

# Influencia de las tensiones mecánicas sobre la sección eficaz de dispersión elástica de electrones y el coeficiente de retrodispersión

L. CALDERÍN, J.F. ECHEVARRÍA Y P. LEIVA

*Centro de Estudios Aplicados al Desarrollo Nuclear  
P.O. Box 6122, La Habana, Cuba*

Recibido el 18 de noviembre de 1994; aceptado el 27 de mayo de 1996

**RESUMEN.** Se propone un modelo teórico para la dependencia de la sección eficaz de dispersión elástica de electrones por el átomo y del coeficiente de retrodispersión de las tensiones mecánicas. Según el modelo desarrollado, las tensiones mecánicas provocan efectos medibles sobre la sección eficaz de dispersión elástica pero influyen débilmente sobre el coeficiente de retrodispersión.

**ABSTRACT.** A theoretical model of the dependence of elastic scattering cross section and the reflexion coefficient of electrons on mechanical stresses is presented. Following this model mechanical stresses induce changes on elastic scattering cross sections that can be measured, however a very small influence of stresses is expected on the reflexion coefficient.

PACS: 34.80.Bm; 62.20.Dc; 61.14.Rq

## 1. INTRODUCCIÓN

El estudio de los campos de tensiones, sobre todo de las tensiones residuales en los materiales, es de primordial importancia no sólo desde el punto de vista académico sino también práctico por la incidencia directa que tienen dichos estudios en la obtención de tecnologías más eficientes. Son muy conocidos los problemas que traen la presencia de tensiones residuales en la seguridad de recipientes, tuberías a presión, circuitos integrados, etc.

Existen varios métodos para la determinación de tensiones en los materiales [1, 2]. Entre ellos se encuentran los de difracción de rayos X y neutrones, los cuales se basan en el cambio del patrón con las variaciones de las posiciones atómicas debido a las tensiones. En este trabajo se presenta un modelo teórico de la dependencia de la sección eficaz de dispersión elástica de un electrón por un átomo, así como del coeficiente de retrodispersión en presencia de tensiones mecánicas. Este cálculo puede ser útil para aprovechar la información contenida en las intensidades de los patrones de difracción de electrones y rayos X, y para establecer un nuevo método de medición.

## 2. DESARROLLO

Para el cálculo de la sección eficaz diferencial de dispersión elástica de un electrón por el átomo en presencia de tensiones mecánicas, se utilizó la aproximación de Born [3, 4]

$$\frac{ds}{d\Omega}(\mathbf{q}) = \frac{64\pi^4 m^2 e^4}{h^4 q^4} (Z - F(\mathbf{q}))^2, \quad (1)$$

donde  $d\Omega$  es el diferencial de ángulo sólido,  $m$  es la masa del electrón en reposo,  $e$  es la carga eléctrica del electrón,  $h$  es la constante de Planck,  $Z$  es el número atómico y  $\mathbf{q}$  es el vector de transferencia de momentum, cuyo módulo es:

$$q = 2k \operatorname{sen} \frac{\omega}{2},$$

siendo  $k$  el módulo del vector de onda incidente y  $\omega$  el ángulo de dispersión.

$F(\mathbf{q})$  es el factor de forma atómico que viene dado por

$$F(\mathbf{q}) = \int n(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} dv, \quad (2)$$

donde  $n(\mathbf{r})$  es el número de electrones por unidad de volumen en el punto  $\mathbf{r}$ .

Es necesario entonces estimar cómo cambiaría la densidad de la nube electrónica del átomo con las tensiones. Para ello analicemos el siguiente ejemplo. Supongamos que tenemos un sólido cargado en tracción, entonces la densidad del material disminuye en el sentido de las tensiones, mientras que aumenta en la dirección transversal. Esto implica que entre dos átomos vecinos, según la dirección de aplicación de las tensiones, la densidad electrónica disminuye. En caso de que los átomos sean vecinos según la dirección transversal de aplicación de las tensiones, dicha densidad aumenta. Podríamos pensar que se cumple lo mismo para la nube electrónica de un átomo del sólido bajo tensiones, es decir, en los puntos ubicados según la dirección de aplicación de las tensiones se tendrá una disminución de la densidad electrónica, mientras que en los ubicados según la dirección perpendicular a la de aplicación de las tensiones, la densidad electrónica aumentará. Luego, la densidad electrónica del átomo ubicado en un sólido bajo tensiones en el punto  $\mathbf{r}$ , será proporcional a la densidad del átomo esférico sin tensiones evaluada en el punto  $\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}$ , donde  $\delta\mathbf{r}$  es el desplazamiento de dicho punto provocado por las tensiones. Al generalizar obtenemos la siguiente expresión para la densidad electrónica:

$$n(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) = \rho(\boldsymbol{\sigma}) n_0(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}(\boldsymbol{\sigma})), \quad (3)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma}$  es el tensor de esfuerzos y  $n_0(\mathbf{r})$  es la densidad electrónica del átomo sin tensiones, la cual tomamos como la clásica densidad con simetría esférica [3, 4]

$$n_0(\mathbf{r}) = \frac{Ze^{-2\frac{r}{a}}}{\pi a^3}, \quad (4)$$

donde  $a$  es el radio atómico. El factor de proporcionalidad  $\rho$  se determina mediante la condición de normalización

$$\int n(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) d\nu = Z. \tag{5}$$

Puede verse de la Ec. (4) que para desplazamientos pequeños se cumple que

$$n_0(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) = n_0(r + \Delta r), \tag{6}$$

donde  $\Delta r$  es la proyección del desplazamiento en la dirección de  $\mathbf{r}$ . Tendremos entonces la siguiente expresión para la densidad electrónica:

$$n(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) = \rho(\boldsymbol{\sigma})(n_0(\mathbf{r}) + \frac{dn_0}{dr}\Delta r). \tag{7}$$

De la expresión (4) obtenemos

$$\frac{dn_0(\mathbf{r})}{dr} = -\frac{2}{a}n_0(\mathbf{r}). \tag{8}$$

Por otro lado,

$$\Delta r = r \frac{\mathbf{r}}{r} * \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\sigma}) * \frac{\mathbf{r}}{r}, \tag{9}$$

donde  $\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\sigma})$  es el tensor de deformaciones en función de las tensiones.

La densidad toma la forma

$$n(\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}) = \rho(\boldsymbol{\sigma})n_0(\mathbf{r}) \left( 1 - \frac{2}{a} \frac{\mathbf{r} * \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{\sigma}) * \mathbf{r}}{r} \right). \tag{10}$$

A partir de la Ec. (5) obtenemos

$$\rho(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{1 - T(\boldsymbol{\sigma})}, \tag{11}$$

donde  $T(\boldsymbol{\sigma})$  es la traza del tensor de deformaciones.

Calculando  $F(q)$  según la Ec. (2) —tomando un sistema de referencia donde el eje  $z$  se hace coincidir con la dirección de  $\mathbf{q}$  y pasando a coordenadas esféricas— se obtiene de la Ec. (1) que

$$\frac{ds}{d\Omega}(\mathbf{q}, \boldsymbol{\sigma}) = \frac{64\pi^4 m^2 e^4}{h^4 q^4} \left( Z - \frac{16\rho(\boldsymbol{\sigma})Z}{(4 + (qa)^2)^2} \left( 1 - T + 2\varepsilon_{\mathbf{q}\mathbf{q}}(\boldsymbol{\sigma}) \frac{(12 + (qa)^2)}{4 + (qa)^2} \right) \right)^2, \tag{12}$$

donde  $\varepsilon_{\mathbf{q}\mathbf{q}}$  es la deformación en un plano perpendicular a la dirección de  $\mathbf{q}$  y según su sentido.

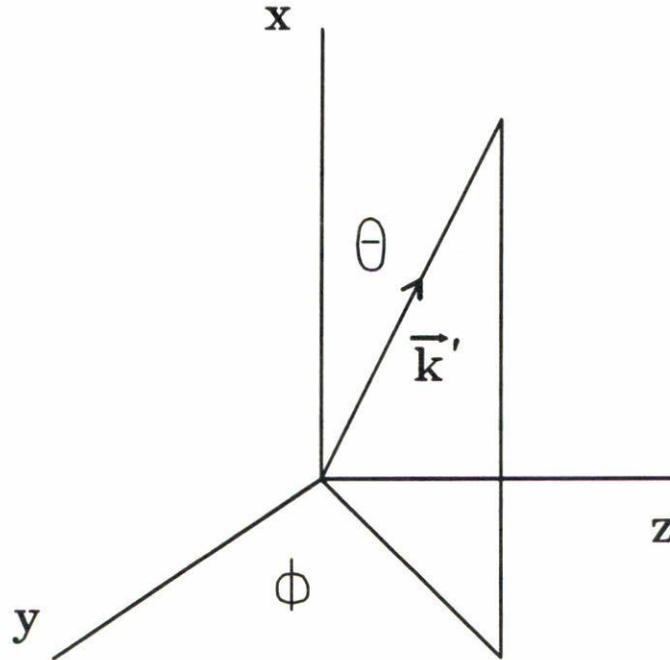


FIGURA 1. Sistema de coordenadas utilizado en los cálculos relacionados con el coeficiente de reflexión.

Para el cálculo del coeficiente de retrodispersión se utilizó el modelo de Everhart [6] teniendo en cuenta la sección eficaz calculada. Para ello supongamos que incide un haz de  $N_0$  electrones que tiene una sección transversal  $S$  según la dirección  $x$  (Fig. 1), entonces el número de átomos presentes en un diferencial de volumen  $S dx$  es

$$dN = N_A \rho_m(\sigma) \frac{S dx}{A}, \tag{13}$$

donde  $N_A$  es el número de Avogadro,  $\rho_m$  es la densidad del sólido y  $A$  es el peso atómico.

Multiplicando la expresión (12) por  $dN$  y sustituyendo la ley Thomson-Whiddington [6],

$$v^4 = C \rho_m(\sigma)(R - X),$$

que establece el cambio de velocidad  $v$  del electrón con el camino recorrido en el sólido ( $x$ ), asumiendo  $C$  constante, obtenemos el diferencial de electrones dispersados desde una profundidad  $X$  ( $X = x/R$ , donde  $R$  es el alcance del electrón en el sólido) en la dirección  $(\theta, \phi)$ :

$$dN(X, \varphi, \theta, \sigma, \mathbf{q}) = \frac{\alpha N(X, \sigma) dX d\Omega}{4\pi(1 - X) \cos^4(\frac{\theta}{2})} \times \left( 1 - \frac{\rho(\sigma)}{(\gamma^2(\theta, X))} \left( 1 - T + 6\varepsilon_{\mathbf{q}\mathbf{q}} - \frac{4\varepsilon_{\mathbf{q}\mathbf{q}}(\gamma(\theta, X) - 1)}{\gamma(\theta, X)} \right) \right)^2, \tag{14}$$

donde

$$\gamma(\theta, X) = 1 + \beta^2(1 - X)^{\frac{1}{2}} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (15)$$

con

$$\alpha = \frac{\pi Z^2 e^4 N_A}{m^2 C A} \quad (16)$$

y

$$\beta = \frac{2\pi a m v_0}{h}; \quad (17)$$

$C$  es una constante [6] y  $v_0$  es la velocidad inicial del electrón. Como se demuestra por Everhart para un valor de  $C$  igual a la constante de Terrill, no se obtienen buenos resultados para la dependencia del coeficiente de reflexión, por lo que se debe utilizar el valor de  $\alpha$  reportado por el propio autor ( $\alpha = 0.045 Z$ ), que contiene un valor determinado implícito para  $C$  para cualquier estimación absoluta que se quiera realizar. Para los efectos de este trabajo no es necesario conocer los valores mencionados, pues los cálculos de las magnitudes bajo tensiones se presentan referidas al final a las sin tensiones.

Siguiendo el formalismo de Everhart se llega a una ecuación integral similar para  $N_0(X)$ , el número de electrones que llegan a una profundidad  $X$ :

$$N(X, \sigma) = N_0 - \int_0^X \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{2\pi} dN(X, \theta, \varphi, \sigma, q). \quad (18)$$

La solución de esta ecuación integral fue obtenida por el procedimiento de aproximaciones sucesivas hasta la primera aproximación, utilizando como aproximación nula la solución de Everhart. Este procedimiento fue programado en el sistema MATHCAD al igual que el resto de los cálculos. La obtención de una aproximación analítica es posible pero tediosa.

El coeficiente de reflexión dependiente de la dirección fue calculado según

$$r(\theta, \varphi, \sigma) = \int_0^{X_0} \frac{dN(X, \theta, \varphi, \sigma)}{N_0}, \quad (19)$$

donde  $X_0$  se determina por la ecuación

$$X_0(1 + \sec \theta) = 1, \quad (20)$$

la cual establece para  $\theta$  dado el valor  $X_0$  hasta el que se cumple la condición de escape del electrón en el sólido, es decir que el mismo escapa si su recorrido es menor o igual que el alcance  $R$ .

Integrando por  $(\theta, \phi)$  obtenemos el coeficiente de reflexión en función de las tensiones.

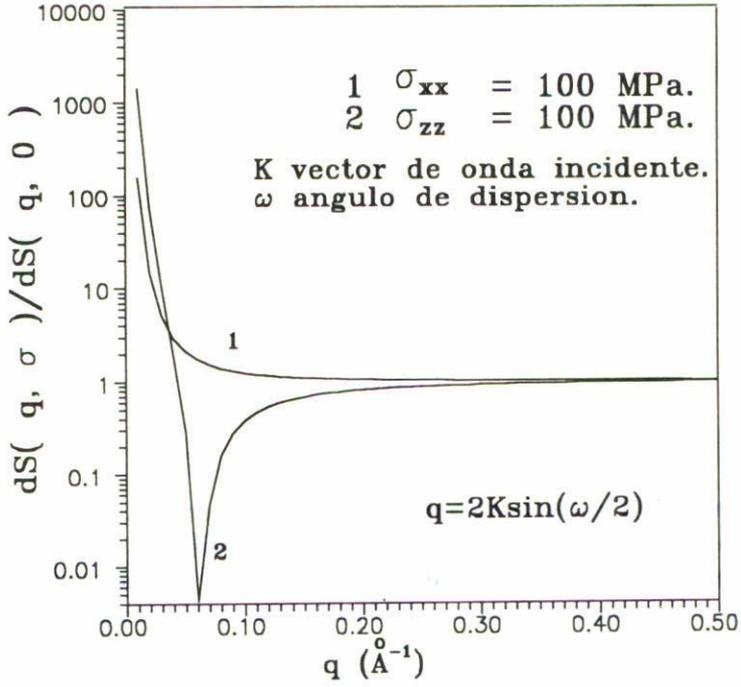


FIGURA 2. Dependencia del cociente entre las secciones eficaces, con y sin tensiones, en función de  $q$ .

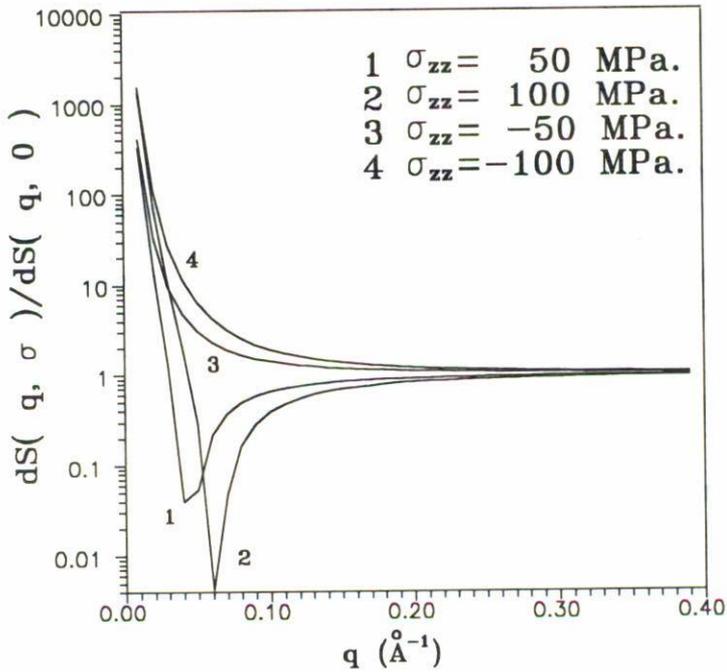


FIGURA 3. Dependencia del cociente entre las secciones eficaces en función de  $q$ , para distintos valores de tensiones.

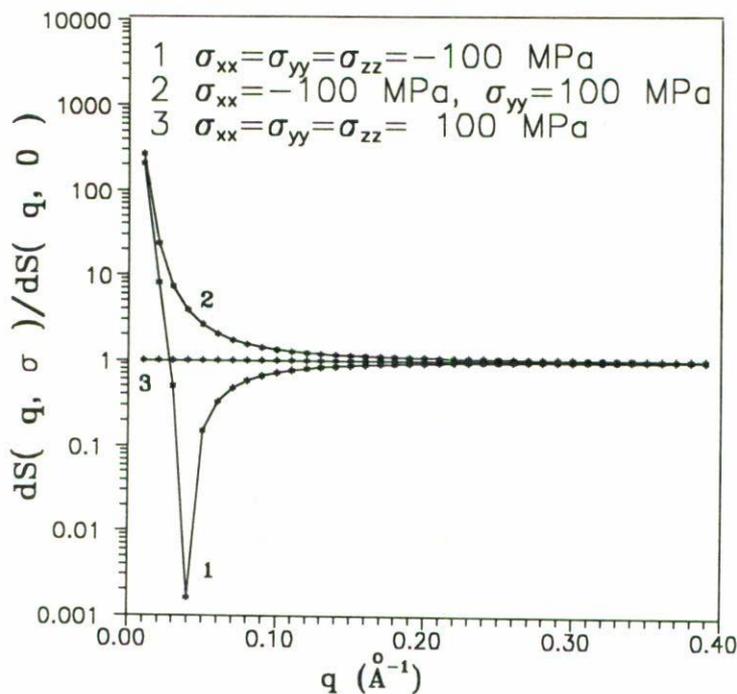


FIGURA 4. Dependencia del cociente entre las secciones eficaces en función de  $q$ , para diferentes estados tensionales.

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Las Figs. 2, 3 y 4 muestran ejemplos de la relación entre las secciones eficaces, con y sin tensiones, en función de  $q$ . Aquí la dirección de  $q$  está fija según la dirección del eje  $z$ . Existe una variación sistemática de la relación entre las secciones eficaces con los cambios del tensor de esfuerzos. Las dependencias tienen dos comportamientos bien definidos: uno es monótono decreciente y en el otro se alcanza un mínimo pronunciado. La magnitud del efecto crece a medida que aumentan las tensiones (Fig. 3). Puede observarse un efecto muy grande para valores de  $q$  entre 0 y  $0.1 \text{ \AA}^{-1}$ . Si suponemos la energía del electrón de unos 500 eV, para que se cumpla la aproximación de Born, el ángulo de dispersión para el que existe una variación muy grande de la relación entre las secciones eficaces está entre  $0$  y  $0.5^\circ$ . Para valores de  $q$  de alrededor de  $1 \text{ \AA}^{-1}$  aún se tienen variaciones de un .2 por ciento en los valores de la relación de la secciones eficaces.

De ser cierto el modelo, estas variaciones serían medibles. Podrían hacerse experimentos, utilizando un microscopio de electrones de transmisión, por ejemplo, que permitirían comprobar el modelo o encontrar el cambio del factor de forma atómico con las tensiones.

Por otro lado, las Figs. 5, 6 y 7 son ejemplos de la dependencia encontrada para el coeficiente de reflexión relativo en función de la dirección y de las tensiones para el caso del hierro. En este caso  $\phi$  está fijo en  $90^\circ$ , la energía en 500 eV y el valor de  $\alpha$  es  $0.045 Z$  (según Everhart). El cambio relativo del coeficiente de reflexión, con y sin tensiones, sufre variaciones que no sólo son dependientes de la magnitud de las tensiones sino también de

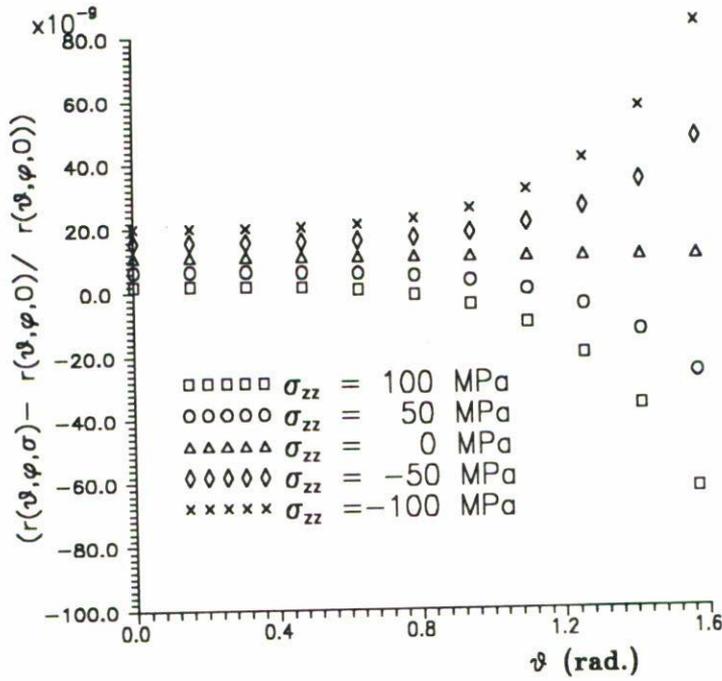


FIGURA 5. Variación del coeficiente de reflexión relativo, según diferentes direcciones, con las tensiones.

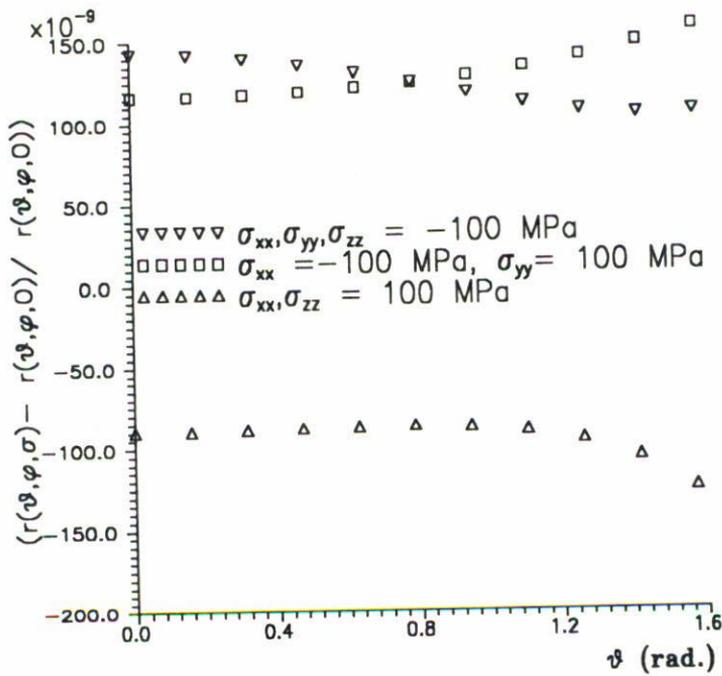


FIGURA 6. Variación del coeficiente de reflexión relativo, según diferentes direcciones, para distintos estados tensionales.

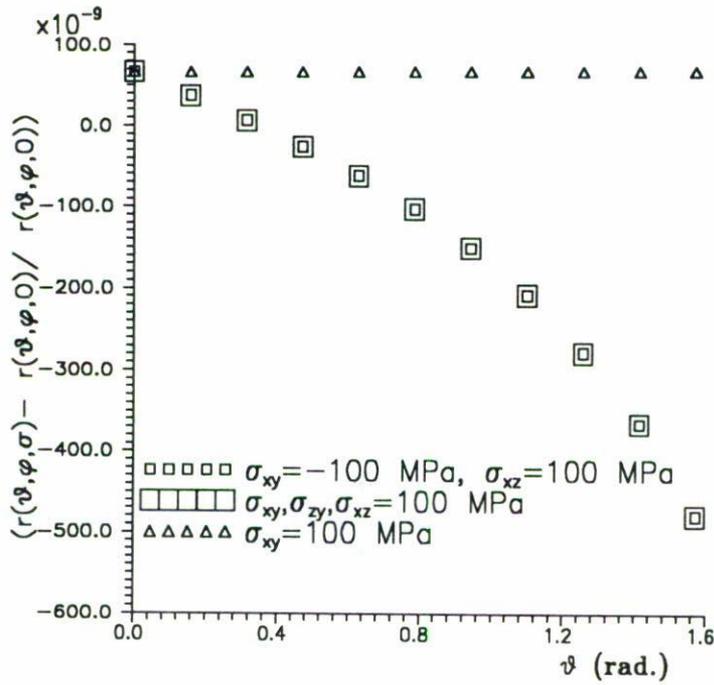


FIGURA 7. Variación del coeficiente de reflexión relativo, según diferentes direcciones, para distintos estados tensionales.

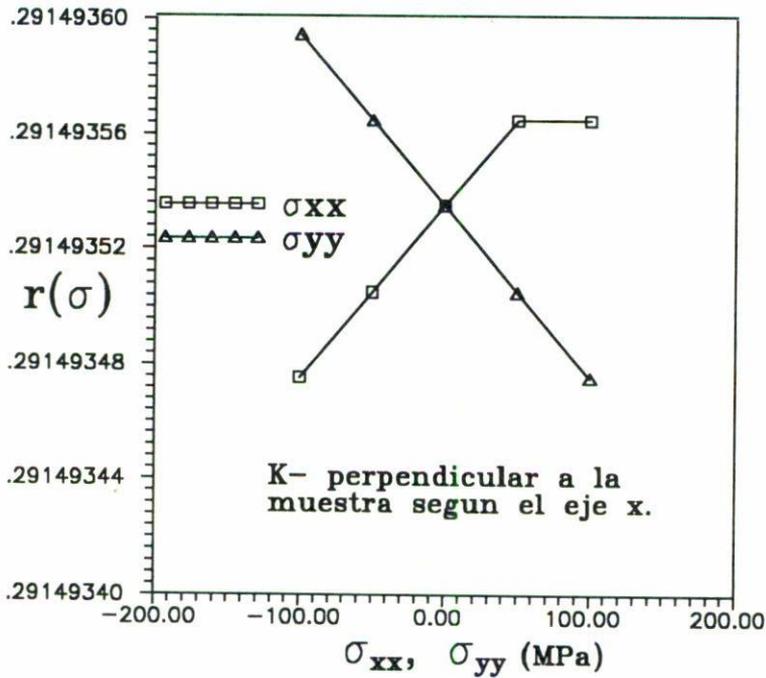


FIGURA 8. Dependencia del coeficiente de reflexión completo de las tensiones.

la configuración de las mismas. Como puede observarse se ven variaciones muy pequeñas, estando éstas en el orden de  $10^{-9}$ – $10^{-7}$ .

En el caso del coeficiente de reflexión en función de las tensiones se predice un efecto también muy débil (Fig. 8).

Los cálculos realizados predicen que no hay dependencia del coeficiente de reflexión con las variaciones de la densidad de la muestra en ninguno de los casos.

El efecto de la aproximación contenida en el modelo de Everhart, de sólo considerar las reflexiones de primer orden, se ve minimizado en estos cálculos al utilizar el valor de  $\alpha$  ajustado a los valores experimentales por el mismo autor. Puesto que este valor es constante para  $Z$  dado, el mismo desaparece al calcular la relación entre la sección eficaz y el coeficiente de reflexión del sólido bajo tensiones y las correspondientes magnitudes en el sólido sin tensiones.

Los cálculos realizados subestiman los valores de la sección eficaz y del coeficiente de reflexión al no tenerse en cuenta el principio de indistinguibilidad de las partículas. La aplicación de este principio genera una simetrización de la sección eficaz de dispersión [4] que provocaría, en este caso, un aumento de la probabilidad de dispersión a ángulos mayores que  $90^\circ$  y por lo tanto aumentaría también el coeficiente de reflexión.

#### 4. CONCLUSIONES

Se desarrolló un modelo teórico sencillo de la dependencia de la sección eficaz de dispersión elástica de un electrón por un átomo, así como del coeficiente de retrodispersión de las tensiones mecánicas.

Se encontró un cambio sistemático de la relación entre las secciones eficaces, con y sin tensiones, con las variaciones del tensor de esfuerzos. La relación entre la sección eficaz, con y sin tensiones, muestra grandes cambios con las tensiones para valores pequeños del vector de transferencia de impulso. Los cambios más notables se encontraron para valores de  $q$  entre 0 y  $0.1 \text{ \AA}^{-1}$ . Para valores de  $q$  de alrededor de  $1 \text{ \AA}^{-1}$ , la relación toma valores del orden de .2 por ciento.

El coeficiente de reflexión relativo a la dependencia de la dirección y de las tensiones, se encuentra en el orden de  $10^{-7}$  a  $10^{-9}$ ; que son de muy pequeña magnitud. La variación del coeficiente de reflexión con las tensiones es también muy pequeña.

El modelo es susceptible de mejorarse utilizando datos experimentales del comportamiento de la sección eficaz con las tensiones, empleando otras formas de cálculo del coeficiente de retrodispersión (por ejemplo utilizando el método de Monte Carlo), así como teniendo en cuenta el principio de indistinguibilidad de las partículas.

#### REFERENCIAS

1. M.R. James and O. Buck, *Crit. Rev. Solid. St. Matter. Sci.* **9** (1980) 61.
2. L. Mordfin, *Residual Stress for Designers and Metallurgists*, ASM (1981), 189.
3. L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics*, Vol. 3, Pergamon Press (1965).
4. A.S. Davidov, *Quantum Mechanics*, Editorial Rev, La Habana (1965).
5. L.D. Landau y E.M. Lifshitz, *Curso de Física Teórica*, Vol. 7, Editorial Reverté, Madrid (1969).
6. T.E. Everhart, *J. Appl. Phy.* **31**, 8 (1960) 1483.
7. M. Krasnov, *Ecuaciones Integrales*, Editorial Mir, Moscú (1982).