 < E_d \quad n_d(E_0) = 0; \quad (19a)$$

$$\text{si } E_d \leq E_0 \leq 2E_d \quad n_d(E_0) = 1; \quad (19b)$$

$$\text{si } 2E_d \leq E_0 \leq E_c \quad n_d(E_0) = \frac{E_0}{2E_d}; \quad (19c)$$

$$\text{si } E_0 > E_c \quad n_d(E_0) = \frac{E_c}{2E_d}. \quad (19d)$$

E_c es una energía crítica. Este modelo no considera que parte de la energía del proyectil se emplea en frenado electrónico (ionización), así que se está sobreestimando $n_d(E_0)$.

Puesto que la producción de defectos deja huecos en el absorbedor, si no hay recombinación de vacancias e intersticiales el volumen de la región dañada se incrementa. Entonces uno podría esperar que en general hubiera una disminución de la densidad del material en zonas dañadas. Esto podría afectar algunas propiedades, como las ópticas o las

mecánicas. Una capa con índice de refracción mayor sirve como barrera óptica para producir guías de onda. A su vez una capa mecánicamente debilitada permite separar películas de grueso micrométrico de un material.

Neutrones.- El caso de paso de neutrones por materia es diferente puesto que el camino libre entre colisiones en general es grande, hasta algunos cm. No se habla de cascada, sino de colisiones secuenciales que moderan la energía de los neutrones. En cada choque de dispersión elástica con un núcleo del absorbedor se produce un PKA, y éste a su vez genera una cascada. En el caso de reacción nuclear generalmente se producen dos PKAs. La secuencia de colisiones va reduciendo la energía de un neutrón hasta que llega a equilibrio (térmico) con el medio, ~ 0.025 eV.

Puede estimarse el número promedio de colisiones para que un neutrón llegue al régimen térmico, número que depende fuertemente de A . Si para reducirse la energía inicial E_{inicial} hasta la final E_{final} se requieren en promedio n colisiones, entonces

$$\frac{E_{\text{final}}}{E_{\text{inicial}}} = \left\langle \frac{E'_1}{E_1} \right\rangle^n, \quad (20)$$

El promedio se puede calcular usando la definición usual y, por ejemplo, la sección del potencial de esfera rígida, para luego despejar n . Como ilustración, para reducir la energía de un neutrón de 2 MeV a 0.025 eV en un absorbedor de carbono ($A = 12$), en promedio se requiere de $n = 119$ colisiones. Aunque son pocas colisiones, recordar que en este modelo toda la energía inicial del neutrón se transfiere a PKAs. A esto habría que agregar la energía de los PKAs producidos en la reacción nuclear final en que el neutrón desaparece.

5. Monte Carlo

Es evidente que los daños producidos por las radiaciones son el resultado de la acumulación de un gran número de sucesos que pueden ser muy variados. Se explican los eventos primarios con modelos simplificados; si éstos permiten un tratamiento analítico se acepta que se entienden, aunque la simplificación excesiva de los modelos puede conducir a imprecisiones o hasta equívocos. De cualquier manera, se debe estar siempre consciente de las limitaciones del modelo empleado, y en qué intervalo de parámetros es válido. Una vez aceptados los modelos de los eventos primarios, el siguiente paso es cómo manejar la sucesión de innumerables eventos barajados entre sí. Por la gran cantidad y por la fluctuación del tipo de evento, no se presta a un tratamiento analítico. Entonces se invoca una técnica que ha sido muy útil gracias a la disponibilidad de computadoras: la simulación (11,12).

La simulación se entiende como la imitación con computadora de la evolución de un proceso que no es posible estudiar analíticamente, por ejemplo el detalle de una cascada de iones o un proceso de moderación de neutrones. Es un puente entre la simplicidad de un modelo tratado analíticamente y la realidad de un experimento. Aprovecha la versatilidad de la computadora, que permite: poner a prueba y ajustar el

modelo, variar los parámetros con facilidad, comprender la relevancia de cada uno de los mecanismos usados, y evaluar estadísticamente la “validez” de los resultados (sin olvidar que se trata de una simulación).

Cuando se extendió el uso de las computadoras una de las primeras derivaciones fue el desarrollo del método de Monte Carlo, que emplea números aleatorios (de allí el nombre Monte Carlo) para simular procesos azarosos. El método se adapta perfectamente a la simulación de paso de radiaciones por materia. Originalmente se ideó para describir el paso de neutrones en un reactor nuclear o una bomba; luego se aplicó a la absorción de fotones y electrones por materia (dosimetría de la radiación y blindajes), y al paso de iones en sólidos (implantación de iones en la industria electrónica). Actualmente es una herramienta indispensable en cualquier uso de radiaciones.

La esencia del método es imitar la distribución de valores de una variable usando números aleatorios. Si se conoce o supone la función (distribución) de probabilidades $f(x)$ de cierto evento x , la función de distribución acumulativa es la integral

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(x')dx', \quad (21)$$

que es la probabilidad de que suceda cualquier $x' \leq x$. Si la función de distribución acumulativa se muestrea entonces con números aleatorios, los valores de x obtenidos tendrán la distribución $f(x)$.

Iones.- El programa SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter, antes TRIM) es el más empleado para simular el paso de iones por materia (9). Simula un ion (carga, masa, energía, ángulo de incidencia) que incide en un material amorfo (densidad, estequiometría, forma y espesor), y va siguiendo paso por paso su avance aleatorio, así como el de todos los iones secundarios generados (optativo), usando el

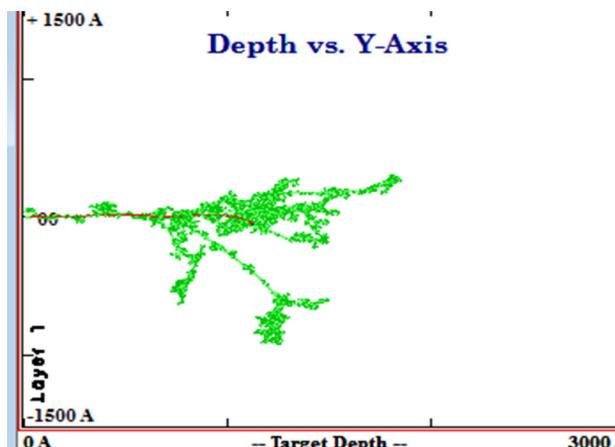


FIGURA 7. Simulación con el programa SRIM del paso de un solo ion de Au de 1 MeV por un absorbador de Ti, incluyendo las cascadas. Las zonas dañadas se extienden más allá del alcance del ion inicial.

método de Monte Carlo. Produce una imagen del trayecto, y acumula estadísticas de: distribución de iones primarios, distribución de energía perdida por ionización (frenado electrónico), distribución de daños, distribución de fonones (calor), y erosión (sputtering). Esto se repite tantas veces como se necesite para lograr una buena estadística. Se muestra un ejemplo en la Fig. 7: la simulación del paso de un solo ion de Au de 1 MeV incidiendo en Ti, incluyendo las cascadas completas.

Los números aleatorios $rand$ son generados en los códigos de cómputo (realmente son pseudo-aleatorios) distribuidos uniformemente en el intervalo (0,1). Son usados en SRIM en cada colisión:

- 1.- Para seleccionar el parámetro de impacto b ; los parámetros de impacto grandes son los más probables. A altas energías se desprecian colisiones con desviaciones pequeñas, y

$$b = \sqrt{\frac{-\ln rand}{\pi n_2 L}}. \quad (22)$$

A bajas energías se usa

$$b = \sqrt{\frac{rand}{\pi n_2^{2/3}}}. \quad (23)$$

Para ahorrar tiempo de cómputo, se usan ciertas aproximaciones y argumentos físicos para calcular la distancia entre colisiones L , y a partir de allí el frenado electrónico.

- 2.- Para seleccionar el ángulo acimutal ϕ . Todo lo dicho anteriormente sobre colisiones individuales supone trayectorias en un plano (conservación de momento angular), pero habiendo más de una colisión se tiene que generalizar a tres dimensiones:

$$\phi = 2\pi rand. \quad (24)$$

- 3.- Para seleccionar el átomo blanco (en compuestos) se usa el método de rechazo, que consiste de un muestreo aleatorio de una variable y el rechazo de los casos que no cumplen con ciertos requisitos.

Neutrones.- El transporte de neutrones en un material se caracteriza por grandes distancias (hasta de cm) recorridas en línea recta entre colisiones, y finalmente cuando sucede una reacción nuclear el neutrón es eliminado.

La secuencia del transporte de neutrones se adapta a la simulación usando el método de Monte Carlo (7), con las siguientes variaciones:

- 1.- Los neutrones provenientes de un reactor nuclear no son monoenergéticos. Sus energías están determinadas por el espectro de evaporación de productos de fisión, llamado de Watt, que a altas energías (> 1 MeV) está dominado por una exponencial negativa, y a bajas energías por un seno hiperbólico. Este espectro se muestrea con números aleatorios.

- 2.- En el caso de compuestos en cada colisión se selecciona el blanco con el método de rechazo.
- 3.- En cada colisión se selecciona dispersión o reacción nuclear de acuerdo con las secciones correspondientes.
- 4.- Las secciones de dispersión y de reacción nuclear son características de cada isótopo de cada elemento, y por lo tanto se deben proporcionar en un archivo aparte. Como ejemplo se puede considerar la dispersión por esfera rígida, aplicable en muchos casos. Es frecuente que la dispersión sea isotrópica en el sistema de laboratorio, y entonces el ángulo de dispersión se puede seleccionar aleatoriamente. Para asegurar que el neutrón emerja con la misma probabilidad en cualquier elemento de área,

$$\cos \theta_1 = 2\text{rand} - 1 \quad \text{y} \quad \varphi_1 = \pi(2\text{rand} - 1). \quad (25)$$

- 5.- Como la distancia entre colisiones sigue una distribución exponencial, se selecciona con

$$s = -\lambda \ln \text{rand}, \quad (26)$$

en donde λ es el camino libre medio definido como

$$\lambda = \frac{1}{n_2 \sigma} \quad (27)$$

6. Dinámica molecular

Los cálculos de dinámica molecular (13,14) son un método para simular numéricamente el comportamiento de un sistema con un número grande de átomos, por ejemplo un sólido cristalino (8). Esencialmente rastrea en el tiempo el movimiento de todos los átomos del sistema sujetos a las fuerzas de sus vecinos, resolviendo las ecuaciones de Newton. Cuando uno de ellos, por ejemplo un PKA, es desplazado por una radiación incidente el efecto se propaga sobre todo el sistema.

Suponiendo interacciones entre pares de átomos, en un sistema de N átomos de masa m_i la fuerza que actúa sobre el átomo i es, según la segunda ley de Newton,

$$m_i \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = \sum_{j=1}^N F_{ij} \quad (28)$$

con $j \neq i$, siendo $F_{ij} = -F_{ji}$ la fuerza que ejerce el átomo j sobre el átomo i . Si las fuerzas son conservadoras se pueden expresar como el gradiente de un potencial. Es común suponer que los átomos tienen simetría esférica y su posición de equilibrio es un punto de una red cristalina, la cual hay que especificar inicialmente. Si r_{ij} es la separación entre los átomos i, j , la componente en la dirección k de la fuerza sobre el átomo j será

$$F_j^k(t) = - \sum_i \alpha_i^k \frac{\partial V(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \quad (29)$$

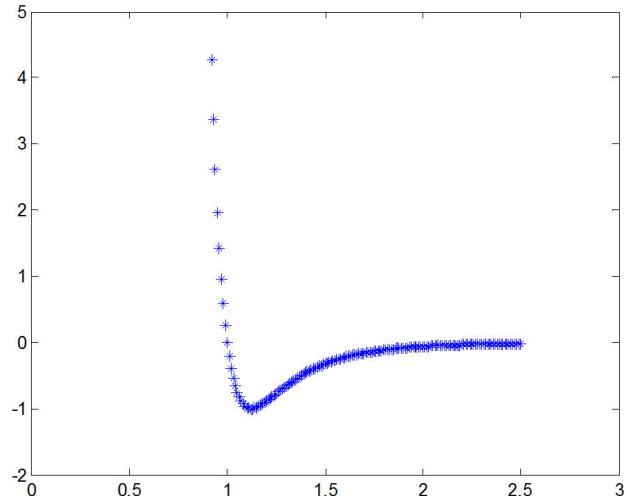


FIGURA 8. Potencial de Lennard-Jones vs separación.

en donde los coeficientes α_i^k son los cosenos de los ángulos entre r_{ij} y el eje k . Los potenciales entre pares más comúnmente usados son de tipo Morse o Lennard-Jones, que son fuertemente repulsivos a distancias cortas y atractivos a distancias grandes, como lo muestra la Fig. 8. Típicamente considerar hasta los segundos vecinos más cercanos da suficiente precisión.

La solución de las ecuaciones acopladas 29 describe el movimiento de los N átomos en función del tiempo. Si, por ejemplo, el sistema es un cubo con 10 átomos por arista, $N = 1000$, y debe resolverse en forma numérica, paso por paso. Por las distancias y velocidades involucradas, un intervalo temporal Δt del orden de 1 fs (10^{-15} s) permite calcular una trayectoria significativa, tal que el desplazamiento en cada paso no rebasa el 5 % de la distancia interatómica. Para cada átomo i el procedimiento más sencillo sería:

$$\dot{x}(t + \Delta t/2) = \dot{x}(t - t\Delta t/2) + \Delta t \frac{F_i(t)}{m_i}, \quad (30)$$

$$x_i(t + \Delta t) = x_i(t) + \Delta t \dot{x}_i(t + \Delta t/2). \quad (31)$$

Este proceso se continúa hasta llegar a un corte predeterminado, por ejemplo que la energía cinética sea $\leq E_d$, o que emigre del sistema. La Fig. 9 muestra un ejemplo simplificado (bidimensional) del tipo de resultado que se puede obtener con un potencial repulsivo.

Desde luego hay una gran cantidad de variantes alrededor de este esquema básico, y que la computadora permite explorar, además de la evidente variación de parámetros. Por ejemplo: enviar un proyectil puntual o compuesto, cambiar la red cristalina, introducir compuestos o aleaciones, variar los potenciales, variar el potencial en las fronteras, probar diferentes métodos de integración, introducir defectos en la red, etc. Los cálculos de dinámica molecular han sido muy útiles en el entendimiento de los efectos producidos por la radiación. Un ejemplo es la predicción de “channeling”, que es el paso de partículas por los huecos interatómicos e interplanares; posteriormente fue corroborado experimentalmente. La

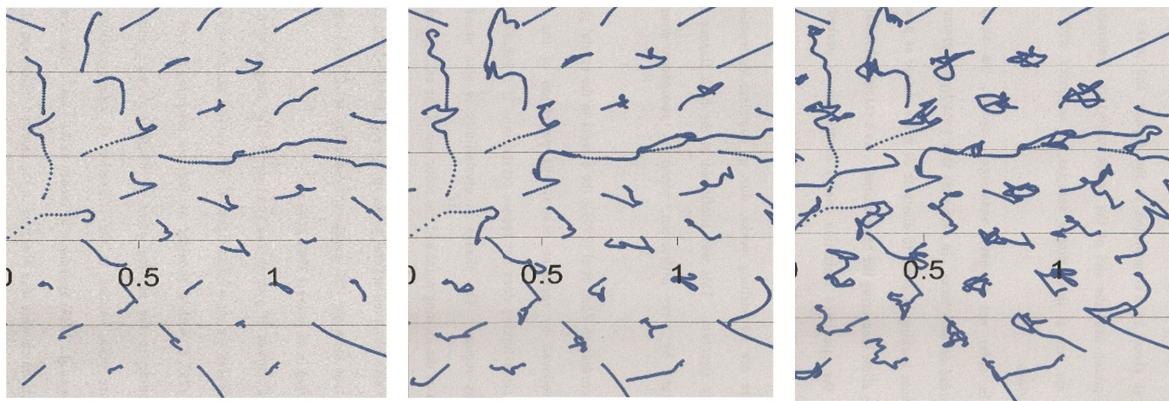


FIGURA 9. La clase de información que se obtiene de un cálculo de dinámica molecular. En esta secuencia bidimensional se imparte una cantidad de movimiento a un átomo en el centro de la orilla izquierda. En las primeras trayectorias se observan los intervalos de tiempo. Todos los átomos oscilan alrededor de su posición de equilibrio. En varios casos se observan colisiones secuenciales.

principal limitación del método es la demanda de tiempo de cómputo, que se traduce en la restricción en el tamaño del sistema estudiado, en limitación de a energía inicial, o en el alcance del cálculo, puesto que los intervalos típicos de tiempo son del orden de 10^{-15} s y difícilmente se alcanza el régimen térmico cuyos tiempos característicos son de 10^{-12} s.

7. Monte Carlo cinético

Para ahorrar tiempo de cómputo, y así extender los cálculos al régimen térmico, se ha desarrollado el método llamado de Monte Carlo cinético (15). En vez de seguir detalladamente la evolución de cada átomo, se plantea una secuencia de saltos difusivos entre estados del sistema. Si se supone el sistema representado por una serie de pozos de potencial (estados), en cada pozo el sistema puede permanecer por grandes lapsos, como lo indica la Fig. 10. Las probabilidades de saltar de un estado a otro determinan el desarrollo del sistema. Si se supone equilibrio térmico las transiciones entre estados son poco frecuentes y el sistema pierde la memoria en cada paso, estableciendo una cadena de Markov.

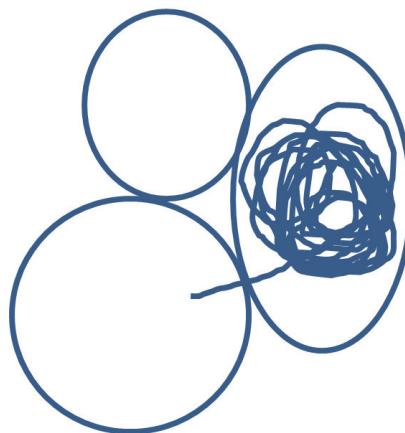


FIGURA 10. Estados de un sistema representados por pozos de potencial y una posible transición entre estados.

Se denomina k_{ij} la razón de una transición del estado i al estado j ; las razones de transición se deben conocer de antemano. La razón de escape total del estado i es

$$k_{tot} = \sum_j k_{ij} \quad (32)$$

Cada probabilidad de transición se supone que tiene una distribución temporal exponencial dada por

$$p_{ij}(t) = k_{ij} \exp(-k_{ij}t), \quad (33)$$

y la probabilidad total de escape es

$$p(t) = k_{tot} \exp(-k_{tot}t). \quad (34)$$

Los tiempos aleatorios se obtienen de la distribución de valores de las razones de transición k (supuestamente conocidas) y números aleatorios:

$$t = -\frac{\ln(\text{rand})}{k}. \quad (35)$$

La implementación del método de Monte Carlo cinético obedece entonces al conocimiento de las razones de transición, que se espera sean dependientes de la temperatura y de la energía de activación para pasar de un estado a otro. Algunos ejemplos de modalidades para estimar razones de transición serían: suponer que el pozo es un oscilador armónico, suponer que la razón de transición depende del cambio de energía del sistema con la transición, considerar que depende de la proximidad a la superficie, o de la estructura cristalina, aplicarlo a la difusión de vacancias u otros defectos. Las razones de transición son la esencia de la teoría de estado transitorio (TST), ampliamente usado en el estudio de reacciones químicas, así que se pueden considerar como un empalme entre los métodos físicos y químicos. El ahorro de tiempo de cómputo, comparando por ejemplo con los cálculos de dinámica molecular, permite extender los intervalos de tiempo estudiado hasta segundos.

8. Teorías de continuo

Hay alteraciones en los materiales, producidos por las radiaciones, que son claramente visibles a ojo o con métodos convencionales de microscopía. Estas necesariamente son producto de fenómenos colectivos. Estando generalmente afuera del margen útil de los modelos descritos basados en colisiones binarias, para su estudio se aplican teorías de continuo. Recordar que 1 mol de un compuesto contiene 6.022×10^{23} moléculas (número de Avogadro), que típicamente la superficie de un sólido presenta 10^{15} átomos/cm², que el radio de un átomo es del orden de un décimo de nm; estos números justifican la aproximación continua. Además, un experimento normal de bombardeo por un acelerador lanza de 10^{14} a 10^{17} proyectiles/cm².

Un ejemplo es la evolución de la superficie de un sólido (16,17) al ser bombardeado por iones. Junto con la erosión iónica o “sputtering”, se observa la producción de ondas superficiales al estilo de las dunas de arena en los desiertos. Son claramente observables con microscopio óptico, con microscopio electrónico, o con microscopía de fuerza atómica, como muestra la Fig. 11. Las longitudes de onda son de hasta μm , y las alturas de las crestas suelen ser del orden de cientos de nm, dimensiones muy lejanas a las de procesos individuales. Si bien las ondulaciones son producto de un gran número de eventos individuales a nivel atómico, su descripción se puede llevar a cabo usando aproximaciones con funciones continuas; aludiendo a una similitud, con la escala apropiada, no sería posible ni tendría mucho sentido tratar de describir dunas del desierto en términos de cada uno de los granos de arena.

La superficie de un sólido inicialmente plana bombardeada por un haz de iones evoluciona por varios procesos, cuyos efectos se van acumulando con el tiempo mientras dura el bombardeo. Uno de ellos es la erosión iónica que consiste en expulsar átomos de la superficie. La rapidez de erosión depende de las condiciones del bombardeo (Z_1, m_1, Z_2, m_2 ,

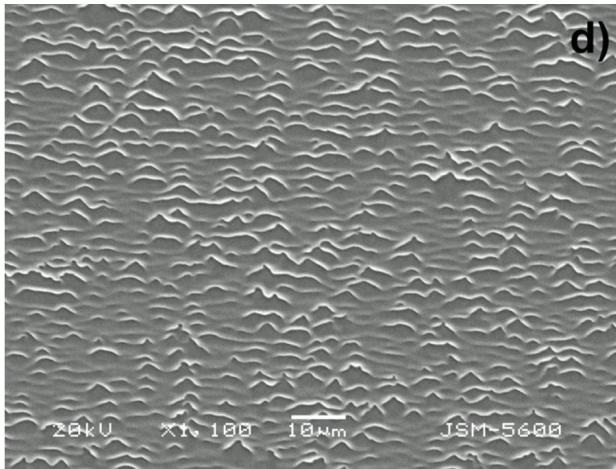


FIGURA 11. Fotografía tomada con microscopio electrónico de barrido de una muestra de la aleación Ti-6Al-4V implantada con iones de Au de 1 MeV. La escala se indica en la barra blanca.

la energía E_1 del ion, y el ángulo de incidencia de los iones). Si se da el caso que cada ion incidente expulsa varios átomos del blanco, la superficie original va retrocediendo y es suplantada por una generación de nuevo material. El ion incidente a su vez se implanta a cierta profundidad dentro del material, aumentando el volumen del material, y va produciendo defectos y esfuerzos en su camino. Dependiendo de la temperatura, posteriormente los defectos se pueden recombinar o migrar hacia la superficie, sobre la cual se difunden lateralmente. Todo esto modifica marcadamente la superficie y puede dar lugar a inestabilidades que eventualmente se traducen en formas como montículos, ondas u oquedades.

Las excursiones de una superficie durante el bombardeo por un haz de iones se pueden describir con variables y funciones continuas. Como referencia para un caso elemental, se define el plano de la superficie original como el plano xy con la dirección z perpendicular al plano, como lo muestra la Fig. 12. El ion se desplaza en el plano xz formando un ángulo θ con la dirección z . La dirección h indica el desplazamiento de la superficie S . En casos más generales, la superficie podría estar inclinada, y podría no ser plana. El ángulo de incidencia θ puede tener cualquier valor entre 0 y 90° .

La evolución con el tiempo (proporcional a la afluencia de iones) de la altura $h(x, y)$ de la superficie en función de las variables continuas es tema de indagación con diferentes modelos. En el siguiente modelo se ilustra cómo cada proceso físico puede contribuir a la evolución de la altura de la superficie. Aquí la rapidez de variación de h se describe como

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -v_0 + \lambda(\nabla h)^2 + v_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + v_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} - K\nabla^4 h + \eta(x, y, t). \quad (36)$$

El primer término de la derecha representa un retroceso constante de la superficie debido a la erosión. El segundo

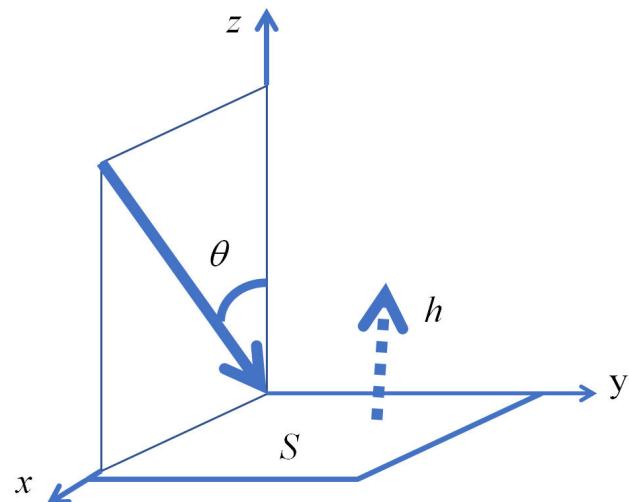


FIGURA 12. Desplazamiento $h(x, y)$ de la superficie S al ser bombardeado por un haz de iones que viaja en el plano xz formando un ángulo θ con la dirección z .

término es un crecimiento lateral no lineal que toma en cuenta la adición de nuevo material. Los términos tercero y cuarto indican que la curvatura, un relajamiento lateral y la tensión superficial de la superficie en las direcciones x , y respectivamente afectan el crecimiento. El término de cuarto orden, propuesto por Bradley y Harper, añade la difusión superficial, que depende de la temperatura. También agrega que la erosión iónica descrita en la teoría de Sigmund; tiende a alisar la superficie (signo negativo). La última expresión es un término estocástico que simula que la llegada de los iones no es uniforme.

La solución de la Ec. (36), y de muchas variantes de ella que se han probado, origina ondas y otros perfiles. Es notable que bajo ciertas condiciones la orientación de las ondas calculadas depende del ángulo de incidencia θ . Los perfiles calculados dependen del tipo de ion y del absorbedor, de la energía y ángulo de incidencia de los iones, de la estructura cristalina y orientación del absorbedor, de la rapidez de erosión, de la densidad de flujo y la affuencia de iones, de la temperatura, de la cantidad y tipo de impurezas en el absorbedor.

Alrededor de estas ideas básicas, se han probado muchas variaciones de la ecuación de evolución de la superficie con los experimentos correspondientes. Algunos ejemplos son:

- Amorfización de una capa delgada superficial por daños en la zona de alcance de los iones (los semiconductores se amorfizan con el daño; los metales no).
- Flujo viscoso de una capa superficial, influido por posibles impurezas.
- Superficies escalonadas que afectan la difusión superficial.
- Autoimplantación, o sea implantación de iones del mismo tipo del absorbedor.
- Anisotropía en absorbedores cristalinos que se refleja en la orientación de las ondas superficiales producidas.
- Derivadas de orden mayor en la ecuación de evolución de la superficie.
- Efecto del bombardeo con cúmulos de iones.

La mayoría de los estudios a la fecha se han hecho bombardeando semiconductores, por la posibilidad de aplicaciones en la industria electrónica y para tratar de comprender mejor y corregir posibles efectos negativos. Por otro lado, el grueso de los estudios se ha hecho con iones de energías entre unos cuantos eV y decenas de keV, en donde la penetración de los iones en el absorbedor es del orden de unas decenas de nm, y además se cuenta con equipos adecuados, implantadores de iones principalmente de gases nobles. Se han hecho pocos estudios a altas energías (MeV) y con distintos iones en diferentes absorbedores. A estas altas energías el coeficiente de erosión cambia, y además los iones penetran más

en el absorbedor, depositando su energía a mayor profundidad. Aunque se espera que los fenómenos físicos sean los ya descritos, su proporción puede ir variando, con la consecuente variación de los parámetros. Se abre la posibilidad de otras aplicaciones de modificación de superficies, aparte de la industria de los semiconductores, como superficies de titanio y sus aleaciones, que se usan como prótesis.

9. Comentarios

La perspectiva integral presentada aquí puede usarse como una guía para profundizar en cada uno de los temas, sin perder de vista el contexto general. Cada tema, casi cada párrafo, está sustentado por un gran acervo de información que el lector interesado puede explorar con la ayuda de las referencias y la información en línea. Al simplificar, necesariamente el alcance y la profundidad de cada tema están limitados, pero se trató de conservar la esencia, siempre haciendo referencia a la física detrás, e indicando órdenes de magnitud de las unidades involucradas.

El nivel de la presentación es de física de posgrado, o sea que se espera que el estudiante tenga nociones de física clásica y cuántica, conozca las definiciones básicas de la física de radiaciones, la notación, y el significado y valor de algunas constantes. Podría usarse como fundamento para una materia de posgrado de interacción de radiación con materia, si se añaden las faltantes que seguro el lector podrá identificar. Algunos ejemplos serían: aplicación detallada de la conservación de energía y cantidad de movimiento, estudio de otros potenciales atómicos, estudio de defectos en sólidos y su difusión, otras aplicaciones del método de Monte Carlo, la teoría de erosión (“sputtering”), el fenómeno de canalización (“channeling”) en cristales, la importancia relativa del frenado electrónico y el frenado nuclear, la carga efectiva del proyectil, etc. A esto se agrega usos y aplicaciones prácticas como implantación de iones, métodos analíticos basados en interacción de radiación con materia, aplicaciones a capas delgadas y modificación de superficies, modificación de propiedades ópticas, microelectrónica y optoelectrónica, etc.

Una nota más sobre modelos, de uso habitual en estudio de la física. Todos los conceptos aquí mencionados se basan en sendos modelos que representan de manera simplificada el fenómeno real, con la esperanza de que la simplificación permita un tratamiento analítico que nos hace pensar que entendemos el fenómeno. Para ilustrar el uso de modelos, con sus ventajas y defectos, analicemos un caso particular, el modelo del átomo de Thomas-Fermi, indicando los dilemas que se pueden generalizar a cualquier uso de modelos. El modelo de Thomas-Fermi se usa frecuentemente como fundamento para estudiar colisiones entre átomos. Es un tratamiento estadístico de los estados de los electrones atómicos en un campo central para calcular su densidad y el potencial. No se considera la estructura de capas, pero sienta las bases para tratamientos más completos. (1). El resultado es la propuesta

de un potencial que se puede reescribir en la forma conveniente

$$x^{1/2} \frac{d^2 x}{dx^2} = x^{3/2}, \quad (37)$$

con las siguientes definiciones:

$$V(r) = \frac{-Ze^2}{r} \chi(x), \quad (38)$$

$$r = a_{TF}x, \quad (39)$$

$$a_{TF} = \frac{1}{2} \left(\frac{3\pi}{4} \right) \frac{\hbar^2}{m_e e^2 Z^{1/3}} = \frac{0.885 a_0}{Z^{1/3}}, \quad (40)$$

y a_0 es el radio de Bohr. La función χ constituye una función de apantallado al potencial de Coulomb. La cantidad a_{TF} se llama radio de Thomas-Fermi.

Primer tópico.- Aceptar que se trata de un modelo, una simulación del caso real. Habrá limitaciones y posibles errores. A menudo se olvida este punto.

Segundo tópico.- Establecer las suposiciones y las expresiones matemáticas adecuadas. ¿Hay otras opciones? El modelo de Thomas-Fermi de un átomo aislado es un tratamiento estadístico de los estados de los electrones atómicos en un campo central.

Tercer tópico.- Aclarar que efectivamente se ajusta al problema de modificación de materiales por colisiones atómicas, en concepto y en magnitudes.

Cuarto tópico.- El desarrollo matemático. Es el tratamiento estadístico de estados de electrones en una caja cuadrada.

Quinto tópico.- Valorar y criticar las suposiciones. Siendo un modelo estadístico, ¿para cuántos electrones es válido? No

se consideran capas. Si es campo central, ¿se puede aplicar a colisiones entre dos átomos, o a átomos en una red cristalina? ¡El radio de Bohr (Ec. (40)) a su vez es producto de otro modelo!

Sexto tópico.- Aclarar límites de aplicación. Esto naturalmente está ligado a las suposiciones. Determina a su vez hasta qué aproximación numérica se puede creer.

Séptimo tópico.- Evaluar si el resultado es congruente con lo esperado.

Octavo tópico.- El modelo de Thomas-Fermi, a pesar de las limitaciones mencionadas, ha resultado cardinal para muchas propuestas de potenciales interatómicos en el estudio y la aplicación de modificación de materiales [1,2,6]. En esta área, y en muchas otras, ha sido exitoso.

Sería interesante requerir a los estudiantes de física una crítica a fondo (los ocho tópicos) de cada uno de los modelos estudiados en la carrera. Se aprendería mucha física.

Lo expuesto aquí es sólo uno de muchos enfoques que se puede seguir al estudiar la interacción de radiación con materia. Otros enfoques o bifurcaciones desembocan en los resultados correspondientes, según el objetivo que cada quien persigue.

Agradecimientos

Mi reconocimiento a Rebeca Trejo, Miguel Angel García, Luis de la Vega y Jacqueline Cañetas por aguantar innumerables debates que eventualmente me han conducido a esta imagen cabal del tema. Este trabajo fue desarrollado como parte del proyecto PAPIIT-111717.

-
1. M. Nastasi, J.W. Mayer y J.K. Hirvonen, *Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications*, (Cambridge University Press, 1996).
 2. G.S Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science*, (Springer-Verlag, 2007).
 3. Chr. Lehmann, *Interaction of Radiation with Solids and Elementary Defect Production*, (North Holland, 1977).
 4. L.T. Chadderton, *Radiation Damage in Crystals*, (Wiley, 1964).
 5. A.E. Hughes y D. Pooley, *Real Solids and Radiation* (Springer-Verlag, 1975).
 6. J.B. Park, *Biomaterials Science and Engineering* (Plenum Press, 1984).
 7. http://www.axcelis.com/sites/default/files/docs/Ion_Implantation_in_Silicon_Technology.pdf
 8. <http://www.world-nuclear.org/information-library/nuclear-fuel-cycle/nuclear-power-reactors/nuclear-power-reactors.aspx>
 9. J.F. Ziegler, J.P. Biersack y U. Littmark, *The Stopping and Range of Ions in Solids* (Pergamon Press, 1985).
 10. F. Agullo-López, C.R.A. Catlow y P.D. Townsend, *Point Defects in Materials*, (Academic Press, 1988).
 11. S.M. Ross, *A Course in Simulation*, (Macmillan, 1990).
 12. A.B. Shiflet y G.W. Shiflet, *Introduction to Computational Science, Modeling and Simulation for the Sciences*, (Princeton University Press, 2006).
 13. W. Eckstein, *Computer Simulation of Ion-Solid Interactions* (Springer-Verlag, 1991).
 14. J.M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation* (Wiley, 1992).
 15. A.F. Voter, *Introduction to the Kinetic Monte Carlo Method*, en *Radiation Effects in Solids*, ed. K.E. Sickafus y E.A. Kotomin, (Springer, 2005) pp 1-23.
 16. A.-L. Barabasi y H.E. Stanley, *Fractal Concepts in Surface Growth*, (Cambridge University Press, 1995).
 17. M.A. Makeev, R. Cuerno, T.A.L. Barabasi, *Morphology of Ion-Sputtered Surfaces, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **197** (2002) 185-227.