

01.83.02

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
NO 1	NO 1983

MOVIMIENTO DE PARTICULAS ATOMICAS
CORRELACIONADAS EN SOLIDOS AMORFOS

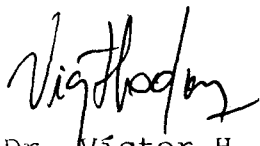
M.M. JAKAS

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº	AÑO 1983

01.83.02

MOVIMIENTO DE PARTICULAS ATOMICAS CORRELACIONADAS
EN SOLIDOS AMORFOS

Tesis presentada ante el Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, República Argentina, para optar al título de Doctor en Física.



Dr. Víctor H. Ponce
Asesor Científico



Lic. Mario M. Zukas
Doctorando

San Carlos de Bariloche

1983

RESUMEN

El propósito de este trabajo es resolver dos tipos de problemas sobre la penetración de iones energéticos en sólidos amorfos por medio de la teoría de transporte. Ellos están caracterizados por el hecho que las soluciones exactas de sus ecuaciones de transporte son difíciles de obtener, por lo tanto debemos recurrir a funcionales variacionales para mejorar los resultados si utilizamos soluciones aproximadas. Aquellos problemas son: la retrodispersión de Rutherford anómala y la transmisión de moléculas diatómicas a través de láminas delgadas. En el primero de ellos la dificultad surge de la correlación entre las dispersiones que existe para aquellos iones que son retrodispersados con ángulos de dispersión cercanos a los 180° y vuelven hacia el vacío por casi la misma trayectoria que atravesaron en el camino de entrada. En el segundo, el principal problema lo constituye la repulsión Coulombiana entre los fragmentos moleculares y la dispersión múltiple las que no pueden ser tratadas simultáneamente; al menos de una manera simple.

El Capítulo 1 contiene una breve introducción a las funcionales variacionales aplicadas a problemas de transporte, los Capítulos 2 y 3 están estructurados de la misma manera: luego de unas secciones donde se introducen los conceptos básicos y los más importantes mecanismos físicos involucrados, nosotros dedicamos un par de secciones a la derivación de la ecuación de transporte y a mostrar el camino seguido para obtener una solución aproximada la que luego se introduce en una adecuada funcional variacional. Finalmente, discutimos los resultados de nuestro cálculo y los comparamos con datos experimentales. Comentarios y conclusiones son ofrecidos al final de cada capítulo.

ABSTRACT

It is the aim of this work to solve two kinds of problems about energetic ions penetrating in solids by using transport theory. They are characterized by the fact that the exact solutions of their transport equations are difficult to obtain, therefore we have to resort to variational functionals in order to improve the results if approximate solutions are used. Those problems are : the Rutherford backscattering enhancement and the transmission of diatomic molecules through thin solid films. In the first of them, the difficulty arises from the scattering correlation that exists for those ions which backscatter at nearly 180° scattering angles and return to the vacuum through almost the same trajectory traversed in the incoming path. For the second, the main trouble is constituted by the Coulomb repulsion between the molecular fragments and the multiple scattering which can not be treated simultaneously , at least in a simple manner.

Chapter 1 contains a brief introduction to the variational functionals applied to transport problems , Chapters 2 and 3 are structured in the same fashion : after introductory sections where the basic concepts as well as the most important physical mechanisms involved are introduced , we dedicate a couple of sections to derive the transport equation and to show the way we follow to choose the approximate solution which afterwards is used into an appropriate variational functional. Finally, we discuss the results of our calculation and compare them with experimental data. Comments and conclusions are given at the end of each chapter.

INDICE

<u>Capítulo 1</u> : Métodos variacionales aplicados a problemas de transporte.....	1
Referencias.....	7
<u>Capítulo 2</u> : Retrodispersión de Rutherford anómala.	
I-Introducción :	
A.Retrodispersión de Rutherford: generalidades.....	8
B.Retrodispersión de Rutherford anómala.....	12
II-Planteo de la ecuación de transporte.....	16
III-Solución aproximada de la ecuación de transporte....	22
IV-Discusión de los resultados.....	28
V-Comentarios y conclusiones.....	38
Referencias.....	40
<u>Capítulo 3</u> : Transmisión de moléculas diatómicas en láminas delgadas.	
I-Introducción.....	41
II-Mecanismos más importantes en la transmisión de moléculas diatómicas.....	43
III-Planteo de la ecuación de transporte.....	53
IV-Solución aproximada de la ecuación de transporte....	57
V-Discusión de los resultados.....	62
VI-Conclusiones y comentarios.....	75
Referencias.....	76
<u>Apéndice 1</u>	77
<u>Apéndice 2</u>	78

En los dos capítulos siguientes que componen este trabajo nos ocuparemos de problemas diferentes pero que tienen en común la necesidad de resolver la ecuación de transporte para el movimiento de partículas en un medio inhomogéneo. La complejidad matemática que introduce esta característica del medio hace que si no deseamos invertir un gran esfuerzo en la búsqueda de las soluciones exactas, lo más apropiado aquí es intentar por el camino de las soluciones aproximadas. La cuestión es cómo podemos mejorar nuestros resultados a partir de soluciones no exactas del problema, o de otro modo, cómo pueden aquellas soluciones informarnos del error que están introduciendo y en tal caso corregirse a sí mismas. Las respuestas a estas preguntas las podemos encontrar en la teoría del cálculo de variaciones, la que pasaremos a reseñar en lo que sigue.

En su forma más general, la ecuación de transporte se puede escribir como sigue:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \hat{H}F = f \quad (1)$$

en donde F es la función de distribución en la posición y velocidad a lo largo del tiempo t para las partículas cuyos movimientos queremos seguir en un sentido probabilístico. \hat{H} es un operador, para nosotros lineal, que actúa sobre aquellas variables y depende de los procesos que gobiernan la dinámica de las partículas. f representa la distribución de fuentes de partículas en el medio.

Vamos a introducir ahora la ecuación de transporte adjunta:

$$-\frac{\partial F^+}{\partial t} + \hat{H}^+F^+ = g \quad (2)$$

en donde \hat{H}^+ es el operador adjunto de \hat{H} definido de la forma usual:

$$\int d\sigma G \hat{H}F = \int d\sigma F \hat{H}^+G \quad (3)$$

aquí do representa a todas las variables involucradas en el problema (tiempo, posición y velocidad), F y G son dos funciones cualesquiera. g es la función de distribución de fuentes del problema adjunto y por conveniencia la consideramos igual a otra función que se introducirá más adelante. Conviene también aclarar que F^+ no es la función adjunta de F sino la solución de la ecuación adjunta (2), en tal sentido, digamos que las funciones de distribución son todas reales de modo que la operación de adjuntar se limita a los operadores.

A modo de ayuda para la interpretación de F^+ , digamos que la solución de (2) corresponde a un problema de transporte que evoluciona hacia atrás en el tiempo, sus variables son las condiciones iniciales y el valor que toma F^+ es una medida de la probabilidad con que aquellas contribuyen a la población de los estados finales dado por g . Comparese con la interpretación que se le debe dar a F , esta es la probabilidad de encontrar un dado estado final cuando fueron dadas las condiciones iniciales según la distribución f .

Por conveniencia para la escritura, utilizaremos los símbolos:

$$\langle F, G \rangle = \int d\vec{n} d\vec{v} F G$$

$$(F, G) = \int dt \langle F, G \rangle$$

Supongamos ahora, que tenemos un problema de transporte dado por la Ec. (1), y su solución F la necesitamos solamente para calcular la cantidad:

$$(g, F) \tag{4}$$

Introduzcamos la funcional de Roussopoulos¹⁾:

$$\mathcal{F}_0[F, F^+] = (g, F) + (F^+, f) - (F^+, \overline{\frac{\partial}{\partial t} + \hat{H}} F) \tag{5}$$

Haciendo un poco de algebra se puede ver que las condiciones que

deben satisfacer F y F^+ para hacer de (5) un extremo son justamente las Ecs. (1) y (2). En efecto, si F' y F'^+ son dos funciones próximas a las soluciones exactas de (1) y (2) respectivamente :

$$F' = F + \delta F \quad (6)$$

$$F'^+ = F^+ + \delta F^+ \quad (7)$$

Introduciéndolas en (5) obtenemos:

$$\mathcal{F}_0[F', F'^+] = (g, F) + O(\delta F^+, \delta F) \quad (8)$$

En otras palabras, \mathcal{F}_0 resulta ser un extremo alrededor de las soluciones exactas de los problemas directo (1) y adjunto (2), y el valor que toma en ese punto es justamente la cantidad que queremos calcular (4). Como consecuencia inmediata de esto, tenemos que las soluciones aproximadas F' y F'^+ producen a través de la funcional (5) una estimación de (4) con un error del orden del producto de los errores con el que aproximamos cada una de ellas.

Si elegimos a F' y F'^+ sobre una clase dada de funciones que dependen de ciertos parámetros $\{\alpha_i\}$ y $\{\alpha_i^+\}$ respectivamente, la mejor estimación de (4) es aquella que se obtiene de reemplazar en \mathcal{F}_0 las aproximaciones F' y F'^+ cuyos parámetros son los que hacen :

$$\frac{\partial \mathcal{F}_0}{\partial \alpha_i} = \frac{\partial \mathcal{F}_0}{\partial \alpha_i^+} = 0 \quad ; \quad i = 1, 2, \dots \quad (9)$$

De la funcional \mathcal{F}_0 pueden derivarse otras. Si elegimos como espacio de soluciones aproximadas al conjunto de funciones $\{F'\}$ y $\{F'^+\}$ tales que difieren entre sí por un factor constante, llamemos cF' y $c^+F'^+$ a un representante de cada conjunto, introduciendo a estos en (5) y variando sobre c y c^+ para hacer de (5) un extremo, obtenemos :

$$\mathcal{F}_1[F', F'^+] = \frac{\langle F'^+, f \rangle \langle g, F' \rangle}{\langle F'^+, \overline{\frac{\partial}{\partial t} + \hat{H}} F' \rangle} \quad (10)$$

que es la conocida funcional de Schwinger²⁾ utilizada en problemas de colisiones atómicas.

Una generalización inmediata de la funcional \mathcal{F}_1 se obtiene de elegir F' y F'^+ sobre el conjunto de funciones que difieren en una función del tiempo $c(t)$ y $c^+(t)$ respectivamente. Derivemos esta nueva funcional para el caso en que tengamos las siguientes distribuciones de fuentes:

$$\begin{aligned} f(\vec{r}, \vec{v}, t) &= f(\vec{r}, \vec{v}) \delta(t) \\ g(\vec{r}, \vec{v}, t) &= g(\vec{r}, \vec{v}) \delta(t - t_0) \end{aligned} \quad (11)$$

Introduciendo (11) y las aproximaciones mencionadas en la funcional (5). Luego de extremar sobre c y c^+ resulta:

$$\mathcal{F}_2[F', F'^+] = \frac{\langle g, F' \rangle(t_0) \langle F'^+, f \rangle(0)}{\langle F'^+, F' \rangle(0)} \exp \left\{ - \int_0^{t_0} dt \frac{\langle F'^+, \overline{\frac{\partial}{\partial t} + \hat{H}} F' \rangle}{\langle F'^+, F' \rangle} \right\} \quad (12)$$

Si además F' satisface la condición de contorno exacta :

$$F'(\vec{r}, \vec{v}, t=0) = F(\vec{r}, \vec{v}, t=0) = f(\vec{r}, \vec{v}) \quad (13)$$

entonces en vez de (12) tenemos³⁾:

$$\mathcal{F}_2[F', F'^+] = \langle g, F' \rangle(t_0) \exp \left\{ - \int_0^{t_0} dt \frac{\langle F'^+, \overline{\frac{\partial}{\partial t} + \hat{H}} F' \rangle}{\langle F'^+, F' \rangle} \right\} \quad (14)$$

Para poder comparar, escribamos \mathcal{F}_0 y \mathcal{F}_1 para el caso en que valgan (11) y (13), así tenemos:

$$\mathcal{F}_0[F', F'^+] = \langle g, F' \rangle(t_0) - \int_0^{t_0} dt \langle F'^+, \overline{\frac{\partial}{\partial t} + \hat{H}} F' \rangle \quad (15)$$

$$\mathcal{G}_1[F', F^+] = \frac{\langle g, F' \rangle(t_0) \langle F^+, f \rangle(0)}{\langle F^+, f \rangle(0) + \int_0^{t_0} dt \langle F^+, \frac{\partial}{\partial t} + \hat{H} F' \rangle} \quad (16)$$

Vemos aquí que estas funcionales tienen varios aspectos en común. Todas contienen al término:

$$\langle g, F' \rangle(t_0)$$

que podemos interpretarlo como la aproximación de orden cero para la evaluación de $\langle g, F \rangle(t_0)$. Luego, en distintas formas aparecen términos de corrección en razón de que F' no es solución exacta de la ecuación (1) y todos ellos se anulan en el caso $F' = F$.

Sin duda alguna, el problema adicional que plantea la utilización de estas funcionales es que se requiere el conocimiento de una aproximación a la solución de la ecuación adjunta (2). Conviene entonces fijar con más precisión el significado del problema adjunto. El caso más fácil de interpretar es aquel en que

$$g(\vec{n}, \vec{v}, t) = \delta(\vec{n} - \vec{n}_0) \delta(\vec{v} - \vec{v}_0) \delta(t - t_0) \quad (17)$$

La solución de (2) en esta situación, representa la probabilidad de que una partícula en la posición \vec{n} y velocidad \vec{v} al tiempo $t < t_0$ se encuentre en \vec{n}_0 y \vec{v}_0 al tiempo t_0 . Más exactamente, la solución de la Ec.(2) con la condición de contorno (17) es la función de Green adjunta del problema. Recordemos también que:

$$G^+(\vec{n}, \vec{v}, t \rightarrow \vec{n}_0, \vec{v}_0, t_0) = G(\vec{n}_0, \vec{v}_0, t_0 \rightarrow \vec{n}, \vec{v}, t) \quad (18)$$

Luego la solución de (2) con cualquier condición de contorno se obtiene fácilmente a partir de la función de Green :

$$F^+ = \int d\sigma G^+ g \quad (19)$$

CAPITULO 1

"METODOS VARIACIONALES APLICADOS A PROBLEMAS DE TRANSPORTE"

El camino a seguir para obtener F'^+ puede ser entonces , encontrar una expresión aproximada para la función de Green directa G' , intercambiar los estados finales e iniciales para obtener G'^+ y luego integrar sobre las primeras , previa multiplicación por la distribución de fuentes del problema adjunto g :

$$F'^+ = \int d\sigma G'^+ g \quad (20)$$

Referencias

- 1) P.Roussopoulos, C.R.Acad.Sci.Paris, 236, 1858, (1953). Puede verse también en J.J.Duderstadt y N.R.Martin, Transport Theory, John Wiley & Sons Inc., N.Y. 1979 ; M.M.R.Williams, Mathematical Methods in Particle Transport Theory , Butterworth & Co. Ltd., London , 1970.
- 2) B.L.Moiseiwitsch , Variational Principles, John Wiley & Sons Ltd. , London , 1966.
- 3) Yu.N.Demkov , Sov.Phys.JETP, 11, 1351, (1960); M.Kleber, Physics of Electr. and Atom. Coll. , North Holland Publishing Co. 1982, pag.503; M.Kleber y J.Zwiegel, Phys.Rev. A19, 579, (1979).

CAPITULO 2

"RETRODISPERSION DE RUTHERFORD ANOMALA"

I - Introducción

A. Retrodispersión de Rutherford : generalidades.

Dado que nos ocuparemos de un fenómeno que fué observado en un montaje experimental diseñado para hacer análisis por retrodispersión de Rutherford, describiremos brevemente las características esenciales del mismo.

En la Fig. 1 tenemos un esquema del experimento : un haz bien colimado de iones seleccionados en masa y energía es utilizado para bombardear un blanco sólido . Generalmente se emplean iones de He^+ con energías cinéticas comprendidas entre los 0,5 y 2,0 MeV . Los iones que emergen de la superficie son colectados a un ángulo bien definido α_0 y analizados en energía.

A las velocidades con que se mueven estos iones dentro del material , se producen dispersiones múltiples a causa de la interacción de tipo Coulombiana entre el ión y los carozos nucleares de los átomos del blanco. La sección eficaz diferencial en ángulo de dispersión θ y por unidad de ángulo sólido es la conocida fórmula de Rutherford:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \left(\frac{z_1 z_2 e^2}{E} \right)^2 \sin^{-4}(\theta/2) \quad (1)$$

aquí $z_1 e$ y $z_2 e$ son las cargas nucleares del ión y del blanco respectivamente¹⁾, y E es la energía de la colisión. Las cantidades que aparecen en (1) están referidas al sistema del centro de masas , sin embargo por tratarse de iones livianos aquellas difieren muy poco de sus correspondientes en el sistema del laboratorio y podemos tomarlas como iguales. El comportamiento fuertemente anisotrópico de (1) es fundamental para el experimento . Por ejemplo , calculemos: Λ , el camino medio recorrido entre dos colisiones con ángulo de dispersión mayor que θ_0 de la siguiente manera :

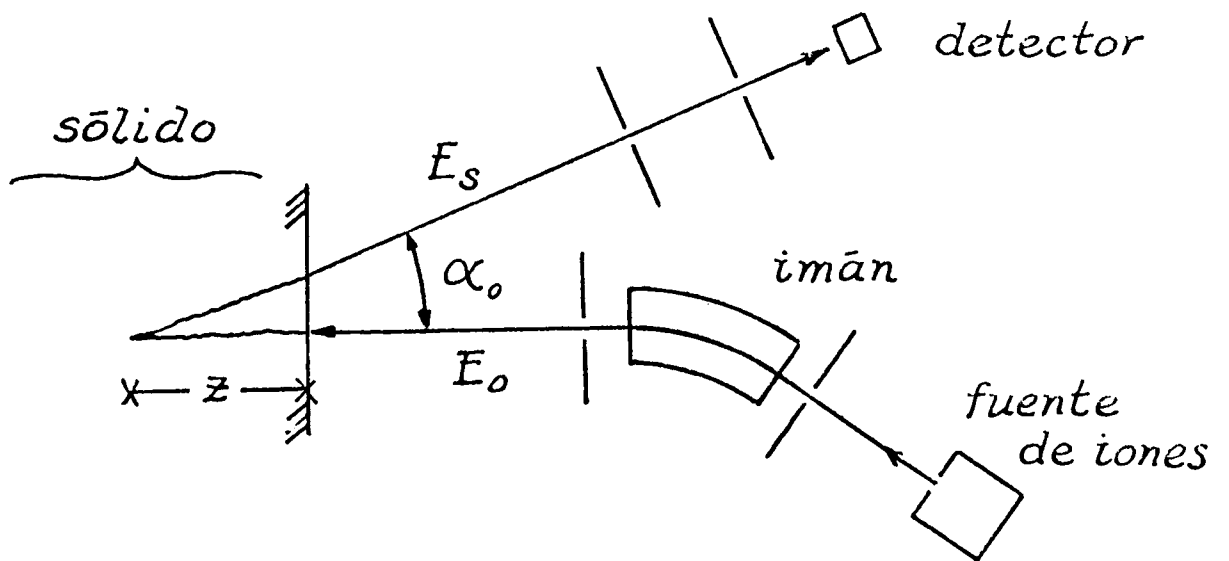


Fig. 1 : representación esquemática de un equipo diseñado para hacer análisis por retrodispersión de Rutherford.

$$\Lambda^{-1}(\theta_0) = \frac{2\pi N}{1 + \cos \theta_0} \int_{\theta_0}^{\pi} d\theta \sin \theta \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) \quad (2)$$

donde N es la densidad atómica del blanco . Hemos dividido por $1 + \cos \theta_0$ para no introducir en Λ una dependencia con el ángulo θ_0 que sólo es consecuencia de variaciones en el intervalo de integración . Para el caso de 800 keV He^+ sobre Cu , (2) resulta :

$$\Lambda(\theta_0) = 3,34 \cdot 10^6 \cdot (1 - \cos \theta_0) [\text{Å}] \quad (3)$$

Calculamos algunos valores para Λ y lo mostramos en la Tabla 1.

θ_0 (°)	0,5	1,0	5,0	20,	90,	150,
$\Lambda(\theta_0)[\text{Å}]$	127,	508,	$1,3 \cdot 10^4$	$2,0 \cdot 10^5$	$3,3 \cdot 10^6$	$6,2 \cdot 10^6$

Tabla 1

Vemos allí que la producción de un ángulo de dispersión grande, en particular como aquellos necesarios para que el ión se vuelva hacia la superficie son eventos muy raros . Esto justifica la trayectoria que hemos propuesto para el ión en la Fig. 1 : durante el camino de entrada y de salida la partícula sigue una trayectoria casi rectilínea y el cambio en la dirección más importante es consecuencia de una sola colisión con ángulo de dispersión igual a $\pi - \alpha_0$. Bajo estas condiciones , la longitud total recorrida l y la profundidad z alcanzada por el ión están unívocamente determinadas :

$$l = z \cdot (1 + 1/\cos \alpha_0) \quad (4)$$

Por otra parte el ión pierde energía en forma casi continua durante el pasaje por el sólido y en cantidad proporcional a la longitud del camino recorrido , por lo tanto durante el camino de entrada y de salida se pierde en promedio una cantidad de energía ΔE :

$$\Delta E = \int_0^l dR \left| \frac{dE}{dR} \right| \sim l \left| \frac{dE}{dR} \right| \quad (5)$$

donde $\left| \frac{dE}{dR} \right|$ es la pérdida media de energía por unidad de camino recorrido o poder de frenamiento del ión en el material que se trate. Además de (5) existe una pérdida de energía adicional en la colisión de retrodispersión , si despreciamos efectos inelásticos ésta es :

$$\Delta E_{\alpha_0} = \frac{4 M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} E \sin^2 \left(\frac{\pi - \alpha_0}{2} \right) \quad (6)$$

donde M_1 y M_2 son las masas del proyectil y del blanco respectivamente, y E es la energía del proyectil antes de la colisión. Finalmente , si E_0 es la energía inicial de los iones , la energía final E_s viene dada por la expresión:

$$E_s \simeq E_0 - l \left| \frac{dE}{dR} \right| - \Delta E_{\alpha_0} \quad (7)$$

Lo que nos enseña la Ec.(7) , es que midiendo la energía de salida E_s podemos saber qué profundidad ha alcanzado el ión así como también cuál es la especie atómica que ha causado la retrodispersión.

para completar , tenemos que el número de iones retrodispersados dentro de un dado intervalo de ángulo de observación y energía final viene dado por la ecuación:

$$dn \simeq N \cdot \frac{d\sigma}{d\Omega} (\pi - \alpha_0) \cdot \frac{\Delta E_s \cdot \Delta \Omega_0}{\left| \frac{dE}{dR} \right|} \quad (8)$$

donde ΔE_s y $\Delta \Omega_0$ son las resoluciones de energía y ángulo respectivamente del sistema de detección.

Con lo que hemos dicho , pueden comprenderse las posibilidades que este experimento ofrece como técnica de análisis de materiales . Por cierto no continuaremos discutiendo aquí otros detalles del mismo los que podrán encontrarse en trabajos más específicos ^{2,3)} . Nuestro propósito es simplemente poder interpretar los rasgos esenciales de un espectro de retrodispersión , como p. ej. el que tenemos en la Fig. 2 los puntos que corresponden al detector de gran aceptación angular. En esta figura la escala de energía ha sido convertida a profundidad de retrodispersión por medio de las Ecs. (4) y (7) . Las partículas retrodispersadas en las proximidades de la superficie son aquellas que emergen con la mayor energía posible: $E_0 - \Delta E \alpha_s$, y así sucesivamente. Por otro lado , la intensidad del conteo nos informa de la densidad de centros dispersores como se desprende de la Ec.(8) , en el caso de la Fig. 2 y para los puntos mencionados el conteo es casi constante por tratarse de un blanco elementalmente simple y homogéneo. El crecimiento en el conteo hacia espesores mayores proviene del aumento de la sección eficaz (1) con la degradación de la energía de los iones.

B. Retrodispersión de Rutherford anómala.

El fenómeno que nos interesa estudiar consiste en un aumento en el número de retrodispersados desde las primeras capas atómicas ($\sim 300 \text{ \AA}$) cuando el ángulo de observación α_0 es muy pequeño ($\alpha_0 \lesssim 0,5^\circ$) . Estas características exigen un montaje experimental muy especial para poder conseguir una alta resolución angular y probablemente sea esta la razón por la cual esta anomalía pasó inadvertida durante tanto tiempo de desarrollo y aplicación de la técnica de retrodispersión de Rutherford . En la Fig. 2 vemos los espectros obtenidos por Pronko et al ⁴⁾ para 800 keV He^+ sobre un blanco de Cu y para los casos de ángulos de observación $\alpha_s = 0^\circ \pm 0,2^\circ$ y $0^\circ \pm 4,5^\circ$. Como puede verse , el efecto tiene lugar solamente para ángulos de observación muy próximos a 0° así como en un rango de

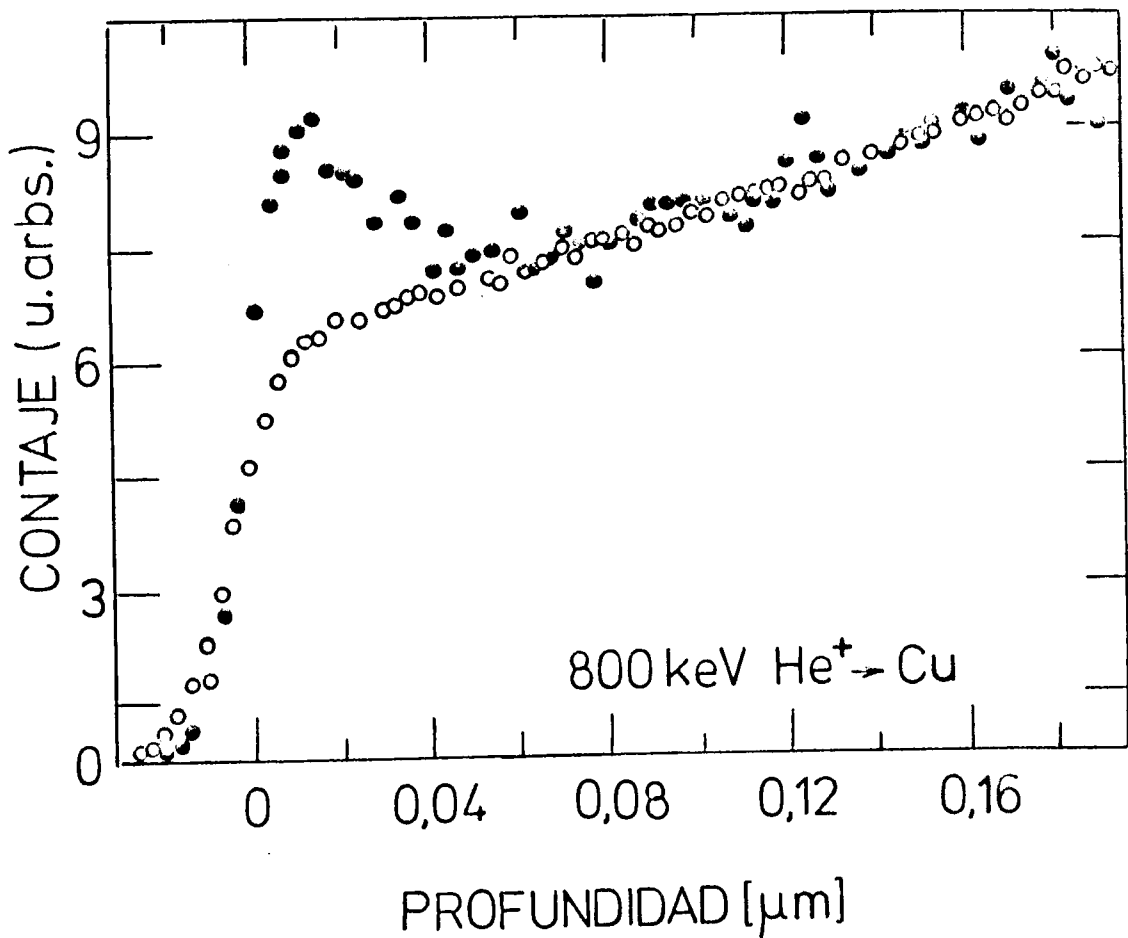


Fig. 2 : Espectro de retrodispersión de Rutherford para iones de He⁺ a 800 keV sobre un blanco de Cu policristalino (de granos muy pequeños) . Angulo de observación : $\alpha_0 = 0^\circ$ y resoluciones angulares de ● : $0,2^\circ$ y ○ : $4,5^\circ$ respectivamente. Datos de la Ref. 4.

profundidades bien definidas . Cabe decir que en aquellas mediciones se aseguraron de no tener efectos de canalización como ocurre con blancos cristalinos y producen espectros semejantes ^{2 3)} .

El efecto puede ser explicado en términos de la correlación que existe entre las dispersiones angulares durante el camino de entrada y el de salida para aquellos iones que emergen próximos a la dirección del haz. Así es que por medio de simulaciones numéricas ^{5,6)} se consigue reproducir los rasgos sobresalientes de los resultados experimentales contenidos en el trabajo de Pronko, sin otros ingredientes que las colisiones de tipo elástico entre los iones y los átomos del blanco y las eventuales correlaciones en las dispersiones cuando se trata de iones que colisionan con el mismo átomo durante la entrada y luego a la salida . Más recientemente , Oen ⁷⁾ ha hecho un estudio de este efecto por medio de un modelo de colisión con dos átomos: uno causante de la retrodispersión y otro ubicado entre la superficie y el primero y con el cual se interactúa débilmente en dos ocasiones ; durante la entrada y la salida . En él se resume toda la historia del ión durante su pasaje por el sólido y los resultados son satisfactorios.

Nosotros en cambio , mostraremos aquí cómo puede aplicarse la teoría de transporte para describir este problema . En la siguiente sección derivaremos la ecuación de transporte que gobierna el movimiento de partículas que entran en un medio sólido amorfo y luego de la colisión de retrodispersión vuelven a la superficie por caminos cercanos a los seguidos durante la entrada. El tratamiento está basado en la reversibilidad de las trayectorias que permite suponer que en vez de una partícula que entra y luego sale retrodispersada tenemos dos partículas que emergen de un mismo punto a la profundidad de retrodispersión y que no interactúan entre sí. En la Sec.III, la ecuación de transporte es resuelta en forma aproximada y se utiliza una de las funcionales variacionales presentadas en el capítulo anterior para mejorar los resultados. Reemplazando la ley de dispersión por expresiones conocidas en la literatura , llegamos a

que el problema puede describirse en términos de variables adimensionales que simplifican notablemente el estudio del efecto en cuanto a su dependencia con la energía de bombardeo y la naturaleza del proyectil y del blanco respectivamente. En la siguiente sección se comparan los resultados con los experimentos y finalmente , se ofrecen algunos comentarios y conclusiones en la Sec.V .

II - Planteo de la ecuación de transporte

En la Fig. 3, tenemos un esquema de la trayectoria típica de un ión retrodispersado desde una profundidad z_0 y con una velocidad a la salida \vec{v}_0 tal que forma un ángulo α_0 respecto a la dirección del haz. Si despreciamos la pérdida de energía y efectos tales como el desplazamiento de los átomos del blanco, entonces el movimiento del ión es completamente reversible y el problema puede tratarse como si fuesen dos partículas que salen del mismo punto en $z = 0$, con velocidades $-\vec{v}$ y \vec{v}' respectivamente, y que se mueven sin interactuar entre sí. Llamemos $(z_i, \vec{\rho}_i, v_{zi}, \vec{v}_{\rho i})_{i=1,2}$ a las posiciones y velocidades de las partículas en un sistema de coordenadas de tipo cilíndrico. Como las dispersiones angulares en general son muy pequeñas y despreciamos la pérdida de energía, entonces podemos suponer:

$$v_{z1} \sim v_{z2} \sim v_0 \quad (9)$$

sí como

$$|\vec{v}_{\rho i}| / v_0 \ll 1 \quad ; \quad i = 1, 2 \quad (10)$$

La condición (9) determina que las posiciones a lo largo del eje 'z' están unívocamente determinadas por el tiempo t transcurrido desde la partida en $z = 0$ por las igualdades:

$$z_1 = z_2 = v_0 t$$

De esta forma la distribución de probabilidad para las partículas 1 y 2 está completamente determinada por la función:

$$F(z, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2) \quad (11)$$

De aquí en más omitiremos el subíndice ρ en las velocidades por ser esto innecesario.

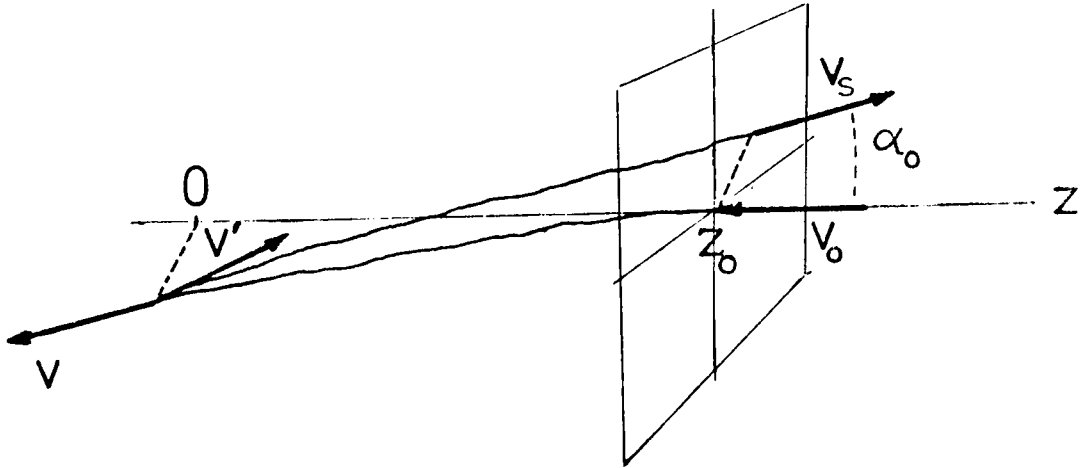


Fig. 3 Esquema de la trayectoria de un ión retrodispersado desde la profundidad z_0 ; donde v_0 es la velocidad inicial y v_s es la velocidad de salida, así como v y v' son las velocidades inmediatamente antes y después de la colisión de retrodispersión respectivamente.

La ecuación de transporte que obedece la función F la obtenemos por el procedimiento usual del balance probabilístico :

$$F(z+\delta z, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2) = \delta z \cdot N \int d\vec{p} F(z, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{v}_1 - v_0 \vec{\phi}_1, \vec{v}_2 - v_0 \vec{\phi}_2) + \quad (12)$$

$$+ (1 - \delta z \Sigma) \cdot F(z, \vec{\rho}_1 - \delta z \frac{\vec{v}_1}{v_0}, \vec{\rho}_2 - \delta z \frac{\vec{v}_2}{v_0}, \vec{v}_1, \vec{v}_2)$$

aquí :

$$\Sigma = N \int d\vec{p}$$

es la sección total de dispersión , donde \vec{p} es el parámetro de impacto relativo a una de las partículas, y $\vec{\phi}_1$ y $\vec{\phi}_2$ son los ángulos de dispersión para la partícula 1 y 2 respectivamente. Tanto \vec{p} como $\vec{\phi}_1$ y $\vec{\phi}_2$ son vectores perpendiculares a la dirección 'z' y además supondremos que $|\vec{\phi}_i| \ll 1; i=1,2$, como ciertamente ocurre para la mayoría de las colisiones a la velocidad de nuestros proyectiles. Lo que hacemos es equivalente a descomponer el material en láminas delgadas , perpendiculares al eje 'z' y de espesores δz . Dentro de cada lámina solamente puede haber un centro dispersor y el cambio en la dirección tiene que quedar definido dentro de ella . Desarrollando (12) en serie de potencias de δz y quedándonos con el primer término no nulo , obtenemos:

$$\frac{\partial F}{\partial z} + \frac{\vec{v}_1}{v_0} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{\rho}_1} + \frac{\vec{v}_2}{v_0} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{\rho}_2} = \quad (13)$$

$$= N \int d\vec{p} [F(z, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{v}_1 - v_0 \vec{\phi}_1, \vec{v}_2 - v_0 \vec{\phi}_2) - F(z, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2)]$$

Como en el experimento sólo interesan las coordenadas re-

lativas , haremos el siguiente cambio de variables :

$$\begin{aligned} \vec{\rho} &= \vec{\rho}_2 - \vec{\rho}_1 & ; & \quad \vec{v} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1 \\ \vec{R} &= \vec{\rho}_2 + \vec{\rho}_1 & ; & \quad \vec{V} = \vec{v}_2 + \vec{v}_1 \end{aligned} \quad (14)$$

De modo que: $F(z, \vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2, \vec{v}_1, \vec{v}_2) \rightarrow F(z, \vec{\rho}, \vec{R}, \vec{v}, \vec{V})$
y en vez de la Ec.(13) tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial z} + \frac{\vec{v}}{v_0} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{\rho}} + \frac{\vec{V}}{v_0} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{R}} &= \\ &= N \int d\vec{\rho} \left\{ F[z, \vec{\rho}, \vec{R}, \vec{v} - v_0(\vec{\phi}_2 - \vec{\phi}_1), \vec{V} - v_0(\vec{\phi}_2 + \vec{\phi}_1)] - F(z, \vec{\rho}, \vec{R}, \vec{v}, \vec{V}) \right\} \end{aligned} \quad (15)$$

integrando en \vec{R} y \vec{V} , y llamando :

$$F(z, \vec{\rho}, \vec{v}) = \int d\vec{R} d\vec{V} F(z, \vec{\rho}, \vec{R}, \vec{v}, \vec{V})$$

tenemos :

$$\frac{\partial F}{\partial z} + \vec{v} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{\rho}} = N \int d\vec{\rho} [F(z, \vec{\rho}, \vec{v} - v_0 \Delta \vec{\phi}) - F(z, \vec{\rho}, \vec{v})] \quad (16)$$

donde: $\Delta \vec{\phi} = \vec{\phi}_2 - \vec{\phi}_1$ (17)

Para la condición de contorno de F podemos tomar aquella correspondiente a una fuente de pares de partículas que emergen del mismo punto y con todas las velocidades relativas igualmente posibles. Vale decir:

$$F(z=0, \vec{\rho}, \vec{v}) = \delta(\vec{\rho}) \quad (18)$$

La condición (18) está plenamente justificada por que la sección eficaz de dispersión de Rutherford es aproximadamente isotrópica para grandes ángulos , que son los que interesan para la retrodispersión. Para completar la derivación de la

ecuación de transporte , introduzcamos el vector : $\vec{\alpha} = \frac{\vec{v}}{v_0}$,
con esta variable la Ec.(16) se puede escribir :

$$\frac{\partial F}{\partial z} + \vec{\alpha} \frac{\partial F}{\partial \vec{p}} = N \cdot \int d\vec{p}' [F(z, \vec{p}', \vec{\alpha} - \Delta\vec{\phi}) - F(z, \vec{p}, \vec{\alpha})] \quad (19)$$

$$F(z=0, \vec{p}, \vec{\alpha}) = \delta(\vec{p})$$

El flujo de partículas retrodispersadas desde un dado espesor se obtiene de F integrando sobre todas las separaciones relativas :

$$\varphi(z, \vec{\alpha}) = \int F(z, \vec{p}, \vec{\alpha}) d\vec{p} \quad (20)$$

La función φ es por lo tanto el objeto de nuestro cálculo.

Obsérvese que la ecuación (19) es similar a aquélla de dispersiones múltiples excepto que ahora el ángulo de dispersión $\Delta\vec{\phi}$ depende de la coordenada relativa \vec{p} , en efecto recordemos que :

$$\Delta\vec{\phi} = \vec{\phi}_2 - \vec{\phi}_1 = \vec{\phi}(\vec{p} - \vec{p}') - \vec{\phi}(\vec{p}) \quad (21)$$

Las soluciones de (19) cuando se trata del movimiento de una sola partícula , es decir cuando en vez de $\Delta\vec{\phi}$ tenemos solo $\vec{\phi}$, ha sido objeto de una extensa investigación durante las últimas décadas , en particular durante la pasada se unificó el tratamiento del problema para un gran número de pares proyectil-blanco y sobre un amplio rango de energías gracias a la utilización de potenciales interatómicos basados en los modelos estadísticos para los electrones atómicos⁸⁻¹⁰⁾ .

$\Delta\vec{\phi}$ posee una dependencia en \vec{p} que introduce ahora una complicación importante para la solución de (19) y a su vez es la causa de la anomalía observada en la retrodispersión.

Un análisis cualitativo de la Ec.(19) permite ver cómo suceden las cosas.

i- Si \vec{p} es suficientemente grande entonces $\Delta\vec{\phi}$ toma

valores diferentes de cero en dos regiones de parámetros de impactos bien separadas , estas son:

$$1: \vec{p} \sim 0 \quad \text{y} \quad 2: \vec{p} \sim -\vec{\xi}$$

En efecto, la ley de dispersión $\vec{\phi}(\vec{p})$ en general se comporta de forma que $|\vec{\phi}(\vec{p})| \neq 0$ solamente en una cierta región de parámetros de impactos $|\rho| \leq \rho_0$ y fuera de ella $\phi \rightarrow 0$; por lo tanto si $|\vec{\xi}| \gg \rho_0$ entonces solamente uno de los ángulos de dispersión por vez puede ser distinto de cero en $\Delta\vec{\phi}$, y esto ocurre en las regiones 1 y 2 mencionadas arriba. El término de colisión :

$$N \int d\vec{p} [F(z, \vec{p}, \vec{\alpha} - \Delta\vec{\phi}) - F(z, \vec{p}, \vec{\alpha})]$$

se puede descomponer en sus dos contribuciones:

$$N \int_{\rho \sim 0} d\vec{p} \cdot [\quad] \quad + \quad N \int_{\vec{p} \sim -\vec{\xi}} d\vec{p} [\quad]$$

cada una en general diferente de cero . Este caso representa el movimiento de dos partículas distanciadas en tal forma que sus dispersiones angulares no guardan ninguna relación.

ii- Si $\rho = 0$ entonces $\Delta\phi = 0$ para cualquier parámetro de impacto y el término de colisión se anula . Esto significa que las partículas viajarán juntas sin que las dispersiones puedan cambiar esta situación . La correlación es total.

Para el caso $|\rho| \lesssim \rho_0$ el término de colisión puede tomar valores comprendidos entre cero y aquél del caso i- ($\xi \gg \rho_0$) , como veremos más adelante , lo que ocurre en este rango intermedio es que las colisiones producen, en promedio, un 'enfocamiento' sobre las direcciones de las partículas y cuyo efecto es el de 'atraer' a aquellas que se mueven próximas, como resultado de lo cual se produce un aumento en el número de partículas con $\alpha \sim 0$.

En la siguiente sección nos ocuparemos de la solución de la Ec. (19).

III - Solución aproximada de la ecuación de transporte.

La ecuación de transporte que nos ocupa es la siguiente:

$$\frac{\partial F}{\partial z} + \vec{\alpha} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{\rho}} = N \int d\vec{p} [F(z, \vec{\rho}, \vec{\alpha} - \vec{\Delta p}) - F(z, \vec{\rho}, \vec{\alpha})] \quad (22)$$

con la condición de contorno:

$$F(z=0, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) = \delta(\vec{\rho}) \quad (23)$$

Para resolver (22) es conveniente introducir la transformada de Fourier:

$$\bar{F}(z, \vec{q}, \vec{k}) = (2\pi)^{-4} \int d\vec{\alpha} d\vec{\rho} e^{i\vec{\rho} \cdot \vec{q} + i\vec{\alpha} \cdot \vec{k}} F(z, \vec{\rho}, \vec{\alpha}) \quad (24)$$

Multiplicando en ambos miembros de (22) por: $\exp(i\vec{\rho} \cdot \vec{q} + i\vec{\alpha} \cdot \vec{k})$ e integrando sobre $\vec{\alpha}$ y $\vec{\rho}$, obtenemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{F}}{\partial z} - \vec{q} \cdot \frac{\partial \bar{F}}{\partial \vec{k}} &= -2N\sigma_0(\vec{k})\bar{F} + \\ &+ \frac{N}{(2\pi)^2} \int d\vec{q}' \bar{F}(z, \vec{q}', \vec{k}) |f(\vec{q}-\vec{q}', \vec{k})|^2 \end{aligned} \quad (25)$$

con la condición de contorno :

$$\bar{F}(z=0, \vec{q}, \vec{k}) = (2\pi)^{-2} \delta(\vec{k}) \quad (26)$$

y donde :

$$\sigma_0(\vec{k}) = \int d\vec{p} (1 - e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}) \quad (27)$$

$$f(\vec{q}, \vec{k}) = \int d\vec{p} (1 - e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}}) e^{-i\vec{p} \cdot \vec{q}} \quad (28)$$

Digamos que la solución de la Ec.(22) nos interesa para obtener la distribución angular en función de la profundidad (20) :

$$\varphi(z_0, \vec{\alpha}_0) = \int d\vec{\rho} F(z_0, \vec{\rho}, \vec{\alpha}_0) = (2\pi)^{-2} \int d\vec{k} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\alpha}_0} \bar{F}(z_0, \vec{q}=0, \vec{k})$$

Quién con la notación de producto escalar introducida en el Capítulo 1 podemos escribirla como sigue ¹¹⁾ :

$$\varphi(z_0, \vec{\alpha}_0) = \left(\bar{F}, \frac{\delta(\vec{q})\delta(z-z_0)}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\alpha}_0} \right) \quad (29)$$

Vemos aquí , que la transformada de Fourier de la función g introducida en el primer capítulo está representada en este caso por:

$$\bar{g} = \frac{\delta(\vec{q})\delta(z-z_0)}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{\alpha}_0} \quad (30)$$

Si llamamos

$$\hat{L}_0 \bar{F} = -\vec{q} \cdot \frac{\partial \bar{F}}{\partial \vec{k}} + 2N\sigma_0(k) \bar{F} \quad (31)$$

Así como

$$\delta \hat{L} \bar{F} = -\frac{N}{(2\pi)^2} \int d\vec{q}' \bar{F}(z, \vec{q}', \vec{k}) |f(\vec{q}-\vec{q}', \vec{k})|^2 \quad (32)$$

La Ec. (25) puede ser escrita como sigue :

$$\frac{\partial \bar{F}}{\partial z} + (\hat{L}_0 + \delta \hat{L}) \bar{F} = 0 \quad (33)$$

Lo que podemos ver aquí es que la ecuación (33) con $\delta \hat{L} = 0$ corresponde al problema normal de dispersión múltiple y sus soluciones son bien conocidas ⁸⁻¹⁰ , como lo mencionamos anteriormente. Observando la estructura de la ecuación (33) resulta tentador considerar al operador $\delta \hat{L}$ como una perturbación y tratar el problema en forma aproximada partiendo de las soluciones de la Ec. (33) con $\delta \hat{L} = 0$ y luego mejorar el resultado por medio de algunas de las funcionales vistas en el primer capítulo.

Requerimos entonces de las soluciones del problema directo:

$$\frac{\partial \bar{F}_0}{\partial z} + \hat{L}_0 \bar{F}_0 = 0 \quad (34)$$

$$\bar{F}_0(z=0, \vec{q}, \vec{k}) = \frac{\delta(\vec{k})}{(2\pi)^2}$$

y las soluciones del problema adjunto :

$$-\frac{\partial \bar{F}_0^+}{\partial z} + \hat{L}_0^+ \bar{F}_0^+ = 0 \quad (35)$$

con la condición de contorno:

$$\bar{F}_0^+(z=0, \vec{q}, \vec{k}) = \frac{\delta(\vec{q})}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\alpha}_0}$$

Mostramos en el Apéndice 1 que las soluciones a estos problemas son , respectivamente:

$$\bar{F}_0(z, \vec{q}, \vec{k}) = \frac{\delta(\vec{k} + \vec{q}z)}{(2\pi)^2} e^{-2N \int_0^z dx \sigma_0(qx)} \quad (36)$$

y

$$\bar{F}_0^+(z, \vec{q}, \vec{k}) = \frac{\delta(\vec{q})}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\alpha}_0 - 2N \sigma_0(\vec{k})(z_0 - z)} \quad (37)$$

Utilicemos estas soluciones en algunas de las funcionales presentadas en el Cap.1 . Tengamos presente que no nos interesa tanto el valor mismo de la solución exacta o aproximada sino saber bajo qué condiciones puede esperarse que la anomalía aparezca y cómo depende ésta de las condiciones del experimento. Probemos por lo tanto con la funcional \mathcal{F}_0 :

$$\mathcal{F}_0[\bar{F}_0, \bar{F}_0^+] = \langle \bar{F}_0, \vec{q} \rangle - \int_0^{z_0} dz \langle \bar{F}_0^+, \overline{\frac{\partial}{\partial z} + \hat{L}_0 + \delta \hat{L}} \bar{F}_0 \rangle$$

Como \bar{F}_0 es solución de la Ec.(34) , tenemos:

$$\mathcal{F}_0[\bar{F}_0, \bar{F}_0^+] = \langle \bar{F}_0, \vec{q} \rangle - \int_0^{z_0} dz \langle \bar{F}_0^+, \delta \hat{L} \bar{F}_0 \rangle \quad (38)$$

Reemplazando (36) y (37) en (38) ; tenemos:

$$\mathcal{F}_0[\bar{F}_0, \bar{F}_0^+] = 1 + \frac{N}{(2\pi)^2} \int_0^{z_0} dz \int d\vec{q} |f(\vec{q}, -z\vec{q})|^2 \times \quad (39)$$

$$\times e^{i\vec{q} \cdot \vec{q}_0 z - 2N\sigma_0(qz)(z_0 - z) - 2N \int_0^{z_0} dx \sigma(qx)}$$

Vemos aquí el sumando unitario que proviene de $\langle \bar{F}_0, \bar{q} \rangle$, y que evidentemente no produce ninguna anomalía en la distribución angular de los iones retrodispersados. Como veremos después esta será generada por el segundo término , quién para evaluarlo es necesario introducir una ley de dispersión en función del parámetro de impacto. Proponemos la siguiente:

$$\phi(p) = C_s (p_0/p)^s \quad (40)$$

Esta expresión es muy utilizada en problemas de penetración de iones en sólidos por su sencillez y porque el exponente s está ligado directamente al potencial interatómico ¹²⁾, de forma que (40) resulta de calcular la dispersión para pequeños ángulos con un potencial central repulsivo de la forma:

$$V(r) \simeq 1/r^s$$

donde r es la distancia interatómica , de aquí resulta que la elección del exponente s depende de la energía del par colisionante. Con (40) calculamos:

$$\sigma_0(k) = (2\pi) \int_0^\infty dp \cdot p \left[1 - J_0\left(\frac{C_s k p_0^s}{p^s}\right) \right] \quad (41)$$

$$= 2\pi \cdot p_0^2 (C_s k)^{2/s} \cdot n_s$$

donde

$$n_s = \frac{\Gamma(1-1/s)}{2^{1+1/s} \Gamma(1+1/s)}$$

siendo $J_0(x)$ la función de Bessel de primera especie y de orden cero, así como $\Gamma(x)$ es la función gamma ¹³⁾.

Veamos la función:

$$f(\vec{q}, -\vec{q}z) = 2\pi \int_0^\infty dp \cdot p \left[J_0(pq) - J_0(pq + \phi(p)zq) \right]$$

haciendo la sustitución:

$$p = p_m \cdot \hat{p} \quad (42)$$

donde:

$$p_m = (C_s z p_0^s)^{1/(s+1)}$$

Obtenemos:

$$f(\vec{q}, -z\vec{q}) = 2\pi p_m^2 \cdot h_s(q \cdot p_m) \quad (43)$$

donde:

$$h_s(x) = \int_0^\infty dy \cdot y [J_0(y \cdot x) - J_0(x \cdot \overline{y + \frac{1}{y}})] \quad (44)$$

de donde podemos definir la unidad de longitud:

$$z_\mu = \left\{ \frac{(C_s p_0^s)^{2/s(s+1)}}{4\pi N p_0^2 n_s C_s^{2/s}} \right\}^{(s+1)/(s+3)} \quad (45)$$

y la unidad de ángulo :

$$\alpha_\mu = [C_s (p_0/z_\mu)^s]^{1/(s+1)} \quad (46)$$

Con las cuales podemos escribir :

$$\mathcal{F}_0[\bar{F}_0, \bar{F}_0^+] = 1 + \frac{\hat{z}_0^{(s+3)/s}}{2n_s} \int_0^1 dx x^{2/(s+1)} \int_0^\infty dq q J_0[\hat{\alpha}_0 q (x \hat{z}_0)^{s/(s+1)}] \times \quad (47)$$

$$\times h_s^2(q) \cdot \exp \left\{ -\frac{\hat{z}_0^{(s+3)/s}}{z_0^{2/s}} \cdot q^{2/s} x^{2/(s+1)} \cdot \left(1 - x + \frac{sx}{s+2}\right) \right\}$$

donde:

$$\hat{z}_0 = z_0/z_\mu \quad ; \quad \hat{\alpha}_0 = \alpha_0/\alpha_\mu$$

Aún cuando la fórmula (47) resulta compleja, ésta debe calcularse una sola vez para un dado conjunto de \hat{z}_0 y $\hat{\alpha}_0$, y luego a través de las leyes de escala (45) y (46) y en la apropiada

elección del exponente \underline{s} se tiene la dependencia con la energía y las especies ión-blanco que se trate.

En la siguiente sección discutiremos el resultado de evaluar numéricamente la Ec.(47) y se comparará con los resultados experimentales.

IV - Discusión de los resultados

En la Fig. 4 hemos graficado los resultados de evaluar numéricamente la Ec.(47) con $s = 2$, digamos que también hemos calculado la Ec.(47) para $s = 1,5$ pero el resultado es prácticamente idéntico al anterior por lo que resulta innecesario graficarlo. Vemos allí que el aumento en el número de retrodispersados según nuestros cálculos ocurre para $\hat{\alpha} \ll 3$, y $\hat{z} \ll 3$, casi independientemente de la potencia s elegida. Es interesante observar también que para $\hat{\alpha}$ grandes (y a \hat{z} -cte.) el flujo de partículas se hace ligeramente menor que la unidad, lo que proviene del hecho que la correlación en las colisiones, que es la causa de este efecto, no es un mecanismo capaz de producir absorción o creación de partículas sino simplemente provocar la reacomodación del flujo angular. De modo que el exceso de partículas alrededor de $\hat{\alpha} \sim 0$ proviene de aquellas que hubiesen emergido con ángulos mayores y han resultado "enfocadas" hacia $\hat{\alpha} = 0$ por efecto de la correlación en las dispersiones. El "enfoque" a que hacemos referencia significa más exactamente que dos partículas que viajan próximas resultan con sus velocidades relativas disminuídas luego de la colisión. Esta es una propiedad general de los potenciales repulsivos y ocurre para cierto rango de parámetros de impactos y separaciones relativas.

Para efectuar comparaciones con resultados experimentales tenemos que dar valores a C_s y p_0 y así poder evaluar las leyes de escala (45) y (46). Con este propósito consideramos que el potencial interatómico es del tipo Coulombiano apantallado:

$$V(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \varphi(r/a) \quad (48)$$

donde φ es la función de apantallamiento que se comporta en términos generales como sigue:

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= 1 \\ \varphi(x) &\rightarrow 0 \quad x \gg 1 \end{aligned} \quad (49)$$

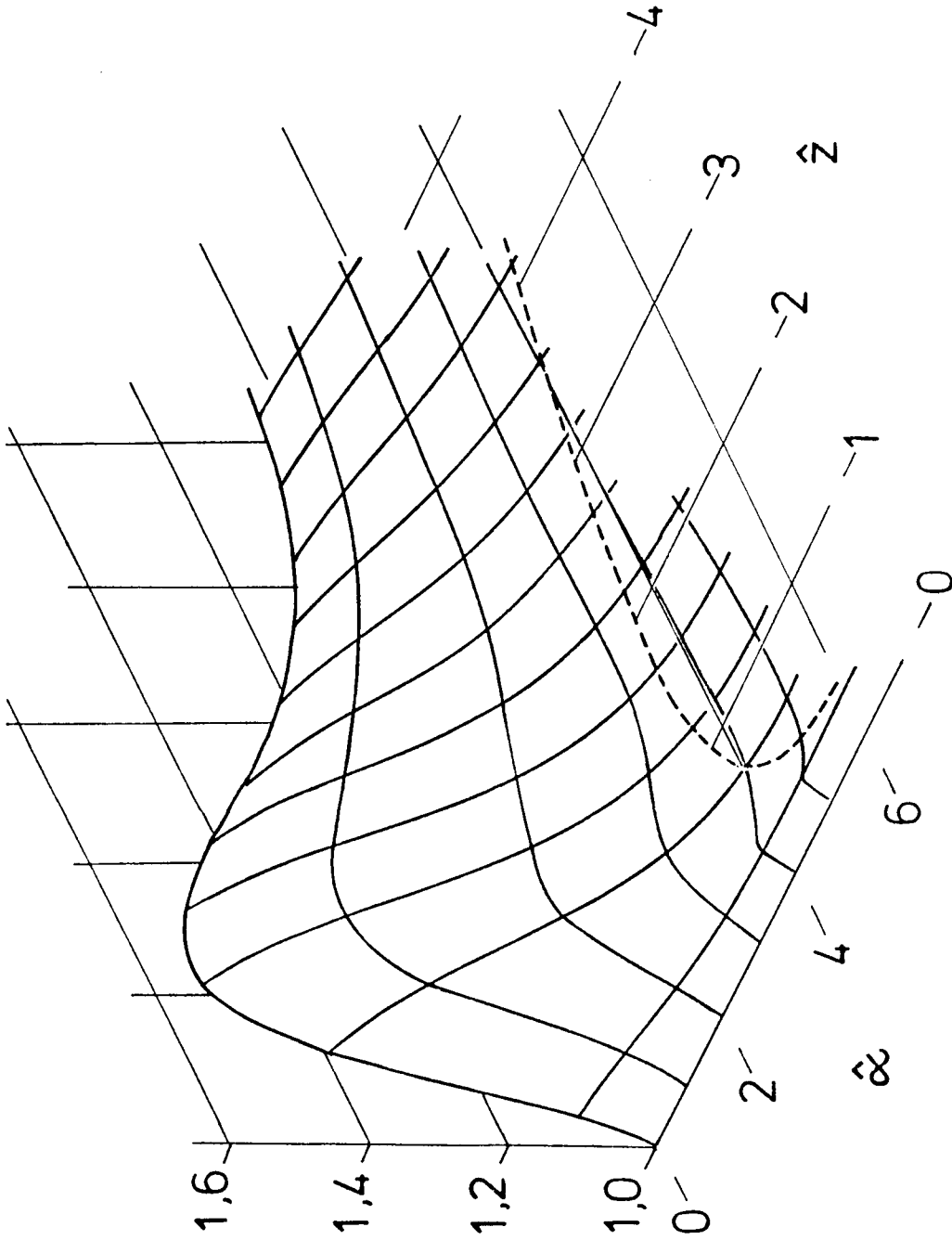


Fig. 4 : Flujo de partículas retrodispersadas según la Ec.(47) en función del ángulo $\hat{\alpha}$ y la profundidad de retrodispersión \hat{z} , ambos en unidades de α_μ y z_μ , respectivamente, definidos en el texto; para el potencial potencia $s = 2$. La línea de puntos indica el lugar donde la función corta al plano de ordenada unidad.

aquí a es la longitud de apantallamiento y su valor es del orden, o menor, que el radio atómico. Siguiendo a Lindhard¹²⁾, si la función de apantallamiento proviene de suponer que la distribución electrónica viene descrita por el modelo estadístico de Thomas y Fermi, entonces:

$$a = a_0 \times 0,8853 / (z_1^{2/3} + z_2^{2/3})^{1/2} \quad (50)$$

donde a_0 es el radio de Bohr.

Luego C_s y p_0 se obtienen de ajustar el potencial tipo potencia:

$$V_s(r) \sim 1/r^s \quad (51)$$

al potencial de Thomas y Fermi:

$$V_{TF}(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \rho_{T-F}(r/a) \quad (52)$$

para el rango de distancias interatómicas r en donde la potencia s elegida se considere apropiada. Así tenemos:

$$C_s = 2$$

$$p_0 = a \beta^{1/5} / \epsilon^{1/5} \quad (53)$$

donde:

$$\epsilon = \frac{E M_2 a}{(M_1 + M_2) z_1 z_2 e^2}$$

s	1,5	2,0	2,5
β_s	0,270	0,326	0,410

Con las potencias $s = 1,5$ y $s = 2,0$ cubrimos un importante rango de distancias interatómicas lo cual significa también un amplio rango de energías de bombardeo. Una importante consecuencia que resulta de utilizar la función de apantallamiento de Thomas y Fermi es que las cantidades α_μ y z_μ son funciones solamente de a y \mathcal{E} , con lo cual trasladamos a estas últimas variables la dependencia con la energía, proyectil y blanco en el efecto que nos ocupa.

En las Figs. 5 y 6 mostramos α_μ y z_μ en función de la energía reducida \mathcal{E} para $s = 1,5$ y $2,0$; y $a = 0,1 \text{ \AA}$ y $a = 0,2 \text{ \AA}$, respectivamente. En ambas figuras hemos tomado la densidad atómica igual a $0,07 \text{ at/\AA}^3$. Digamos que la dependencia de a con Z_1 y Z_2 es tal que con los valores tomados cubrimos un amplio rango de proyectiles y blancos, p.ej. para He como proyectil ($Z_1 = 2$) esto significa: $2 \leq Z_2 \leq 80$.

Con ayuda de las figuras 5 y 6 podemos entender ciertas observaciones hechas en los trabajos experimentales de Pronko^{4,14}) Así por ejemplo, en uno de ellos se manifiesta que el efecto se observa para protones contra Pt en el rango de energías: $0,4 \leq E \leq 0,8 \text{ MeV}$ pero no así cuando $E = 1,6 \text{ MeV}$, en unidades reducidas esto significa la observación del efecto en el rango: $37 \leq \mathcal{E} \leq 74$ pero no para $\mathcal{E} = 149$; este sistema de $a = 0,11 \text{ \AA}$ podemos estudiarlo en la Fig. 5, allí vemos que para $\mathcal{E} \leq 70$ le corresponden $\alpha_\mu \gtrsim 0,2^\circ$ en cambio para $\mathcal{E} = 149$ tenemos $\alpha_\mu < 0,2^\circ$ y recordemos que $0,2^\circ$ es la resolución angular del experimento, por lo tanto, para H^+ contra Pt a $1,6 \text{ MeV}$ el efecto podría observarse si se tuviera mayor resolución angular.

También se dice en aquellos trabajos que para ($0,2 \leq E \leq 2,5 \text{ MeV}$) He^+ sobre blancos de números atómicos $Z < 40$ el efecto se torna apenas perceptible. En general, estos casos tienen $a \sim 0,2 \text{ \AA}$ y por lo tanto debemos recurrir a la Fig. 6 Tomemos el caso de Al ($Z = 13$) en unidades reducidas el rango de energías disponibles es $81 \leq \mathcal{E} \leq 1020$, a estas energías reducidas la potencia $s = 1,5$ es más apropiada, y vemos nuevamente que los correspondiente valores para α_μ son menores que $0,2^\circ$. A esto hay que sumarle también el efecto de una menor

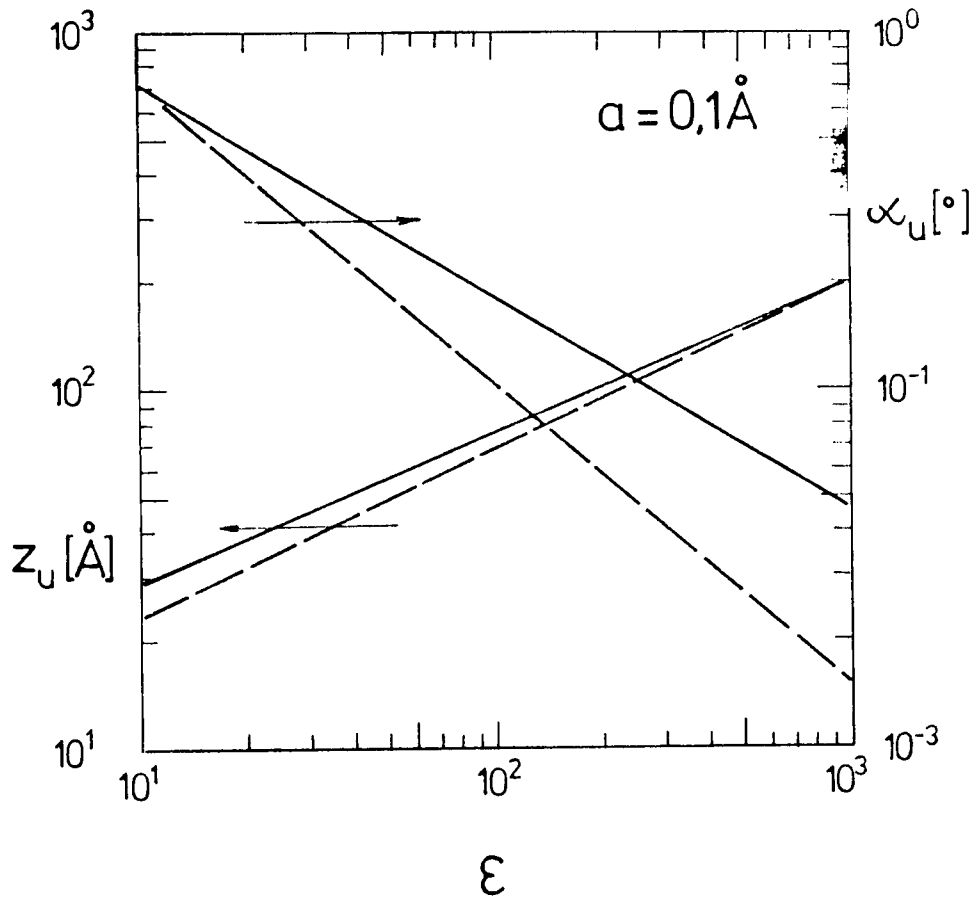


Fig. 5 : Unidades de ángulo y profundidad de retrodispersión Ecs. (45) y (46) respectivamente, en función de la energía reducida ϵ , con radio de apantallamiento $a = 0,1 \text{ \AA}$ densidad atómica $N = 0.07 \text{ at/\AA}^3$, y potenciales potencia $s = 1,5$: línea cortada ; y $s = 2,0$: línea continua.

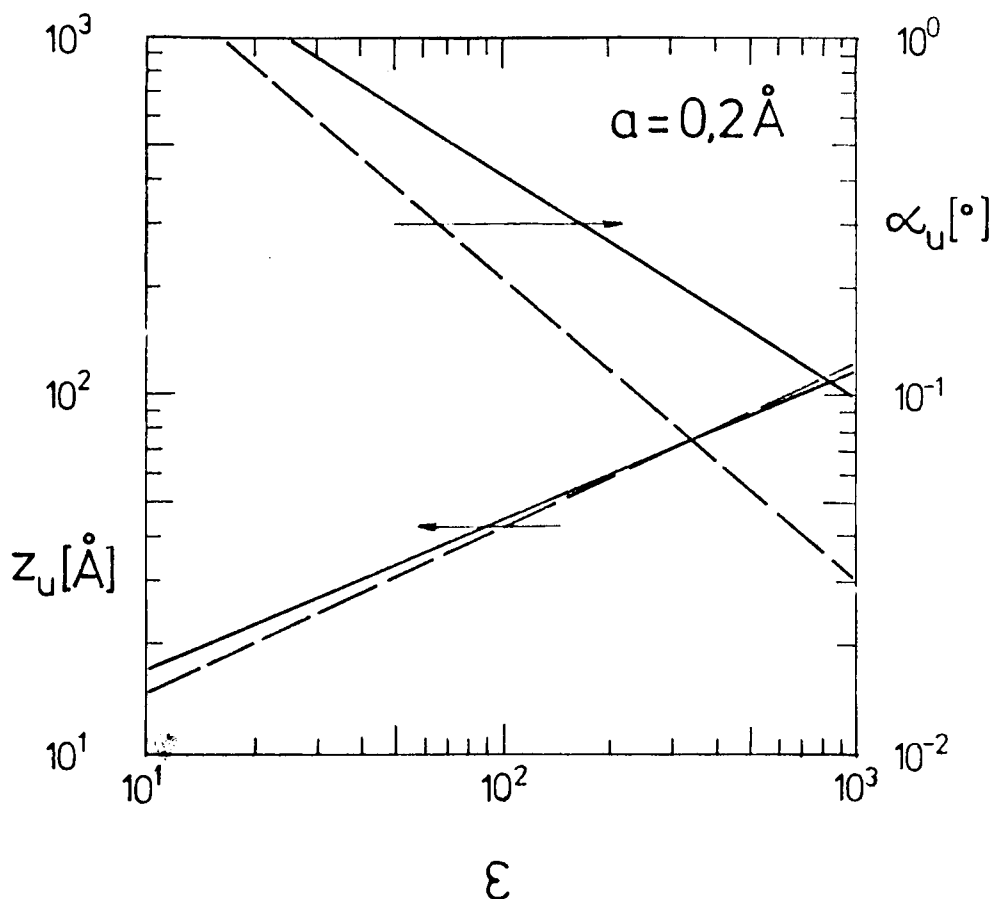


Fig. 6 : Unidades de ángulo y profundidad de retrodispersión Ecs. (45) y (46) respectivamente, en función de la energía reducida ϵ , con radio de apantallamiento $a = 0,2 \text{ \AA}$, densidad atómica $N = 0,07 \text{ at/\AA}^3$, y potenciales potencia $s = 1,5$: línea cortada ; y $s = 2,0$: línea continua.

resolución en profundidad ; en efecto , en estos experimentos la resolución en profundidad depende del frenamiento del proyectil en el blanco que se trate, dado que lo que permanece constante es la resolución en energía de detección de las partículas retrodispersadas , por lo tanto :

$$\Delta R \sim \frac{\Delta E}{\left| \frac{dE}{dR} \right|} \sim \frac{\Delta E}{z_2}$$

donde ΔE es la resolución en energía del sistema de detección y $\left| \frac{dE}{dR} \right|$ es el poder de frenamiento . Para las energías que tratamos el poder de frenamiento es lineal con el número atómico del blanco , por lo tanto si para He^+ contra Pt se tiene una resolución de $\sim 100 \text{ \AA}$, entonces:

$$\Delta R(z_2) = \frac{78}{z_2} \cdot 100 \text{ \AA}$$

que para el caso de aluminio, resulta :

$$\Delta R(\text{Al}) \sim 600 \text{ \AA}$$

Vemos en la Fig.6 que para el intervalo de energías reducidas que mencionamos z_{μ} es siempre menor que la resolución que calculamos para el aluminio.

Finalmente para verificar una vez más nuestras leyes de escalas , en las Figs. 7 y 8 mostramos el contaje normalizado a aquél medido a un ángulo $\alpha \gg 0^\circ$, en función del ángulo de observación para iones de He^+ retrodispersados desde la profundidad donde el efecto es máximo. Estos datos fueron tomados de la Ref. 15 . La Fig. 7 contiene resultados de He^+ sobre Pt a 0,5 ; 1,0 y 2,5 MeV respectivamente en cambio la Fig. 8 contiene resultados de He^+ a 1,0 MeV sobre blancos de Pt , Pd , y Cu . Al lado de cada figura hemos reconstruido las gráficas con la escala de ángulos en unidades de α_{μ} para $s = 2$. Vemos el agrupamiento de los distintos casos en, aproximadamente, una sola curva como deberíamos

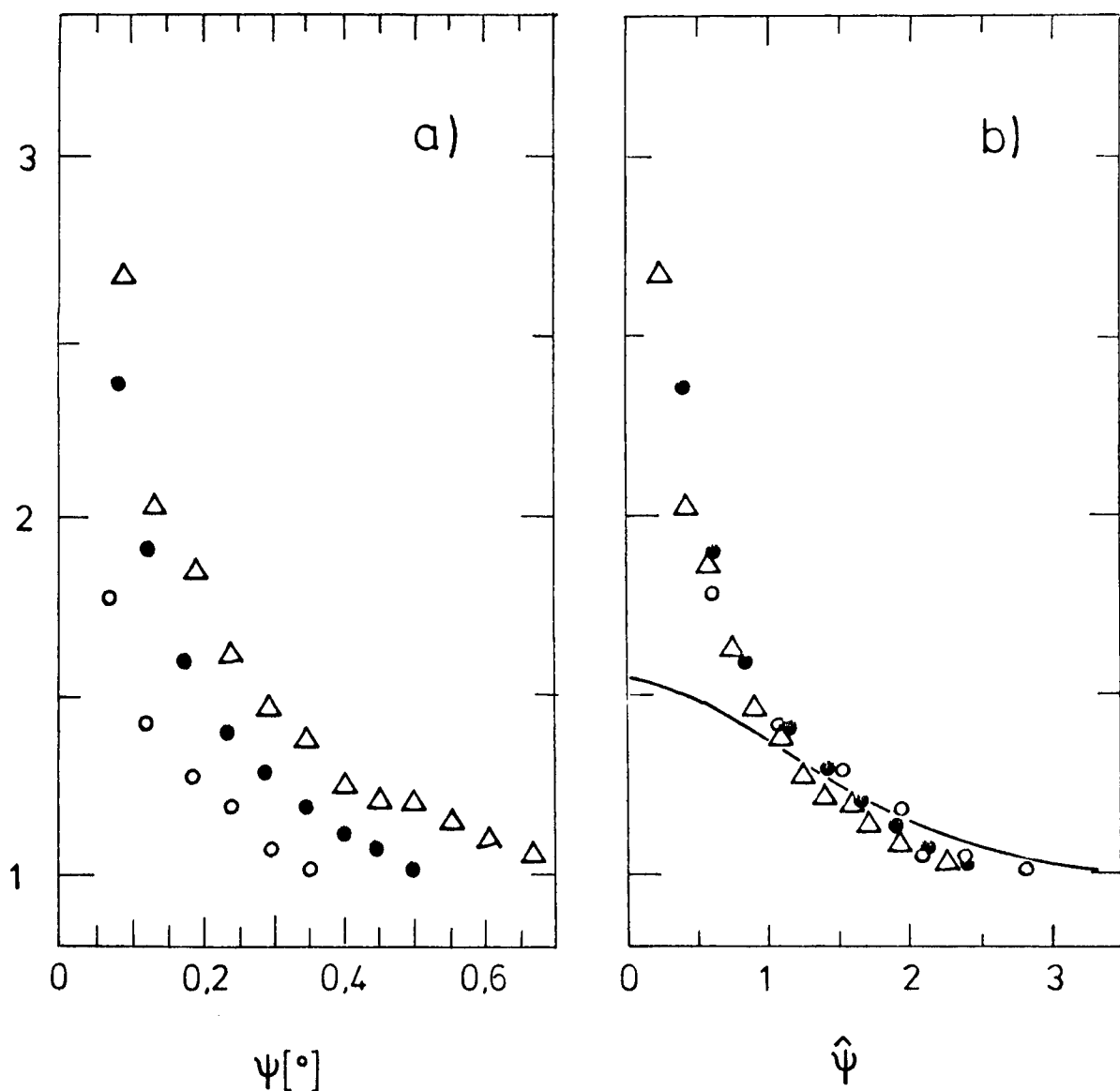


Fig. 7 : a) Número de partículas retrodispersadas desde la profundidad donde el efecto es máximo , en función del ángulo de observación y normalizado al valor de un ángulo de observación grande, para He^+ sobre Pt a varias energías :

Δ : 0,5 ; \bullet : 1,0 ; y \circ : 2,5 MeV respectivamente.
 b) Idem , en función del ángulo de observación medido en la unidad definida en el texto ,Ec.(46), y para $s = 2,0$.
 Línea continua : resultado teórico Ec.(47).

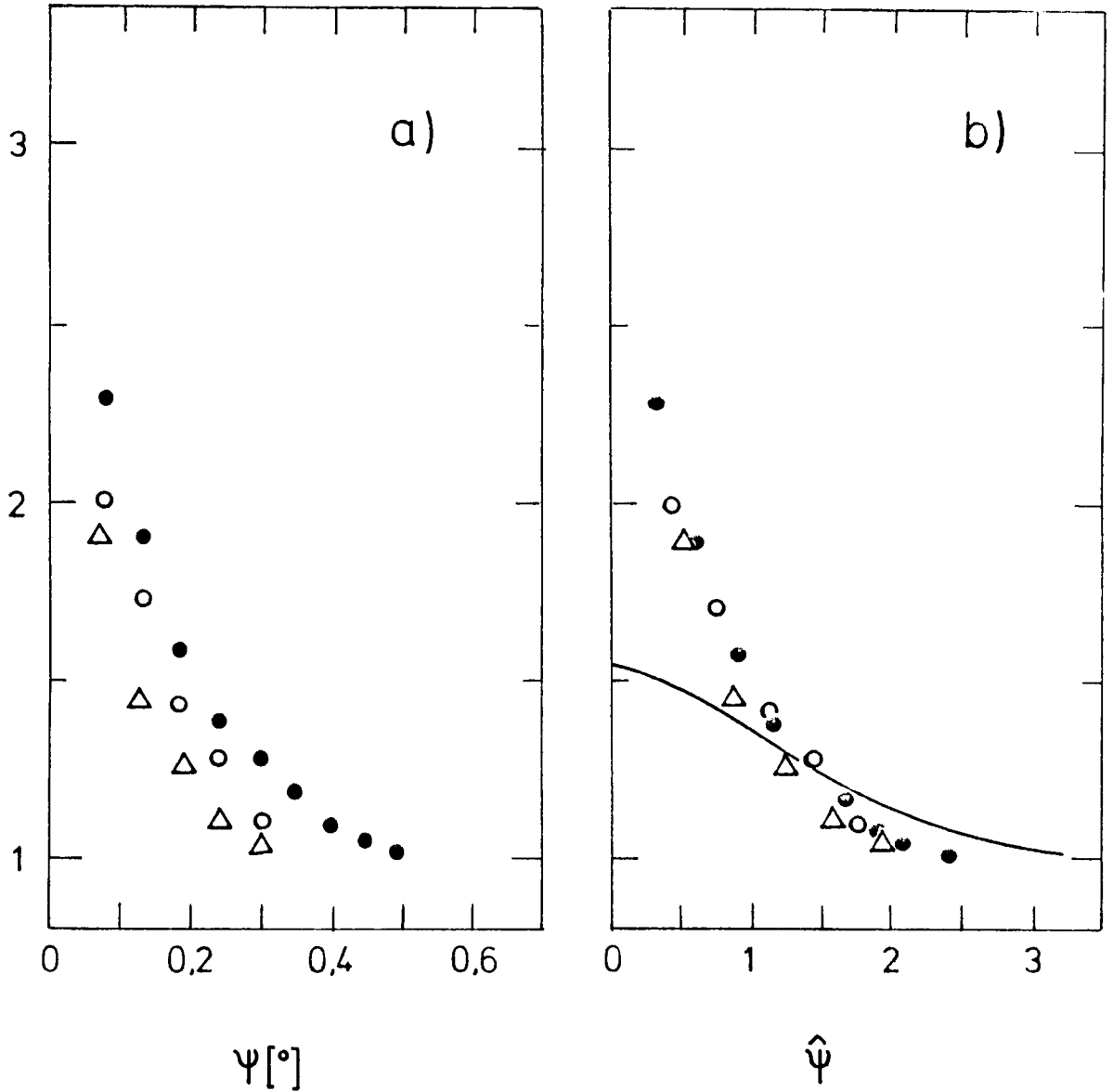


Fig. 8 : a) Número de partículas retrodispersadas desde la profundidad donde el efecto es máximo en función del ángulo de observación y normalizado al valor de un ángulo de observación grande , para He^+ a 1,0 MeV sobre varios blancos : ● : Pt; ○ : Pd ;y Δ : Cu . b) Idem , en función del ángulo de observación medido en la unidad definida en el texto , Ec.(46) , y para $s = 2,0$. Línea continua : resultado teórico Ec.(47) .

esperar de nuestro cálculo. Hemos también dibujado la curva teórica correspondiente a la potencia $s = 2$ y a la profundidad del máximo efecto. Conviene hacer notar que la curva teórica subestima a los resultados experimentales a pequeños ángulos y en cambio sobreestima a los mismos hacia ángulos mayores . Esto puede entenderse si tenemos en cuenta que nuestro cálculo considera que el enfocamiento, ocurre una sola vez en la historia de cada partícula retrodispersada, por lo tanto múltiples enfocamientos pueden hacer crecer el flujo de partículas para $\alpha \sim 0^\circ$ por encima de nuestro resultado, que puede considerarse como de primer orden en las colisiones correlacionadas.

V - Comentarios y conclusiones

Hemos mostrado en las secciones precedentes cómo puede tratarse por medio de la ecuación de transporte el problema de la retrodispersión de Rutherford para aquellas partículas que vuelven hacia la superficie próximas a la dirección del haz, y hemos resuelto en forma aproximada utilizando un procedimiento tomado del cálculo variacional así como recurriendo a leyes de dispersión basadas en el potencial de interacción Coulombiano apantallado de Thomas y Fermi en la aproximación de potencial potencia. De esta forma obtenemos una función que nos dá el flujo de partículas retrodispersadas en función del ángulo de salida y la profundidad de retrodispersión. Resulta también que esta función se puede escribir en términos de variables adimensionales, de modo que la dependencia con la energía, el proyectil y el blanco queda limitada a las unidades empleadas para medir los ángulos y las profundidades. En base a aquellas leyes de escala resulta inmediato comprender cuándo el efecto será observable para una situación experimental dada. Como ejemplo de esto analizamos aquellos casos en donde se investigó experimentalmente y resultó que el efecto es apenas perceptible o bien completamente inexistente. En ellos descubrimos que el aumento en el número de retrodispersados debería ocurrir en una región de ángulos o profundidades inasequibles para la resolución experimental disponible.

Conviene repetir una vez más que utilizar la funcional \mathcal{F}_0 y como argumentos de ésta a las soluciones del problema de dispersión múltiple sin correlación en las colisiones, significa que las correlaciones son consideradas una solá vez en la historia de las partículas retrodispersadas. Esto por lo tanto introduce serios defectos a nuestros resultados para $\alpha \sim 0$, en donde estarán aquellas partículas que al salir por los mismos lugares por donde entraron, en general, sufren muchas colisiones correlacionadas. Existe en esto sin embargo, una suerte de 'errores que se compensan'; por un lado lo que acabamos de mencionar limita nuestros cálculos a ser válidos solamente para $\alpha \neq 0^\circ$ y pequeñas profundidades; pero debemos decir

que la cadena de colisiones enfocantes no puede seguir indefinidamente por que cuando el tiempo transcurrido entre la colisión a la entrada y aquella durante la salida es muy grande , el retroceso del blanco comienza a ser importante, y a consecuencia de esto la correlación comienza a perderse .

Se desprende de estas últimas consideraciones que en un tratamiento más completo del problema debería incluirse a las sucesivas colisiones correlacionadas y al retroceso de los blancos.

Un comentario queremos agregar respecto al concepto de reversibilidad que se invoca en otro trabajo¹⁵⁾ como explicación del efecto. Este es: que la reversibilidad por sí sola es necesaria pero no suficiente. Lo que además necesitamos aquí es la propiedad de estabilidad , que en nuestro caso lo proporciona el "enfocamiento" que mencionamos reiteradamente. Mediante él , aquellas partículas que no revierten completamente su estado de movimiento luego de la colisión de retrodispersión pueden volver a acercarse a la trayectoria de entrada aumentando en consecuencia el número de partículas que emergen con $\alpha \sim 0^\circ$. La reversibilidad no implica estabilidad , bien podría ser un mecanismo reversible pero inestable , y el resultado sería completamente diferente.

Referencias

- 1) En la sección eficaz de Rutherford podemos considerar que las cargas con las que interactúan el ión y el blanco son las de sus núcleos , porque a altas velocidades las dispersiones importantes ocurren para parámetros de impacto tan pequeños que los electrones no son eficientes en producir apantallamiento.
- 2) J.F.Ziegler (Ed.), New uses of ions accelerators, Plenum Press , New York , 1975.
- 3) J.W. Mayer y E.Rimini (Eds), Ion beam handbook for material analysis, Acad. Press, New York, 1977.
- 4) P.Pronko, B.R.Appleton, O.W.Holland S.R.Wilson , Phys.Rev.Letters 43, 779, (1979) .
- 5) O.H.Crowford, Phys.Rev.Letters, 44, 185, (1980) .
- 6) M.M.Jakas y R.A.Baragiola, Phys.Rev.Letters, 44, 424, (1980) .
- 7) O.S.Oen, Nucl. Instr. Meth. , 194, 87, (1982)
- 8) P.Sigmund y K.B.Winterbon, Nucl. Instr. Meth. , 119, 541, (1974)
- 9) A.D.Marwick y P.Sigmund, Nucl. Instr. Meth. , 126, 317, (1975)
- 10) P.Sigmund, J.Heinemeier, F.Besenbacher, P.Hvelplund y H.Knudsen , Nucl. Instr. Meth. , 150, 221, (1978) .
- 11) Recordemos que si definimos:

$$(\bar{F}, G) = \int d\vec{n} d\vec{v} dt F \cdot G$$
 entonces para las transformada de Fourier \bar{F} y \bar{G} tenemos:

$$(\bar{F}, \bar{G}) = (2\pi)^4 \int d\vec{q} d\vec{k} dt \bar{F}^* \bar{G}$$
- 12) J.Lindhard, V.Nielsen y M.Scharff, DetKong.Dan.Vid.Selsk.Mat Fys.Medd. 36 No10, (1968) .
- 13) M.Abramowitz y I.Stegun, Handbook of Math. Functions, Dover Publications Inc., New York 1968.
- 14) P.P.Pronko, B.R.Appleton, O.W.Holland y S.R.Wilson, Nucl. Instr. and Meth. 170, 227, (1980) .
- 15) B.R.Appleton, O.W.Holland y J.H.Barrett, Nucl. Instr. and Meth. 191, 507, (1981) .

CAPITULO 3

"TRANSMISION DE MOLECULAS DIATOMICAS EN LAMINAS DELGADAS"

I - Introducción

Experimentos en donde láminas delgadas son bombardeadas con proyectiles moleculares han sido muy numerosos y de gran interés en los últimos años. Los mismos están motivados por las posibilidades que ofrecen las moléculas para comprender la naturaleza de la interacción de iones rápidos con la materia sólida. En efecto, cuando un sistema atómico se mueve dentro del sólido se producen alteraciones a su alrededor, entre las cuales tenemos la redistribución transitoria de la población electrónica del material. Si se utilizan proyectiles moleculares los sistemas atómicos se mueven próximos entre sí durante el pasaje por la lámina y entonces las regiones por donde cada uno de ellos viaja se encuentran modificadas por la presencia del otro. A raíz de esto se producen efectos de correlación entre los movimientos de los fragmentos moleculares. Lo interesante aquí es que cada proyectil es testigo de lo que el otro produjo dentro del sólido, y estudiando las características de sus estados de movimiento a la salida de la lámina tenemos indirectamente información acerca de aquellas perturbaciones inducidas por los iones sobre el material.

Nos concentraremos aquí sobre una clase particular de aquellos experimentos, estos son los que observan partículas que emergen de la lámina constituyendo también especies moleculares. Desde la primera observación de H_2^+ transmitidas en láminas de carbono por Poizat et al¹⁾, se han medido transmisiones de especies tales como $^4HeH^+$ 3), $^3HeH^+$ 3) y H_3^+ 2) entre otras. El mecanismo de la transmisión de moléculas por otra parte, ha sido en buena medida aclarado para el caso de H_2^+ 4). En efecto, con un modelo simple en donde intervienen solamente la repulsión coulombiana entre los protones y las dispersiones múltiples con los átomos del blanco, Cue et al⁴⁾ pudo calcular la fracción de H_2^+ transmitidas en función del espesor de la lámina y la energía de bombardeo. Sin embargo, como veremos más adelante con más detalles, las aproximaciones usadas son muy gruesas y poco apropiadas para tratar los casos en que se requiere que los fragmentos se encuentren a menor distancia para recons-

tituir la molécula , como por ejemplo el caso de HeH^+ . Resulta claro también que si queremos estudiar las características de la interacción de los iones con el sólido a partir de las fracciones de moléculas transmitidas , debemos ser capaces primeramente de conocer las incertezas introducidas por las aproximaciones del cálculo o bien reducirlas.

El objeto de nuestro trabajo es precisamente, presentar un procedimiento para calcular la transmisión de moléculas diatómicas sobre una base más confiable.

En el capítulo anterior vimos cómo tratar el movimiento de dos partículas no-interactuantes. En lo que sigue veremos cómo se extiende aquél procedimiento al caso de interacción coulombiana , tal como ocurre entre los fragmentos moleculares dentro del sólido. En la Sec.II se enumeran y discuten brevemente los mecanismos más importantes que intervienen en la transmisión de moléculas. En la Sec.III se deriva la ecuación de transporte que gobierna el movimiento de un par de cargas sujetas a repulsión coulombiana entre sí , a dispersiones múltiples y a una pérdida de energía continua más una fluctuación en la misma. En la Sec.IV utilizamos una funcional variacional para mejorar los resultados partiendo de soluciones aproximadas. Finalmente en la Sec.V se discuten los resultados y se comparan con mediciones existentes.

II - Mecanismos más importantes en la transmisión de moléculas diatómicas

La historia típica de un proyectil molecular que atraviesa una lámina delgada está caracterizada por los siguientes eventos:

1 - Pérdida de los electrones menos ligados y ruptura de la molécula en las primeras capas atómicas.

2 - Repulsión coulombiana entre los fragmentos.

3 - Dispersiones múltiples con los átomos del blanco.

4 - Pérdida de energía por procesos electrónicos.

Discutamos brevemente cada uno de ellos.

1 - A las velocidades que nos interesa $v \gtrsim v_B$ (v_B : velocidad de Bohr = $2,19 \times 10^8$ cm/seg) un sistema atómico no puede en promedio retener a sus electrones menos ligados. Según el criterio de Bohr⁵⁾ una partícula atómica moviéndose dentro del sólido no puede tener estados ligados a quienes corresponda una velocidad media electrónica menor que la del proyectil. De modo que para las especies que nos ocupa: H y He a $v \gtrsim v_B$ estos se encontrarán, prácticamente, completamente ionizados. Por otra parte, según recientes experimentos⁶⁾ se requiere un tiempo del orden de 2×10^{-16} seg para que los proyectiles atómicos alcancen la situación de equilibrio en su estado de carga, por lo tanto luego de atravesar una distancia $x \sim v_B \cdot 2 \times 10^{-16}$ seg = 4×10^{-8} cm las moléculas habrán perdido sus electrones enlazantes y los atómicos hasta aquellos más ligados según lo determine la velocidad de los fragmentos. Este espesor tan pequeño en comparación con las láminas más delgadas que se obtienen en el laboratorio, nos permite suponer a los efectos del cálculo que estos procesos ocurren en el mismo instante en que la molécula penetra en el material.

2 - Una consecuencia inmediata de la ionización de los fragmentos moleculares es la repulsión coulombiana que actúa entre ellos y provoca un aumento continuo en sus velocidades y posiciones relativas. Esta explosión coulombiana como usualmente se la llama, tiene importantes efectos sobre la probabilidad de recombinación molecular. Así por ejemplo, si no existieran otras fuer-

zas como veremos después , a partir de un cierto tiempo de pasaje , o espesor de lámina , los fragmentos conseguirán tal velocidad relativa a causa de la explosión coulombiana que difícilmente podrían volver a constituir un sistema ligado. Se puede mostrar que la distancia r_i entre dos cargas $Z_1 e$ y $Z_2 e$, y masas M_1 y M_2 respectivamente , tales que a tiempo $t = 0$ se encuentran separados a una distancia r_i y con velocidad relativa nula, se relaciona con el tiempo a través de la expresión:

$$t/t_0 = \left[\frac{r_i}{r_i} \left(\frac{r_i}{r_i} - 1 \right) \right]^{1/2} + \ln \left[\left(\frac{r_i}{r_i} \right)^{1/2} + \left(\frac{r_i}{r_i} - 1 \right)^{1/2} \right]$$

donde:

$$t_0 = \left[\frac{M_1 M_2 r_i^3}{2 Z_1 Z_2 e^2 (M_1 + M_2)} \right]^{1/2}$$

En la Fig. 9 mostramos r_i/r_i en función de t/t_0 . Vemos allí que la explosión coulombiana se desarrolla entre $0 \leq t/t_0 \leq 3-4$, a partir de entonces las cargas continúan alejándose con velocidad constante. Para tener idea de los órdenes de magnitud , en la Tabla 2 mostramos t_0 evaluado para los casos de H_2^+ y HeH^+ :

	H_2^+	HeH^+
r_i [Å]	1,11	0,74
t_0 [fseg]	1,58	0,54

Tabla 2

En la Fig. 9 vemos que para $t/t_0 > 4$ la distancia alcanzada por los núcleos es de dos a tres veces la separación inicial de modo que teniendo en cuenta que la energía potencial de los estados electrónicos ligantes tienden a cero rápidamente , podemos decir que al cabo de aquél tiempo los fragmentos ya no podrán recomponer la molécula . Es importante observar la fuerte dependencia que existe entre el movimiento y la posición inicial r_i a través de la escala de tiempo t_0 . Esto tiene notables efectos sobre la transmisión de moléculas y en tal sentido se ha podido observar que con distribuciones de separaciones iniciales diferentes la fracción de moléculas transmitidas sufre cambios sustanciales ⁷⁾.

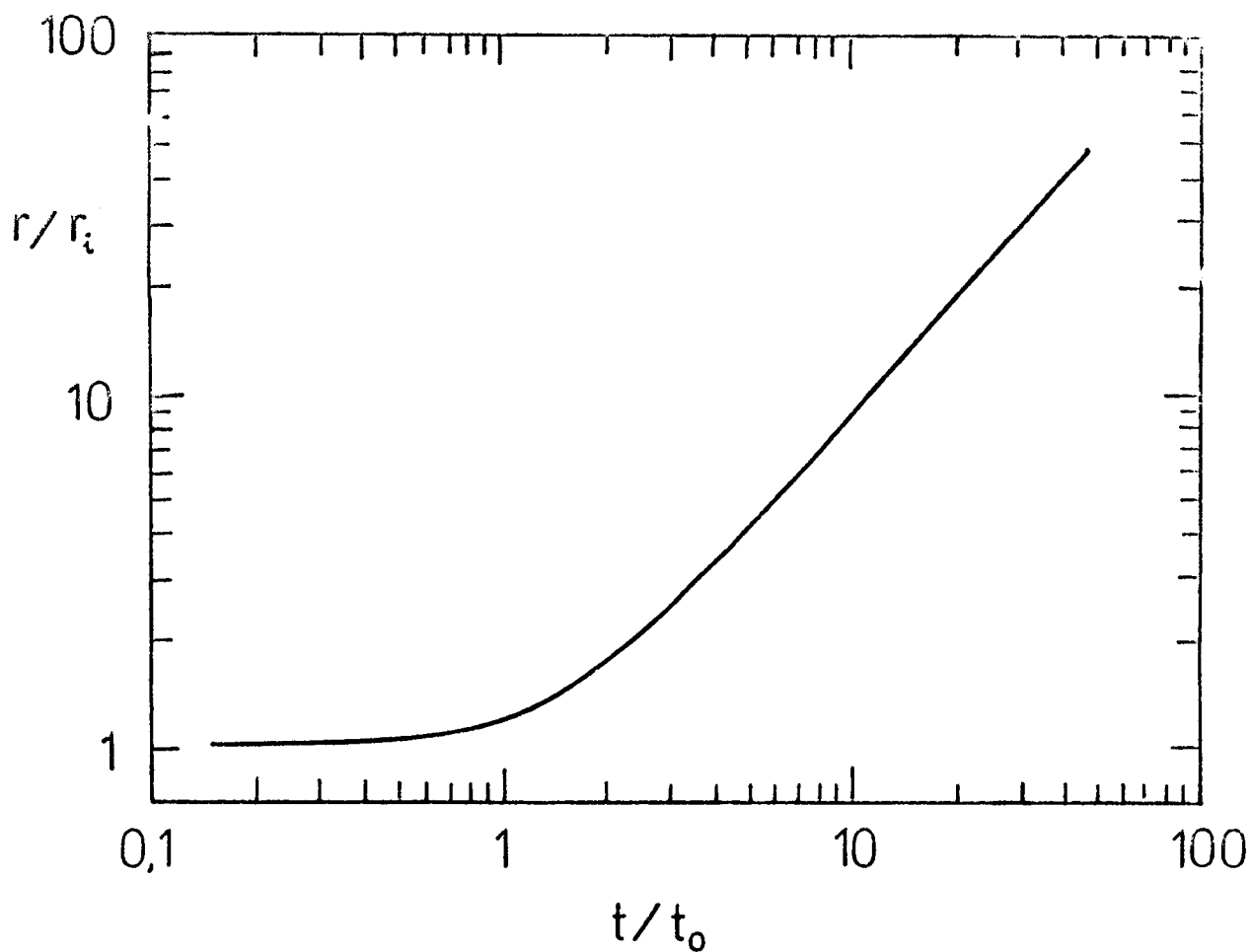


Fig. 9 Distancia r en función del tiempo t , entre dos cargas que parten del reposo sometidas a la repulsión coulombiana. r_i : distancia inicial, t_0 : escala de tiempo definida en el texto.

Debemos aclarar aquí sobre dos cuestiones. La primera se refiere a que hemos tomado a los fragmentos con sus cargas nucleares sin tener en cuenta aquellos electrones que no son completamente perdidos por los mismos y configuran su "carga efectiva". La segunda tiene que ver con el apantallamiento dinámico de los electrones del medio sobre las cargas, esto modifica el potencial coulombiano puro a uno del tipo coulombiano apantallado⁸⁾:

$$V(r) = \frac{z_1 z_2 e^2}{r} e^{-r/\lambda_a} \quad (2)$$

donde:

$$\lambda_a = v/\omega_p \quad (3)$$

aquí v es la velocidad de los fragmentos y ω_p la frecuencia del plasma electrónico del material; en general $\omega_p \sim 10^{16} \text{ seg}^{-1}$ de donde resulta: $\lambda_a \sim v/\sqrt{v_B} 10^{-8} \text{ cm}$. A lo largo de este trabajo despreciaremos estos efectos a menos que se haga mención de lo contrario.

3 - Durante el pasaje por el sólido los fragmentos moleculares interactúan con los átomos del blanco a través de la repulsión coulombiana con los carozos de los mismos. Estas interacciones son de tipo impulsivo y provocan, en general, pequeños cambios en las componentes de la velocidad perpendiculares a la dirección del movimiento. Estas colisiones se suceden aleatoriamente con una distribución de probabilidad dada por la sección eficaz de dispersión elástica. Todas ellas totalizan el fenómeno de dispersión múltiple y cuyo efecto es el de aumentar, en promedio, la posición y velocidad relativa de los fragmentos en proporción directa al tiempo de pasaje. En términos generales, este mecanismo actúa en contra de la recombinación molecular, sin embargo como vimos en el punto anterior, a partir de cierto tiempo de pasaje por medio de la dispersión múltiple pueden volver a acercarse aquellos fragmentos que por la explosión coulombiana continuarían alejándose indefinidamente. Sobre esto volveremos durante la discusión de los resultados y como se verá, tiene una gran importancia en la probabilidad de transmisión de moléculas en función de la orientación inicial del eje internuclear.

4 - Cada uno de los fragmentos pierde energía cinética co-

mo consecuencia de excitaciones e ionizaciones que produce sobre el sistema electrónico del material. Para los proyectiles y rangos de velocidades que nos interesa, la energía media y la energía cuadrática media perdida por unidad de camino recorrido vienen dadas, respectivamente, por las expresiones ^{5,9)}:

$$\left| \frac{d\Delta E}{dR} \right|_p = \frac{4\pi z_p^2 e^4}{m v^2} N z_T L(v) \quad (4)$$

$$\left| \frac{d\Delta E^2}{dR} \right|_p = 4\pi z_p^2 e^4 z_T N \quad (5)$$

en donde z_p ($p=1,2$) y z_T son los números atómicos de los proyectiles y del blanco respectivamente; m es la masa del electrón y e su carga eléctrica; N es la densidad atómica del blanco, y $L(v)$ una función de la velocidad v de los iones y del material.

De las Ecs. (4) y (5) vemos que luego de recorrer una distancia R , no muy grande como para mantener la pérdida de energía pequeña comparada con la energía inicial, los fragmentos tendrán una distribución de velocidades centrada en los valores:

$$v = \frac{R}{M_p v} \left| \frac{d\Delta E}{dR} \right|_p \quad (p = 1, 2) \quad (6)$$

y una dispersión cuadrática media:

$$\sigma_{v,p}^2 = \frac{R}{M_p^2 v^2} \left| \frac{d\Delta E^2}{dR} \right|_p \quad (p = 1, 2) \quad (7)$$

De modo que la diferencia media entre sus velocidades, resulta:

$$\overline{v_1 - v_2} = \frac{4\pi z_T e^2 N \cdot R}{m v^2} \left(\frac{z_1^2}{M_1} - \frac{z_2^2}{M_2} \right) \cdot L(v) \quad (8)$$

con una incerteza del orden de:

$$\sigma_{v_{12}}^2 = 4\pi z_T e^2 N \cdot R \left(\frac{z_1^2}{M_1^2} + \frac{z_2^2}{M_2^2} \right) \quad (9)$$

Como puede verse, el frenamiento y la fluctuación en el frenamiento son mecanismos hábiles para transferir energía cinética relativa a los fragmentos moleculares. En consecuencia, si la energía cinética relativa inicial es cero, a causa de aquellos la posibilidad de recombinación disminuirá con el tiempo de pasaje. Para los casos particulares de moléculas diatómicas tales que $Z_1^2/M_1 = Z_2^2/M_2$, p.ej. H_2^+ y HeH^+ , entonces el valor medio de la diferencia de velocidades (8) se anula. Como ha sido observado, en estas condiciones las fracciones de moléculas transmitidas disminuyen en función del tiempo de pasaje con menor rapidez en comparación con los casos en los que aquél término no se anula, p.ej. DH^+ , $^3HeH^+$ (3,10,11).

Finalmente, si los fragmentos han de constituir un sistema estable tienen que capturar los electrones necesarios para la formación de los enlaces. Como vimos en 1. esto tiene que ocurrir necesariamente a la salida de la lámina mediante un proceso de captura de electrones del sólido. Dado que la sección eficaz de captura radiativa es pequeña comparada con las que tenemos aquí que son del orden de 10^{-16} cm^2 , debemos suponer que la captura ocurre a través de un proceso no radiativo o de varios cuerpos.

Como sabemos, según la separación de Born-Oppenheimer¹²⁾ cada estado electrónico determina una curva de energía potencial para los núcleos :

$$U(r)$$

donde r es la separación internuclear. Entonces en una aproximación clásica, si E_c es la energía cinética de los núcleos en el sistema del centro de masas, para la formación de la molécula debe cumplirse :

$$E_c + U(r) - U(\infty) \leq 0 \quad (10)$$

Para la captura electrónica a la salida de la lámina, sobre la cual se tiene poco conocimiento, se sigue un camino más

bién fenomenológico. Por ejemplo, para los casos de H_2^+ y HeH^+ se suponen que la captura electrónica es un proceso independiente del cumplimiento de (10). De esta forma si \underline{Y} es la fracción de moléculas transmitidas, entonces:

$$Y = P \cdot \phi \quad (11)$$

donde \underline{P} es la probabilidad que se cumpla (10) y ϕ la probabilidad de captura electrónica. Luego para ϕ en el caso de H_2^+ se lo toma como igual a $2\phi_0$, donde ϕ_0 es la fracción de H neutros que emergen de la lámina cuando se bombardea con H^+ de la misma velocidad que las moléculas. Según (11) tenemos:

$$Y_{H_2^+} = 2\phi_0 P \quad (12)$$

o bién:

$$Y_{H_2^+} / 2\phi_0 = P \quad (13)$$

Para el caso de HeH^+ , en Ref.3 se sigue un procedimiento un tanto diferente y se construye la función ϕ a partir de los datos de la fracción de HeH^+ transmitidas del siguiente modo: se supone que la función \underline{P} depende solamente del tiempo de pasaje, entonces ϕ se obtiene de hacer que $Y_{HeH^+}(t,v)/\phi$ resulte en una curva independiente de la velocidad y además que ϕ coincida con la fracción de litio simplemente ionizado a la velocidad de $6,8 \times 10^8$ cm/seg cuando se bombardea con iones de litio láminas de carbono. Cabe mencionar que la función ϕ así obtenida resulta muy próxima a la de la fracción de Li^+ a la que nos hemos referido. Esto parece sugerir que para la captura de sus dos electrones el sistema HeH^+ actúa con carga nuclear tres.

En todo caso, lo que resulta de tomar Y/ϕ en vez de Y , es que así se elimina la fuerte dependencia con la velocidad que existe en el proceso de captura electrónica, tal como puede verse en las Figs. 10 y 11.

Digamos ahora que el objeto de nuestro trabajo es el estudio y cálculo de la función \underline{P} , a quién llamaremos probabilidad de transmisión reducida. La comparación con los experimentos lo

haremos a través de la definición fenomenológica $P = Y/\dot{\phi}$
tomando algunas de las aproximaciones mencionadas para la función
 ϕ .

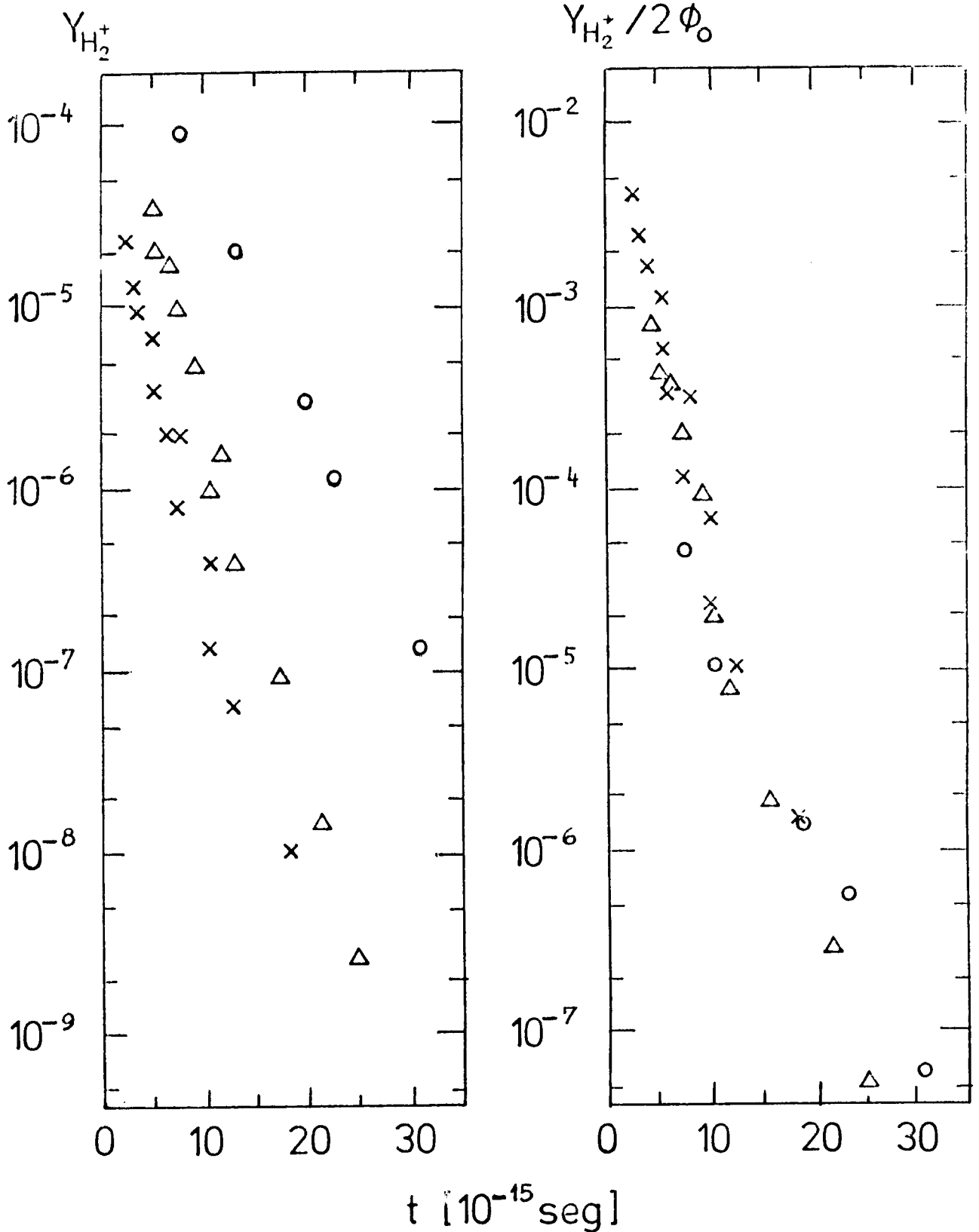


Fig.10 Fracción de moléculas transmitidas Y , y probabilidad de transmisión reducida Y/ϕ , para el caso de iones de H_2^+ contra láminas de carbono en función del tiempo de pasaje y varias energías de bombardeo : \times : 2,0; Δ : 0,75; y \circ : 0,2 MeV respectivamente. Datos de Ref.10.

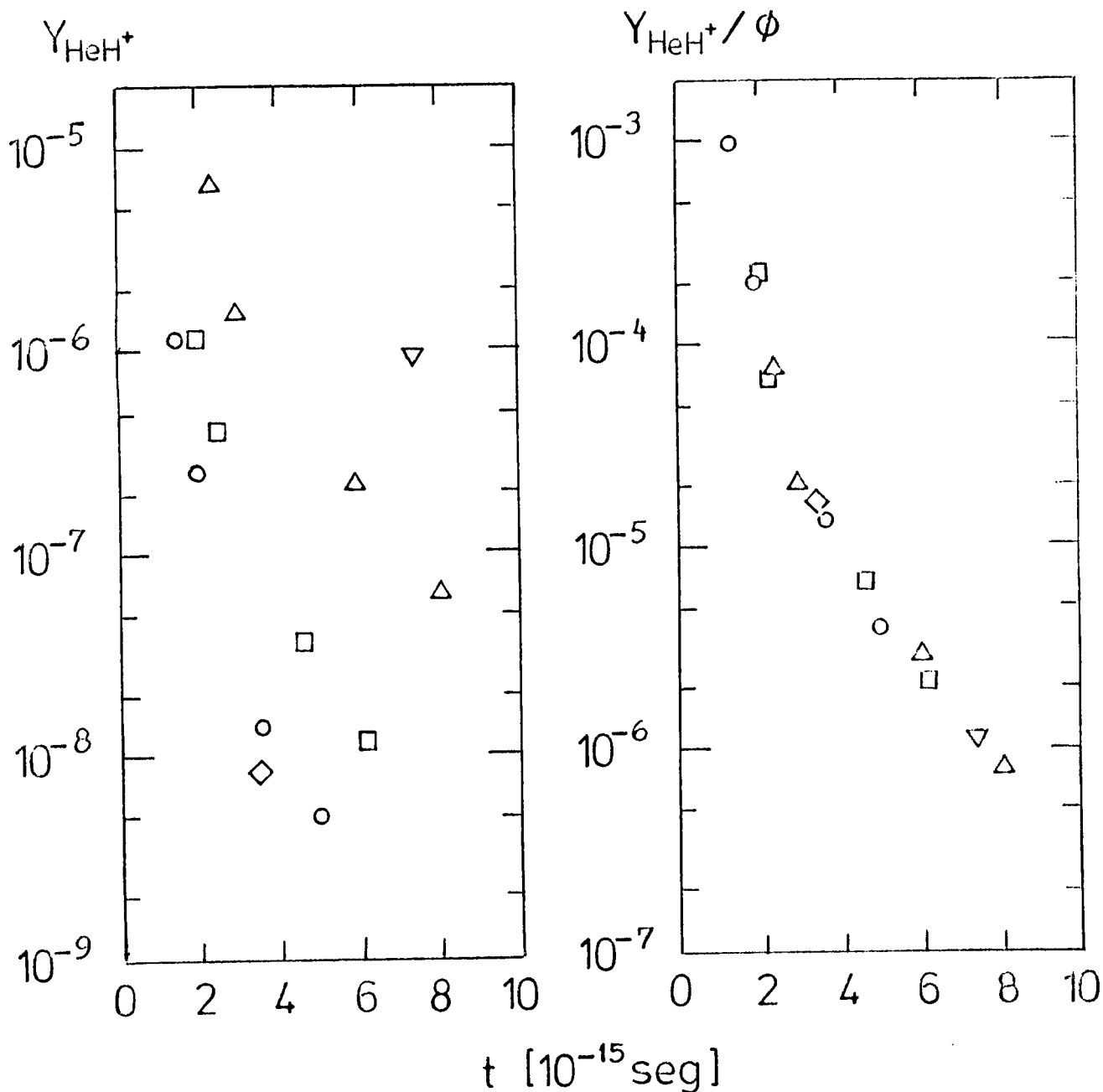


Fig.11 Fracción de moléculas transmitidas Y y probabilidad de transmisión reducida Y/ϕ , para el caso de iones de HeH^+ contra láminas de carbono en función del tiempo de pasaje y varias energías de bombardeo : \diamond : 3,63; \circ : 3,0 ; \square : 2,0; \triangle : 1,2; y ∇ : 0,8 MeV respectivamente. Datos de Ref.

III - Planteo de la ecuación de transporte

Nuestro propósito es describir estadísticamente el movimiento de un par de iones durante el pasaje por el sólido. Al igual que para la retrodispersión anómala, introduzcamos aquí: $F(t, \vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2)$, la función de distribución para los iones a quienes llamamos 1 y 2, en función del tiempo de pasaje t . Para derivar la ecuación de transporte tendremos en cuenta los mecanismos enumerados en la sección anterior y sumaremos también que las velocidades que adquieren los iones como consecuencia de aquellos son pequeñas comparadas con la velocidad inicial del haz v_0 . Definamos un sistema cartesiano con el eje 'z' coincidente con la dirección del haz y planteemos el balance probabilístico para la función F :

$$F(t+\delta t, \vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) = (1 - \delta t v_0 \Sigma_t) \cdot F(t, \vec{r}_1 - \vec{v}_1 \delta t, \vec{v}_1 - \frac{\vec{f}_1}{M_1} \delta t, \vec{r}_2 - \vec{v}_2 \delta t, \vec{v}_2 - \frac{\vec{f}_2}{M_2} \delta t) + v_0 \delta t N \int d\vec{p} F(t, \vec{r}_1, \vec{v}_1 - \delta \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2 - \delta \vec{v}_2) \quad (14)$$

$$, \vec{r}_2 - \vec{v}_2 \delta t, \vec{v}_2 - \frac{\vec{f}_2}{M_2} \delta t) + v_0 \delta t N \int d\vec{p} F(t, \vec{r}_1, \vec{v}_1 - \delta \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2 - \delta \vec{v}_2)$$

aquí \vec{f}_1 y \vec{f}_2 representan a las fuerzas que puedan actuar sobre las partículas 1 y 2 respectivamente, Σ_t es la sección eficaz total de dispersión. En la integral de colisión hemos incluido también al frenamiento electrónico y recordemos que éste actúa sobre la dirección del movimiento, en cambio las dispersiones elásticas lo hacen en el plano perpendicular al mismo. Por lo tanto si desarrollamos en series de potencias de $\delta v_{j,z}$ y $\delta v_{j,z}$, y nos quedamos con los términos de hasta el segundo orden, en la aproximación que las pérdidas de energías de 1 y 2 son independientes, obtenemos:

$$F(t+\delta t, \vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2) = (1 - \delta t v_0 \Sigma_t) \cdot F(t, \vec{r}_1 - \vec{v}_1 \delta t, \vec{v}_1 - \frac{\vec{f}_1}{M_1} \delta t, \vec{r}_2 - \vec{v}_2 \delta t, \vec{v}_2 - \frac{\vec{f}_2}{M_2} \delta t) - \delta t N \sum_{j=1}^2 \left\{ \frac{S_j}{M_j} \frac{\partial F}{\partial v_{j,z}} - \frac{Q_j^2}{M_j^2 v_0} \frac{\partial^2 F}{\partial v_{j,z}^2} \right\} + \quad (15)$$

$$+ \delta t v_0 N \int d\vec{p} [F(t, \vec{r}_1, \vec{v}_1 - v_0 \hat{p}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2 - v_0 \hat{p}_2) - F(t, \vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2)]$$

donde:
$$S_j = M_j v_0 \int d\vec{p} \delta v_{j,z}$$

$$Q_j^2 = M_j^2 v_0^2 \int d\vec{p} (\delta v_{j,z})^2$$

así como :
$$\vec{\phi}_1 = \delta \vec{v}_{1,\rho} / v_0 \quad ; \quad \vec{\phi}_2 = \delta \vec{v}_{2,\rho} / v_0$$

aquí $\delta \vec{v}_{1,\rho}$ y $\delta \vec{v}_{2,\rho}$ son los cambios en las componentes de las velocidades perpendiculares al haz debido a la dispersión elástica. Desarrollando (15) en series de potencias de δx y quedándonos con el primer término no nulo en ambos miembros, tenemos:

$$\frac{\partial F}{\partial x} + \sum_{j=1}^2 \left\{ \vec{v}_j \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{r}_j} + \frac{NS_j}{M_j} \frac{\partial F}{\partial v_{j,z}} - \frac{N \cdot Q_j^2}{M_j^2 v_0} \frac{\partial^2 F}{\partial v_{j,z}^2} + \frac{\vec{f}_j}{M_j} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{v}_j} \right\} =$$

(17)

$$= v_0 N \int d\vec{p} [F(x, \vec{r}_1, \vec{v}_1 - v_0 \vec{\phi}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2 - v_0 \vec{\phi}_2) - F(x, \vec{r}_1, \vec{v}_1, \vec{r}_2, \vec{v}_2)]$$

Las fuerzas que actúan sobre las partículas son en nuestro caso las de la repulsión coulombiana entre los fragmentos, de modo que:

$$\vec{f}_1 = \frac{z_1 z_2 e^2}{r_{12}^3} \cdot \vec{r}_{12} = - \vec{f}_2 \quad (18)$$

donde $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$, $z_1 e$ y $z_2 e$ son las cargas nucleares de los fragmentos.

Introduzcamos ahora las variables :

$$\begin{aligned} \vec{V} &= \vec{v}_2 - \vec{v}_1 \quad ; \quad \vec{V}_{CM} = (M_1 \vec{v}_1 + M_2 \vec{v}_2) / (M_1 + M_2) \\ \vec{R} &= \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \quad ; \quad \vec{R}_{CM} = (M_1 \vec{r}_1 + M_2 \vec{r}_2) / (M_1 + M_2) \end{aligned} \quad (19)$$

Con ellas y teniendo en cuenta (18) la ecuación de transporte para la función de distribución : $F(x, \vec{R}, \vec{V}, \vec{R}_{CM}, \vec{V}_{CM})$ se puede es-

cribir como sigue:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial F}{\partial t} + \vec{V}_{CM} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{R}_{CM}} + \vec{v} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} - N \cdot \frac{S_1 + S_2}{M_1 + M_2} \cdot \frac{\partial F}{\partial V_{CM,z}} - N \cdot \left(\frac{S_2}{M_2} - \frac{S_1}{M_1} \right) \cdot \frac{\partial F}{\partial v_z} + \\ & + \frac{N}{v_0} \cdot \frac{\Omega_1^2 + \Omega_2^2}{(M_1 + M_2)^2} \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial V_{CM,z}^2} + \frac{N}{v_0} \left(\frac{\Omega_1^2}{M_1^2} + \frac{\Omega_2^2}{M_2^2} \right) \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial v_z^2} + \frac{z_1 z_2 e^2 \vec{r}}{r^3 \mu} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{v}} + \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} & + \frac{2N}{v_0(M_1 + M_2)} \cdot \left(\frac{\Omega_2^2}{M_2} - \frac{\Omega_1^2}{M_1} \right) \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial v_z \partial V_{CM,z}} = v_0 N \left\{ d\vec{p} \left[F \left[t, \vec{r}, \vec{v} - v_0 (\vec{\phi}_2 - \vec{\phi}_1), \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. \vec{R}_{CM}, \vec{V}_{CM} - v_0 \left(\frac{M_1 \vec{\phi}_1 + M_2 \vec{\phi}_2}{M_1 + M_2} \right) \right] - F(t, \vec{r}, \vec{v}, \vec{R}_{CM}, \vec{V}_{CM}) \right\} \end{aligned}$$

donde: $\mu = M_1 \cdot M_2 / (M_1 + M_2)$

Integrando en (20) sobre \vec{R}_{CM} y \vec{V}_{CM} dado que estas variables son irrelevantes para el cálculo de la recombinación, tenemos:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} - N \left(\frac{S_2}{M_2} - \frac{S_1}{M_1} \right) \cdot \frac{\partial F}{\partial v_z} + \frac{N}{v_0} \left(\frac{\Omega_1^2}{M_1^2} + \frac{\Omega_2^2}{M_2^2} \right) \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial v_z^2} + \quad (21)$$

$$+ \frac{z_1 z_2 e^2 \vec{r}}{r^3 \mu} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{v}} = v_0 N \left\{ d\vec{p} \left\{ F \left[t, \vec{r}, \vec{v} - v_0 (\vec{\phi}_2 - \vec{\phi}_1) \right] - F(t, \vec{r}, \vec{v}) \right\} \right\}$$

donde:

$$F(t, \vec{r}, \vec{v}) = \int d\vec{R}_{CM} d\vec{V}_{CM} F(t, \vec{r}, \vec{v}, \vec{R}_{CM}, \vec{V}_{CM})$$

Bajo la suposición que los ángulos de dispersión grandes son altamente improbables y que no existe correlación entre las dispersiones de uno y otro ión, la Ec.(21) puede escribirse:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} + \frac{z_1 z_2 e^2}{r^3 \mu} \vec{r} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{v}} - N \left(\frac{S_2}{M_2} - \frac{S_1}{M_1} \right) \frac{\partial F}{\partial v_z} = \\ = \frac{v_0^3}{\lambda_{Ms}} \frac{\partial^2 F}{\partial \vec{v}_p^2} + \frac{v_0^3}{\lambda_s} \frac{\partial^2 F}{\partial v_z^2} \end{aligned} \quad (22)$$

donde:

$$\lambda_{Ms}^{-1} = \frac{N}{4} \int d\vec{p} (\vec{\phi}_1^2 + \vec{\phi}_2^2)$$

y

$$\lambda_s^{-1} = \frac{N}{v_0^4} (\Omega_1^2 / M_1^2 + \Omega_2^2 / M_2^2)$$

A λ_{Ms} y λ_s podemos llamarlas longitudes de dispersión múltiple y de fluctuación en la pérdida de energía respectivamente, y a su vez las podemos interpretar como las distancias medias recorrida por los iones entre dos eventos típicos de cada uno de los procesos mencionados. En (22) podemos ver lo que ya dijimos en la sección anterior en relación al frenamiento: si $S_1/M_1 = S_2/M_2$ entonces el último término de la izquierda en (22) se anula y solo queda la fluctuación en el frenamiento en condiciones de transferir energía cinética relativa. En la sección siguiente y en vista a tratar los casos de H_2^+ y HeH^+ supondremos que aquél término se anula. Es interesante decir que la ecuación (22) describe el movimiento de una partícula de masa μ puesta en un medio en donde las componentes de la velocidad en el plano "x-y" se difunden a un ritmo diferente que aquella de la dirección 'z', y a su vez está sujeta a dos tipos de fuerzas: una central y otra constante en la dirección 'z', la primera es debida a la repulsión coulombiana y la segunda a la diferencia de frenamientos. Como puede verse se trata de un medio inhomogéneo y anisotrópico. Digamos además que NQ_i^2 está dado por la Ec. (5), y para λ_{Ms} recurrimos a la aproximación de pequeños ángulos dada por Lindhard (Ref. 12, Cap.2) para el potencial Coulombiano:

$$\int \vec{\phi}_i^2 d\vec{p} = 2\pi a_i^2 M_T^2 \ln \epsilon_i / [(M_i + M_T) \cdot \epsilon_i]^2 \quad ; \quad i = 1, 2$$

donde M_T es la masa del blanco, ϵ_i es la energía reducida y a_i la longitud de apantallamiento definidas en el Cap.2.

IV - Solución aproximada de la ecuación de transporte.

Tenemos la ecuación :

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{z_1 z_2 e^2}{n^3 \mu} \vec{n} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{v}} + \vec{v} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{n}} = \frac{V_0^3}{\lambda_{MS}} \frac{\partial^2 F}{\partial v_\rho^2} + \frac{V_0^3}{\lambda_S} \frac{\partial^2 F}{\partial v_z^2} \quad (23)$$

con la condición de contorno :

$$F(t=0, \vec{n}, \vec{v}) = \delta(\vec{n} - \vec{n}_i) \cdot \delta(\vec{v} - \vec{v}_i) \quad (24)$$

Esto proviene de suponer que las moléculas son producidas con separación y velocidad relativa bien conocidas. Más adelante haremos $\vec{v}_i = 0$ e integraremos sobre todas las orientaciones para \vec{n}_i . Para comparar con una situación real tendremos que integrar todavía sobre una posible distribución de separaciones internucleares dada.

De la Ec (23) con la condición de contorno (24) conocemos soluciones exactas en aquellos casos en que se anulan algunos de sus términos, p. ej., la solución de la ecuación :

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{z_1 z_2 e^2}{n^3 \mu} \vec{n} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{v}} + \vec{v} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{n}} = 0 \quad (25)$$

es simplemente :

$$F(t, \vec{n}, \vec{v}) = \delta(\vec{n} - \vec{n}_c) \delta(\vec{v} - \vec{v}_c) \quad (26)$$

donde \vec{n}_c y \vec{v}_c son las soluciones de la ecuación de movimiento de una partícula de masa μ en el potencial coulombiano:

$$z_1 z_2 e^2 / n$$

con las condiciones iniciales :

$$\vec{n}_c(t=0) = \vec{n}_i \quad ; \quad \vec{v}_c(t=0) = \vec{v}_i$$

Por otra parte, la ecuación :

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial F}{\partial \vec{n}} = \frac{V_0^3}{\lambda_{MS}} \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial v_\rho^2} + \frac{V_0^3}{\lambda_S} \cdot \frac{\partial^2 F}{\partial v_z^2} \quad (27)$$

la cual es separable en cada dimensión y en cada una de ellas resulta una ecuación del tipo :

$$\frac{\partial F}{\partial x} + v \cdot \frac{\partial F}{\partial r} = \frac{v_0^3}{\lambda} \frac{\partial^2 F}{\partial v^2} \quad (28)$$

Ec. (28) admite como solución a la función $F_{MS}(x, r, v)$, la que para la condición de contorno (24) se escribe como:

$$F_{MS}(x, r, v) = \frac{\lambda \sqrt{3}}{2\pi x^2 v_0^3} x \times \exp \left\{ -\frac{\lambda}{x v_0} \left[\frac{(v-v_i)^2}{v_0^2} + \frac{3(r-r_i)^2}{x^2 v_0^2} - 3 \frac{(v-v_i)(r-r_i)}{x v_0^2} \right] \right\} \quad (29)$$

el subíndice MS lo utilizamos para señalar que esta solución corresponde a la del problema de dispersión múltiple en la aproximación gaussiana, como se la denomina frecuentemente y vale para altas energías y la zona central de la distribución : $v \sim v_i$
 $r \sim r_i$.

De la Ec. (23) en cambio no conocemos su solución exacta, y si ésta existe puede ocurrir que se trate de una expresión algebraicamente poco sencilla. De modo que resulta tentador elegir una forma funcional que contenga, en cierto modo, a los casos límites (26) y (29). En tal sentido podemos proponer:

$$F(x, \vec{r}, \vec{v}) \sim F_{MS}(x, \vec{r} - \vec{r}_c + \vec{r}_i, \vec{v} - \vec{v}_c + \vec{v}_i) \quad (30)$$

en donde $F_{MS}(x, \vec{r}, \vec{v})$ significa en realidad el producto de tres funciones (29), una para cada dimensión. Es fácil ver que (30) es solución de (25) y (27) haciendo los límites apropiados en cada caso, sin embargo no lo es de la Ec. (23). Físicamente esta aproximación representa lo que ocurre si la repulsión coulombiana entre los núcleos y la dispersión múltiple actuaran sucesivamente durante un tiempo \underline{t} cada una de ellas y en el orden mencionado. Naturalmente, (30) es una buena aproximación

a la solución de la Ec.(23) para tiempos pequeños, o para $\vec{n} \sim \vec{n}_c$ y $\vec{v} \sim \vec{v}_c$. En cambio para el caso que nos ocupa en donde necesitamos conocer F para $v \sim 0$ y $n \sim n_{eq}$ (n_{eq} : distancia de equilibrio de la molécula) la aproximación (30) es ciertamente mala y además sobreestima el valor exacto. Esto último es fácil de ver: si se permite a la dispersión múltiple actuar a posteriori de la repulsión coulombiana, entonces los núcleos pueden volver a acercarse tanto como se quiera sin ninguna repulsión que se lo impida. Tal vez en el caso de n_{eq} grandes este efecto sea de menor importancia, pero tan pronto vamos al caso de $Hell^+$ la aproximación (30) produce probabilidades de transmisión mucho mayores que las observadas.

En el cálculo de transmisión de H_2^+ hecho por Cue et al⁴⁾ se utiliza también este tipo de aproximación y los resultados se encuentran en buen acuerdo con los experimentos, sin embargo, en aquel trabajo se aproxima también F_{MS} y en vez de tomar aquella solución de la ecuación (27) con los argumentos desplazados como en (30), se la aproxima por un producto de gaussianas al tiempo que se desprecian también las fluctuaciones en la pérdida de energía, en suma:

$$F_{Cue} \sim \delta(v_z - v_{c,z}) \cdot \delta(z - z_c) \cdot \exp \left\{ - \frac{(\vec{\rho} - \vec{\rho}_c)^2}{2\sigma_p^2} - \frac{(\vec{v}_p - \vec{v}_{c,p})^2}{2\sigma_v^2} \right\} \quad (31)$$

aquí $\vec{\rho}_c$ y $\vec{v}_{c,p}$ son las componentes perpendiculares al haz de \vec{n}_c y \vec{v}_c respectivamente, idem para $\vec{\rho}$ y \vec{v}_p de \vec{n} y \vec{v} , respectivamente; σ_p y σ_v son los anchos de las distribuciones de posición y velocidad por las dispersiones múltiples. Lo que podemos ver, es que al no tener el término de correlación entre \vec{n} y \vec{v} , como contiene (29) esto hace que para $t > 0$ y $n \sim v \sim 0$ se verifique:

$$F_{MS} > F_{Cue} \quad (32)$$

Lo que parece ser entonces que el buen acuerdo obtenido por Cue es el resultado más bien fortuito de dos errores que se compensan.

Como fuese que estas cosas ocurran, tenemos aquí que de la

Ec. (23) conocemos solamente algunas soluciones aproximadas . Sin lugar a dudas el terreno apropiado para manejarse con aquellas es el cálculo variacional . De él ya hemos visto , se obtienen las funcionales variacionales que en cierta forma proveen de la mejor estimación de la cantidad que querramos calcular. En nuestro caso nos proponemos evaluar :

$$P(\tau) = \int d\vec{r} d\vec{v} F(x=\tau, \vec{r}, \vec{v}) g(\vec{r}, \vec{v}) \quad (33)$$

donde $g(\vec{r}, \vec{v})$ es la probabilidad de recombinación . Como vimos en la Secc. II , tenemos:

$$g(\vec{r}, \vec{v}) = \begin{cases} 1 & ; \quad 0 \leq v \leq \sqrt{\frac{-2U(r)}{\mu}} \\ 0 & ; \quad \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (34)$$

donde $U(r)$ es la energía potencial del estado ligante el que suponemos es único y viene dado por la aproximación de Morse¹²⁾ :

$$\begin{aligned} U(r) &= U_0 x(x-2) \\ x &= \exp[-(r-r_0)/a] \end{aligned} \quad (35)$$

los parámetros U_0 , r_0 y a se determinan para cada caso, digamos que r_0 es la distancia de equilibrio de la molécula y U_0 la energía de unión .

Recordemos que si queremos una estimación variacional de (33) necesitamos también una solución aproximada del problema adjunto :

$$-\frac{\partial F^+}{\partial t} + H^+ F^+ = 0 \quad (36)$$

con la condición de contorno:

$$F^+(x=\tau, \vec{r}, \vec{v}) = g(\vec{r}, \vec{v})$$

Para resolver (36) usaremos el mismo tipo de aproximación que para (23) . Como ya vimos , en el problema adjunto el tiempo

transcurre invertido . De modo que F^{1+} coincide con g a tiempo $t = z$, luego cada uno de los puntos de g evoluciona hasta $t = 0$ según la repulsión coulombiana y luego por igual cantidad de tiempo actúa la dispersión múltiple.

Con F' , F^{1+} y la funcional variacional :

$$\mathcal{F}[F', F^{1+}] = \langle F', g \rangle \exp \left\{ - \int_0^z dt \frac{\langle F^{1+}, \frac{\partial}{\partial t} + \hat{V} F' \rangle}{\langle F^{1+}, F' \rangle} \right\} \quad (37)$$

obtendremos la 'mejor' estimación de (33) dentro de las aproximaciones empleadas. Reemplazando cada una de ellas , tenemos:

$$\mathcal{P}(z) \sim \mathcal{F}[F', F^{1+}] = \langle F', g \rangle \exp \left\{ - \int_0^z dt \frac{\langle F^{1+}, \hat{V} F' \rangle}{\langle F^{1+}, F' \rangle} \right\} \quad (38)$$

donde:

$$\hat{V} = \frac{z_1 z_2 e^2}{\mu} \left(\frac{\vec{n}}{n^3} - \frac{\vec{n}_c}{n_c^3} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}} \quad (39)$$

Aquí $\mathcal{P}(z)$ representa lo que en la Sec.II llamamos probabilidad de transmisión reducida para el caso en que las moléculas tienen a $t=0$ posiciones relativas bien definidas . Para comparar con los experimentos tendremos que integrar sobre todas las orientaciones posibles :

$$\langle \mathcal{P}(z) \rangle_{\Omega_i} = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_i \mathcal{F}[F', F^{1+}] \quad (40)$$

Finalmente , podrá integrarse sobre las separaciones iniciales si estas no están bien definidas como ocurre cuando se utilizan distintos tipos de fuentes iónicas.⁷⁾

En la siguiente sección discutiremos los resultados evaluados numéricamente.

V - Discusión de los resultados

En las Figs. 12 y 13 tenemos los resultados de evaluar numéricamente la Ec.(40) , quién nos da la probabilidad de transmisión reducida en función del tiempo de pasaje y para los casos de H_2^+ y HeH^+ , respectivamente . En ellas vemos también los resultados experimentales tomados de las Ref. 3 y 4 , y quienes para ser llevados al gráfico son procesados como se indicó en la sección anterior, esto es : dividiendo las fracciones de moléculas transmitidas por la probabilidad de captura electrónica en alguna de las aproximaciones ya mencionadas. Para el caso de H_2^+ también mostramos el resultado teórico de Cue ⁴⁾ . Nuestros cálculos fueron obtenidos tomando una separación inicial bien definida e iguales a los valores medios de las distribuciones de distancias internucleares iniciales recientemente medidas ¹³⁾ . En cada caso hemos evaluado la Ec.(40) para dos velocidades del proyectil : 3 y 5 en unidades atómicas respectivamente, con intenciones de averiguar la validez de la suposición generalmente aceptada que la probabilidad de transmisión reducida no depende de la velocidad. En las Figs. 12 y 13 vemos que nuestros resultados muestran que esto no es así , especialmente para el caso de HeH^+ . Es muy difícil , por otra parte decir si los resultados experimentales muestran una tendencia en el sentido de nuestros cálculos debido a la gran incerteza de los primeros, aquí hablamos solamente del caso H_2^+ dado que los puntos correspondientes al HeH^+ no dependen de la velocidad por el procedimiento empleado para llevarlos al gráfico (ver pág. 49 o Ref. 3) .

En las Figs. 14 y 15 tenemos la probabilidad de transmisión reducida para los casos de H_2^+ y HeH^+ con velocidad $v = 5$ u.a. y para diferentes distancias internucleares iniciales. Tal como habíamos adelantado este parámetro tiene efectos muy notables sobre la transmisión de moléculas. Vemos allí que aquellos pares nucleares que inicialmente se encuentran más separados tienen una probabilidad sustancialmente mayor de recomponerse como molécula a cualquier tiempo de pasaje respecto de aquellos con distancias internucleares iniciales menores. El

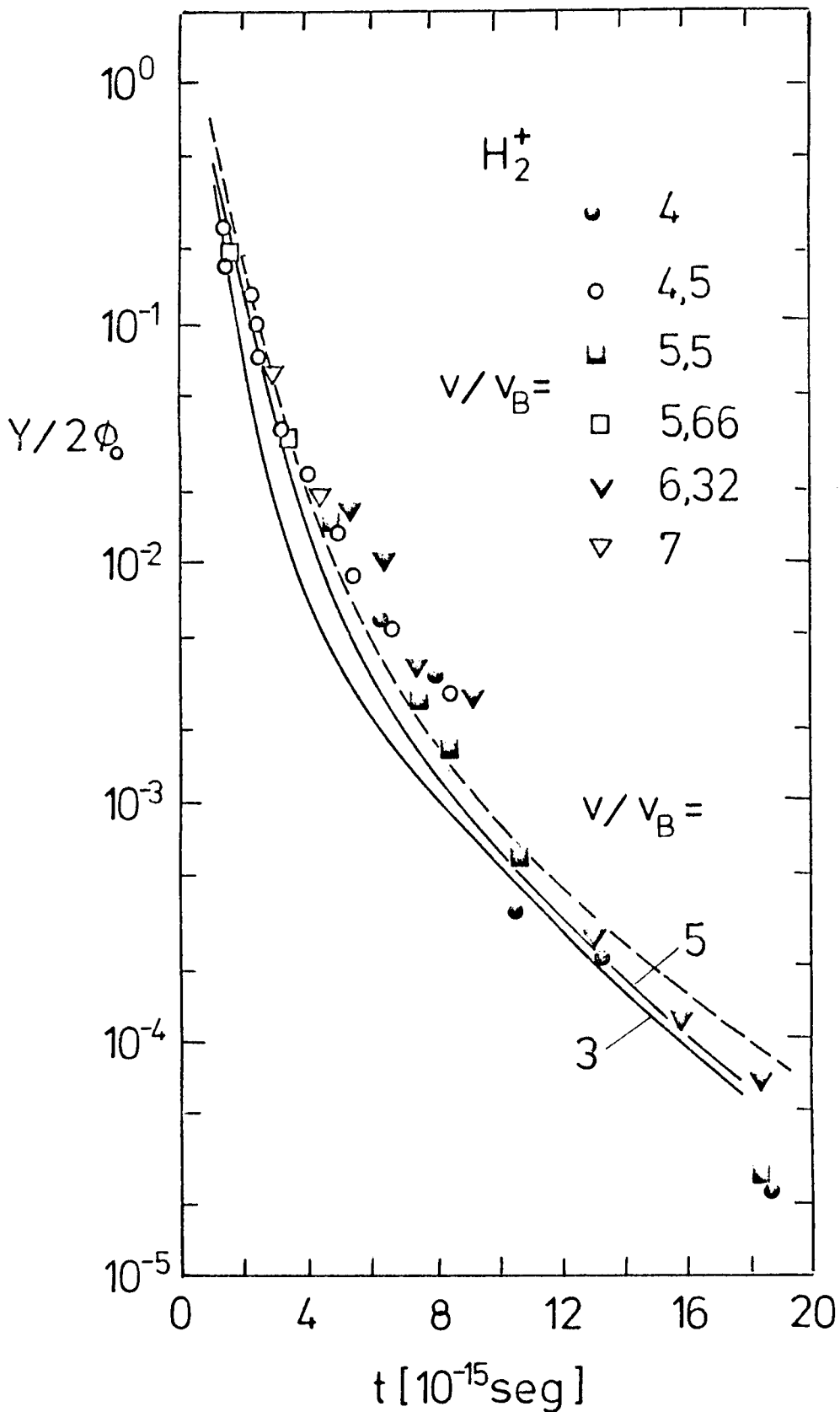


Fig.12 : Probabilidad de transmisión reducida para moléculas de H_2^+ en función del tiempo de pasaje sobre láminas de carbono. Línea cortada : resultados de Cue et al ⁴⁾ . Línea continua: nuestros cálculos para diferentes velocidades.

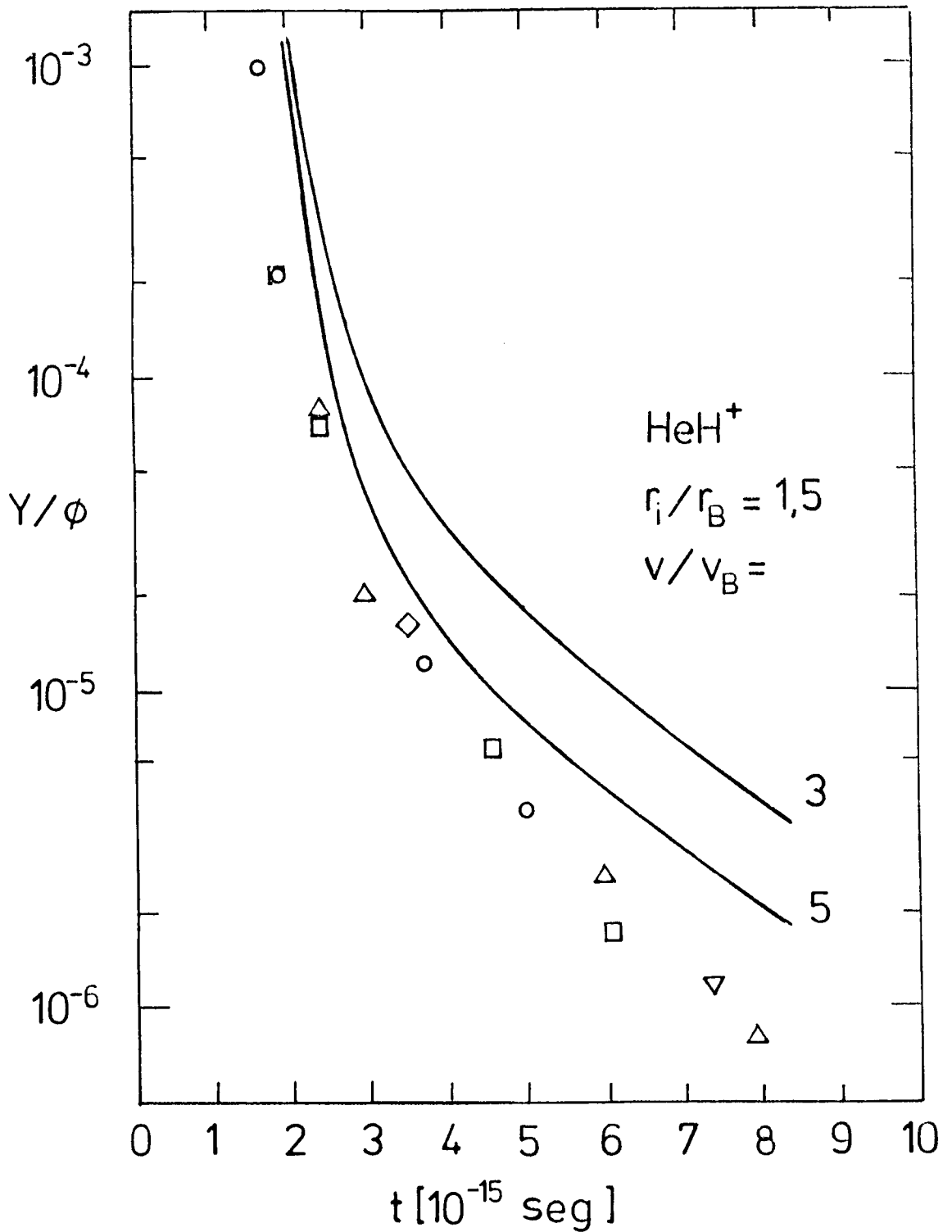


Fig. 13 : Probabilidad de transmisión reducida para moléculas de HeH^+ en función del tiempo de pasaje sobre láminas de carbono. Línea continua : nuestros cálculos para diferentes velocidades. Resultados experimentales : Ref. 3 .

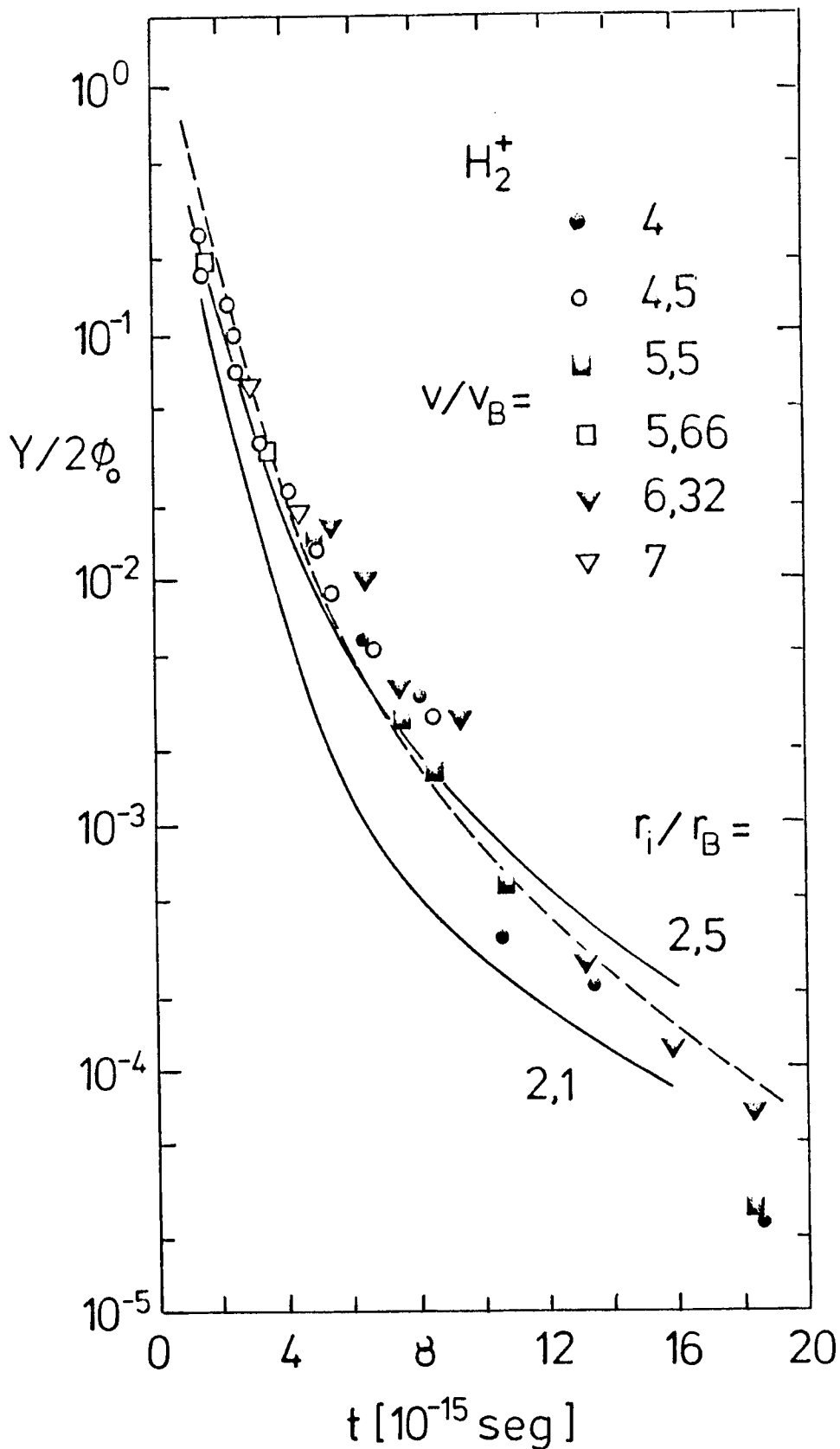


Fig. 14 : Probabilidad de transmisión reducida para moléculas de H_2^+ en función del tiempo de pasaje sobre láminas de carbono. Línea cortada : resultados de Cue et al.⁴⁾. Línea continua : nuestros resultados para diferentes distancias internucleares iniciales.

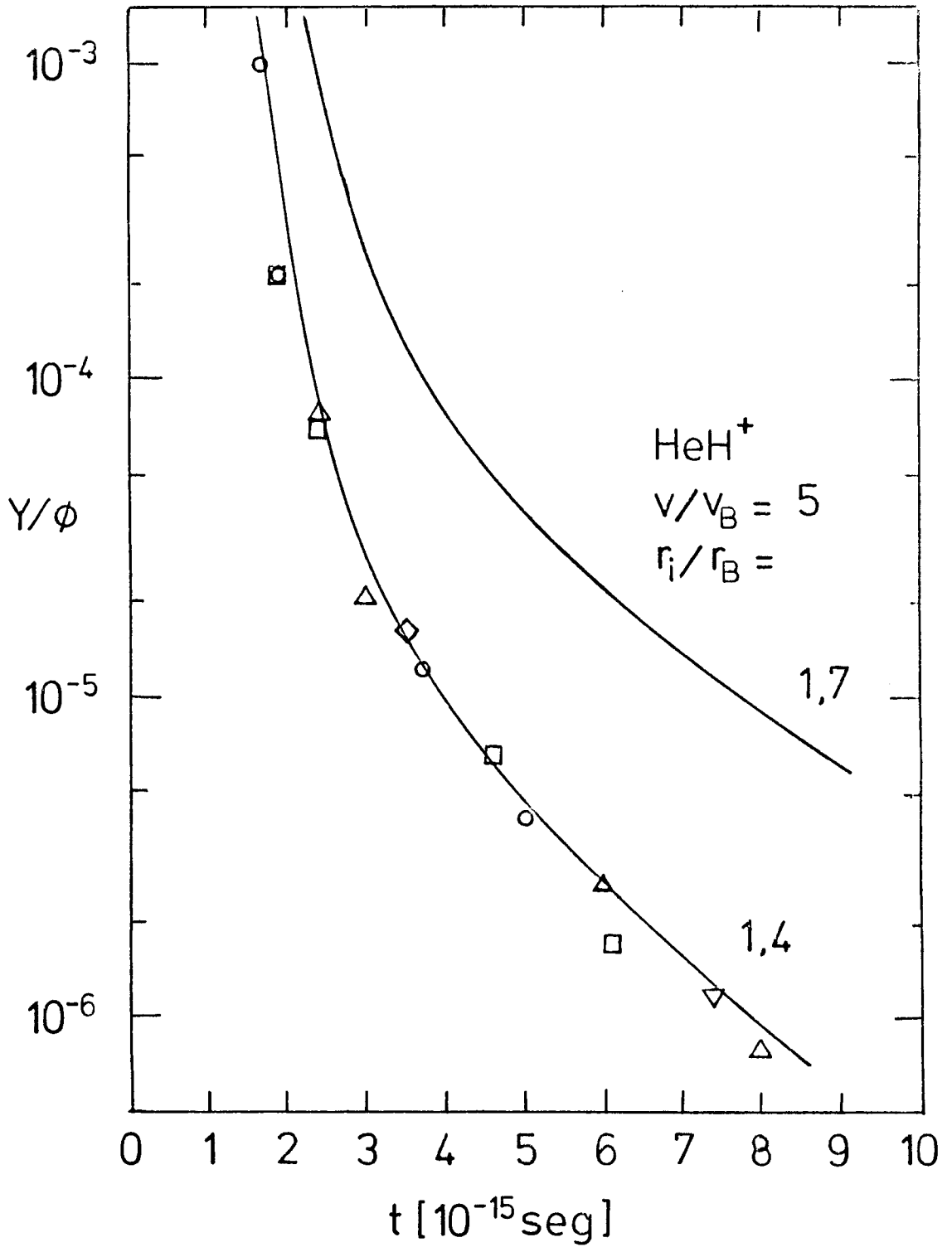


Fig. 15 : Probabilidad de transmisión reducida para moléculas de HeH^+ en función del tiempo de pasaje sobre láminas de carbono. Línea continua : nuestros cálculos para diferentes distancias internucleares iniciales.

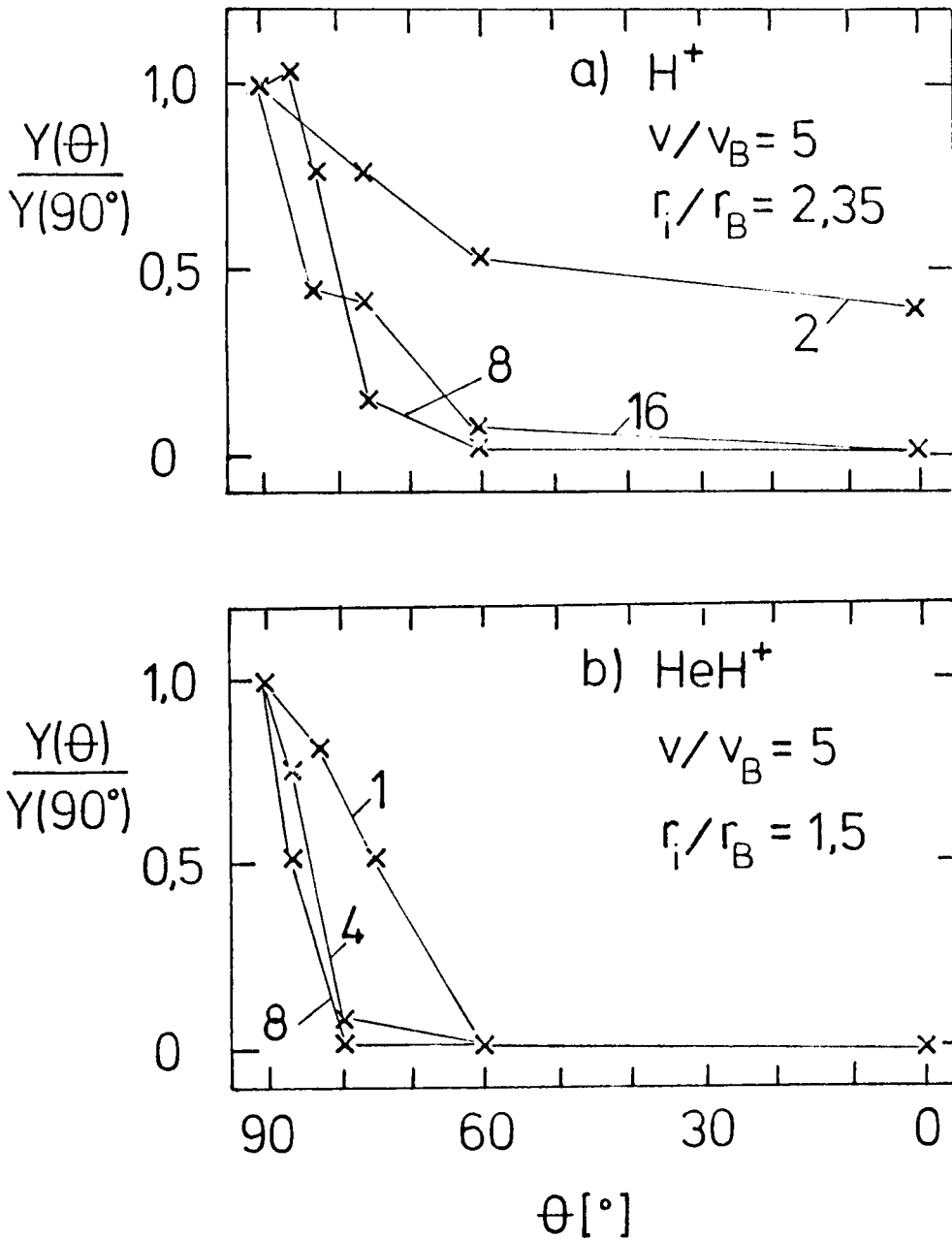


Fig. 16 : Probabilidad de transmisión reducida en función del ángulo θ que forma el eje internuclear con la dirección del movimiento, y normalizada a aquella para $\theta = 90^\circ$. Esto a su vez, para distintos tiempos de pasaje indicados en cada curva en unidades de 10^{-15} seg.

efecto es más pronunciado para el HeH^+ dado que aquí las distancias iniciales son menores que para el caso de H_2^+ . Esto fué observado experimentalmente por Kanter ⁷⁾ quién ha medido la transmisión de HeH^+ proveniente de dos fuentes de iones diferentes y el resultado muestra que al mismo tiempo de pasaje la transmisión es mayor cuando se utiliza la fuente caracterizada por producir iones de HeH^+ con distancias internucleares mayores. Se desprende de estos hechos que para comparar los cálculos con resultados experimentales o para la interpretación de estos últimos se debe tener especial cuidado respecto a las condiciones en las que fueron generados los iones moleculares.

En las Figs.16a y b tenemos ahora la probabilidad de transmisión reducida calculada para H_2^+ y HeH^+ en función de la orientación inicial del eje internuclear respecto a la dirección del haz y normalizada a aquella evaluada con el eje internuclear perpendicular al haz, esto a su vez para diferentes tiempos de pasaje sobre un blanco de carbono. Vemos allí un pronunciado efecto de la orientación inicial sobre la transmisión molecular, especialmente para el HeH^+ . Resulta de nuestro cálculo que la probabilidad de recomponer la molécula aumenta con el ángulo que forma el eje internuclear con la dirección del movimiento y esto es más pronunciado con el aumento del tiempo de pasaje, al menos para los tiempos que estamos considerando. La explicación de este comportamiento se desprende de lo que sigue: como ya dijimos anteriormente las dispersiones múltiples actúan en el plano perpendicular a la dirección del movimiento, en cambio sobre esta última actúa la fluctuación en la pérdida de energía; el efecto de estos mecanismos es el de indeterminar las respectivas componentes de la velocidad y la posición a lo largo del tiempo de pasaje, ocurre por otra parte que la fluctuación en la pérdida de energía es relativamente poco eficiente para este efecto y podemos despreciarla. Tenemos entonces que aquellas moléculas que penetran con su eje internuclear paralelo al haz y con velocidad relativa nula tendrán un continuo aumento de las componentes de la velocidad y posición relativas en aquella di-

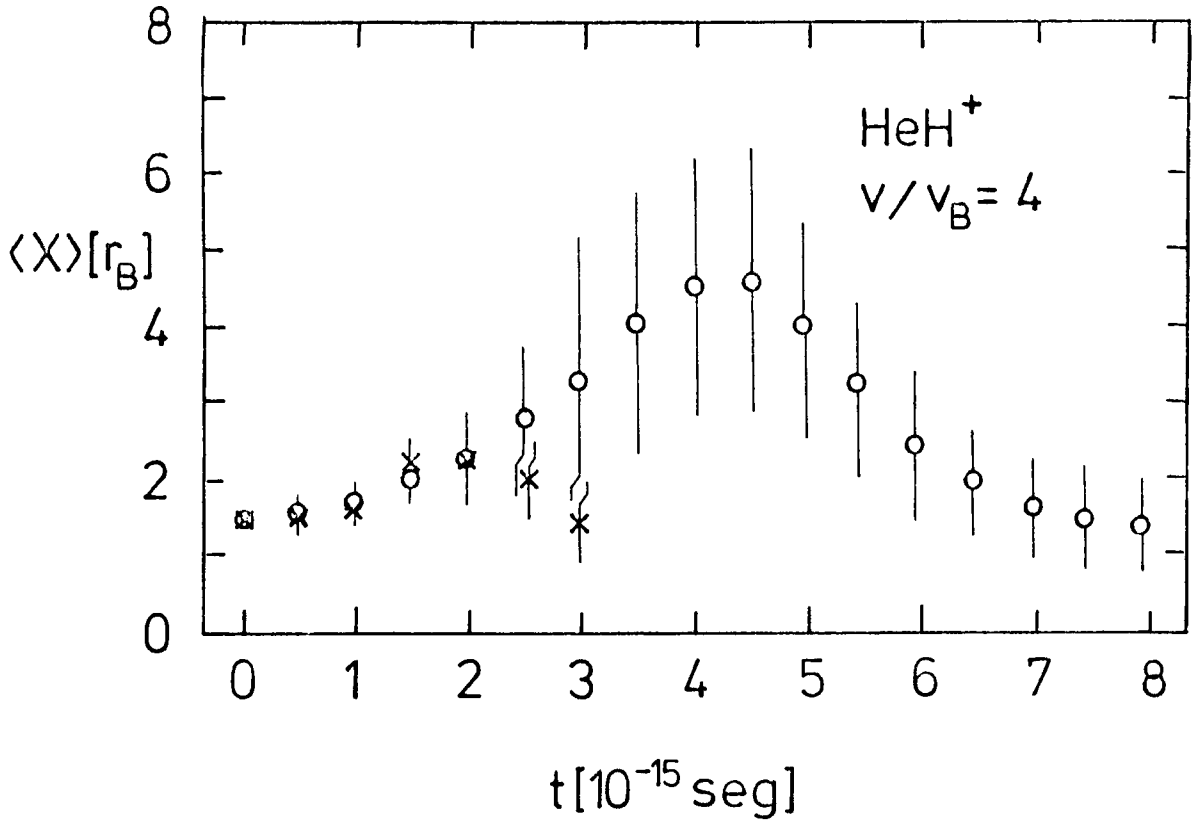


Fig. 17 : Posición relativa media de los fragmentos de HeH^+ que se recombinan a la salida de una lámina de carbono en función del tiempo . Las barras representan la dispersión media de la posición . Calculos hechos para tiempos de pasaje :
 x : 3×10^{-15} seg, y o : 8×10^{-15} seg.

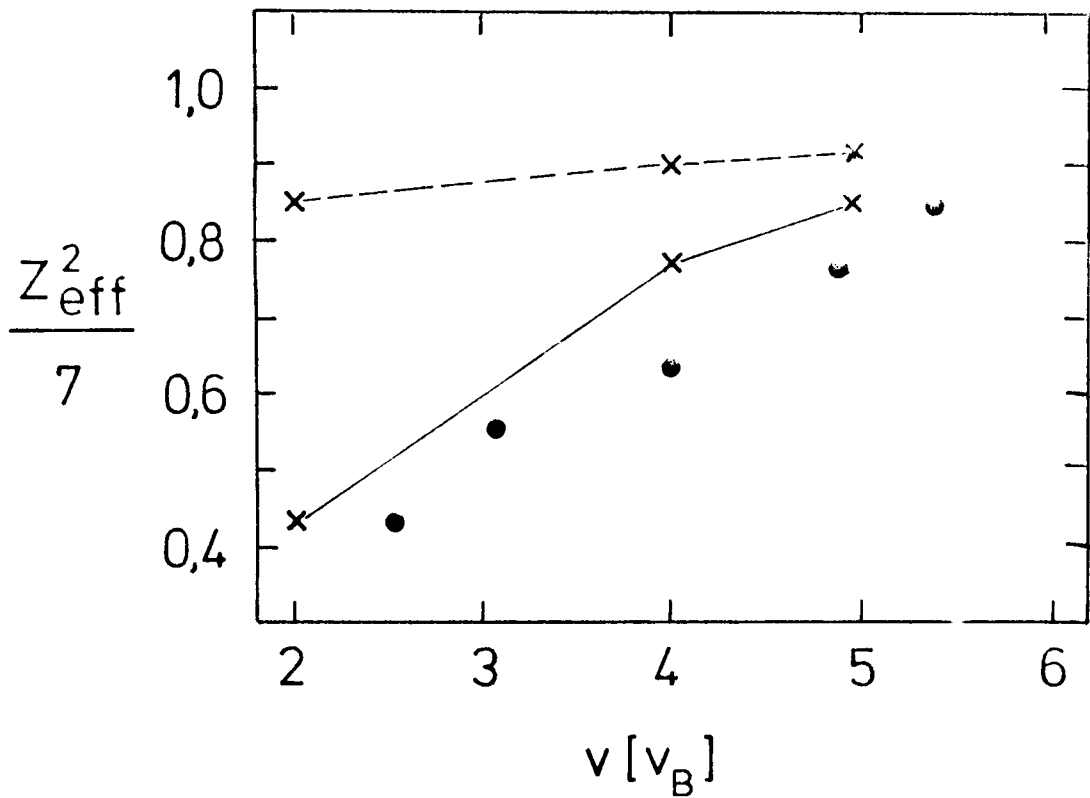


Fig. 18 : Número atómico efectivo en función de la velocidad de bombardeo para proyectiles de HeII^+ transmitidos en una lámina de carbono de $8\mu\text{g}/\text{cm}^2$. Experimento : círculos llenos . Línea cortada : nuestros cálculos sin considerar cargas efectivas para los fragmentos . Línea continua : considerando cargas efectivas para los fragmentos.

rección a causa de la explosión coulombiana y además una progresiva indeterminación de sus componentes perpendiculares que en todo caso solo contribuyen a aumentar aun más la distancia internuclear y la velocidad relativa. En cambio para algunas de aquellas que entren con sus ejes perpendiculares al haz, puede ocurrir que la dispersión múltiple actúe de forma tal que se oponga al desarrollo de la explosión coulombiana y por lo tanto esto permitirá que a la salida de la lámina se encuentren con velocidades y separaciones relativas pequeñas tales como las requeridas para reconstituir una molécula. Es imprescindible para comprender lo que dijimos tener en cuenta que la explosión coulombiana se desarrolla en general en tiempos pequeños ($\sim 10^{-15}$ seg) de modo que desde entonces casi todas las moléculas resultarían impedidas de recombinarse a no ser fundamentalmente por la dispersión múltiple.

Discutiremos ahora brevemente un problema de gran interés en el tema de transmisión de moléculas cual es el frenamiento de las mismas. El frenamiento de los fragmentos moleculares muestra efectos de interferencia y por lo tanto la pérdida media de energía de la molécula no es simplemente la suma de las correspondientes pérdidas de energías de cada uno de los fragmentos. Teóricamente se demuestra que la pérdida media de energía por unidad de camino para un par de cargas: Z_1e y Z_2e moviéndose con velocidad v en un medio a quién se lo aproxima por un gas de electrones degenerados viene dado por la expresión ¹⁴⁾:

$$\left\langle \frac{dE}{dR} \right\rangle = \frac{e^2}{2\pi^2 v} \int d\vec{k} \frac{\vec{k} \cdot \vec{v}}{k^2} \text{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})} \right] (Z_1^2 + Z_2^2 + 2Z_1 Z_2 \cos \vec{k} \cdot \vec{n}) \quad (41)$$

donde $\epsilon(\vec{k}, \omega)$ es la constante dieléctrica del gas de electrones en función de la frecuencia y del vector número de onda de la excitación; y \vec{n} es la separación entre las cargas.

En la aproximación de altas velocidades, tenemos:

$$\text{Im} \left[-1/\epsilon(\vec{k}, \omega) \right] \simeq \frac{\pi \omega_p^2}{2\omega_k} [\delta(\omega - \omega_k) - \delta(\omega + \omega_k)] \quad (42)$$

Por lo tanto (41) nos queda :

$$\left\langle \frac{dE}{dR} \right\rangle = \left(\frac{e\omega_p}{v} \right)^2 \ln \left(\frac{k_2}{k_1} \right) (z_1^2 + z_2^2 + 2z_1 z_2 G) \quad (43)$$

donde

$$G = \int_{k_1}^{k_2} \frac{dk}{k} J_0(kr_{\perp}) \cos(kr_{\parallel}) / \ln(k_2/k_1) \quad (44)$$

$$\omega_k^2 = \omega_p^2 + (\hbar k^2 / 2m)^2 \quad (45)$$

aquí m es la masa del electrón y ω_p la frecuencia del plasma electrónico. Además k_2 y k_1 son las raíces de la ecuación:

$$\omega_p^2 + (\hbar k^2 / 2m)^2 - k^2 v^2 = 0 \quad (46)$$

Lo que interesa aquí es que según (43) y (44) el frenamiento de la molécula dependerá de cuál ha sido la trayectoria seguida por los fragmentos durante el pasaje por el sólido. Para el caso de HeH^+ tenemos :

$$\left\langle \frac{dE}{dR} \right\rangle_{HeH^+} = \left(\frac{e\omega_p}{v} \right)^2 \ln \left(\frac{k_2}{k_1} \right) [5 + 4G] \quad (47)$$

que podemos escribir como :

$$\left\langle \frac{dE}{dR} \right\rangle_{HeH^+} = \left\langle \frac{dE}{dR} \right\rangle_H \cdot (5 + 4G) \quad (48)$$

A altas velocidades en general podemos escribir para cualquier otro proyectil de número atómico Z_p la igualdad:

$$\left\langle \frac{dE}{dR} \right\rangle_{Z_p} = \left\langle \frac{dE}{dR} \right\rangle_H \cdot Z_{p,eff}^2 \quad (49)$$

Donde $Z_{p,eff}$ es un número en general menor que Z_p y representa la "carga efectiva" con la que un dado proyectil actúa para el frenamiento. Esto ya lo hemos discutido, proviene de que el

proyector atómico no pierde completamente todos sus electrones. La Ec.(49) por lo tanto define al "número atómico efectivo" el que puede ser extendido al caso de la molécula. Debemos hacer sin embargo la siguiente aclaración : cuando se trata de moléculas el Z_{eff} tiene dos contribuciones, una es aquella de la que ya hablamos originada por la retención de los electrones más ligados y otra es de naturaleza propia de las moléculas y se debe a los efectos de interferencia cuya medida lo da el valor que tome la función G definida en la Ec.(44) . Por claridad , convendría llamar a la primera Z'_p ($p = 1, 2$) y luego :

$$Z_{\text{eff}}^2(\text{molec}) = Z_1'^2 + Z_2'^2 + 2Z_1'Z_2'.G \quad (50)$$

En la Fig.18 tenemos los resultados experimentales para el Z_{eff}^2 con proyectiles de HeH^+ en función de la velocidad sobre un blanco de $8\mu\text{g}/\text{cm}^2$ de carbono ; allí se toma en realidad $Z_{\text{eff}}^2/7$ por que en el trabajo de donde se tomaron los resultados experimentales⁴⁾ se supuso que $G \cong 0,5$. Para evaluar esta función , necesitamos conocer la trayectoria media seguida por aquellos fragmentos que luego se recombinarán a la salida de la lámina. Para esto tomamos nuestras aproximaciones de orden cero y calculamos la posición media en función del tiempo t comprendido entre cero y el tiempo de pasaje :

$$\langle \vec{r} \rangle (t) = \frac{\int d\vec{r} d\vec{v} F_o^+(\vec{r}, \vec{v}, t) \vec{r} F_o(\vec{r}, \vec{v}, t)}{\int d\vec{r} d\vec{v} F_o^+(\vec{r}, \vec{v}, t) F_o(\vec{r}, \vec{v}, t)} \quad (51)$$

Como ya hemos visto, las moléculas de HeH^+ transmitidas son en buena parte aquellas cuyo eje internuclear es perpendicular a la dirección del haz , entonces $\langle z \rangle \simeq 0$, si además $\langle y \rangle (t=0) = 0$ por simetría lo seguirá siendo a cualquier tiempo, luego sólo queda $\langle x \rangle$. En la Fig.17 mostramos los resultados de evaluar (51)

para $v = 4 \cdot v_B$ y distintos tiempos de pasaje. Vemos primeramente que la suposición de que aquellos fragmentos que se recombinan son los que han permanecidos próximos durante el pasaje por el blanco no es en general cierto especialmente para grandes tiempos. Con estos resultados y evaluando la función G obtenemos el Z_{eff} correspondiente a las moléculas de HeH^+ . Los números atómicos efectivos para el hidrógeno y el helio los tomamos de la expresión¹⁵⁾:

$$z_i' = z_i \cdot \left(1 - e^{-v/v_B \cdot z_i^{2/3}} \right) \quad (52)$$

Esta relación ha sido obtenida empíricamente a partir de la Ec.(49) y mediciones de frenamiento. Resulta interesante también evaluar el Z_{eff} de las moléculas transmitidas pero con $Z_p' = Z_p$ ($p = 1, 2$) a los efectos de ilustrar cuál es la contribución del efecto molecular o de interferencia al número atómico efectivo. Ambos resultados los podemos ver en la Fig.18 y de donde podemos concluir que el efecto molecular representa solo una pequeña parte en lo que hace al número atómico efectivo.

VI - Conclusiones y comentarios

Utilizando la teoría de transporte y una funcional variacional hemos calculado la probabilidad de transmisión de moléculas normalizadas a la probabilidad de captura de los electrones o bien lo que llamamos la probabilidad de transmisión reducida. Los resultados muestran un buen acuerdo con las mediciones existentes y permiten además interpretar los mismos en términos de los mecanismos elementales que entran en el cálculo. Conviene repetir que en tal sentido la transmisión de moléculas puede ser obtenida sin recurrir a otros ingredientes que no sean la explosión coulombiana, el frenamiento y la fluctuación en el mismo, y la dispersión múltiple. Aun cuando hemos discutido la dependencia de la transmisión sobre un buen número de parámetros, podría decirse que recién estamos en el principio del largo y pormenorizado estudio del problema requerido para poder sintetizar un conjunto muy grande y disperso de información experimental que en una buena parte ha sido hecha con ideas no muy bien fundadas sobre los posibles mecanismos que intervienen durante el pasaje de iones moleculares por el sólido, tales como la fuerza de polarización ("wake forces") y que con nuevas evidencias experimentales están perdiendo importancia. Enumeremos brevemente cuales son las posibles líneas sobre las cuales sería conveniente continuar investigando :

1- Efectos de diferentes potenciales de dispersión elástica y su correcta inclusión en el cálculo.

2- Estudio de la captura electrónica por los fragmentos moleculares a la salida de la lámina.

3- Dependencia de la transmisión con el material de la lámina.

4- Extender el cálculo a la descripción del movimiento del centro de masas de la molécula, con lo cual se podrá estudiar apropiadamente la distribución angular y el frenamiento de las moléculas transmitidas.

Referencias

- 1) J.C.Poizat y J.Remillieux, Phys.Letters A34, 53, (1971)
- 2) N.Cue, N.V.de Castro-Faria, M.J.Gaillard, J.C.Poizat y J.Remillieux, Phys.Letters A72, 104, (1979)
- 3) P.J.Cooney, D.S.Gemmell, W.J.Pietsch, A.J.Ratkowski, Z.Vager y B.J.Zabransky, Phys.Rev. A24, 746, (1981)
- 4) N.Cue, N.V.de Castro-Faria, M.J.Gaillard, J.C.Poizat, J.Remillieux, D.S.Gemmell y I.Plessler, Phys.Rev.Letters 45, 613, (1980)
- 5) N.Bohr, Dansk.Vid.Selsk.Mat.Fys.Medd. 18, 8, (1948); Phys.Rev. 58, 645, (1940); Phys.Rev. 59, 270, (1941)
- 6) N.Cue, N.V.de Castro-Faria, M.J.Gaillard, J.C.Poizat y J.Remillieux, Nucl.Instr.Meth. 170, 67, (1980)
- 7) E.P.Kanter, D.S.Gemmell, I.Plessler y Z.Vager, Nucl.Instr.Meth. 194, 307, (1982)
- 8) W.Brandt, Atom.Coll.Solids, Ed.S.Datz, B.R.Appleton y C.D.Moak, Plenum Press, N.Y., 1975, pag.261.
- 9) H.A.Bethe, Ann.Phys. 5, 325, (1930); R.H.Ritchie y W.Brandt, Phys.Rev. A17, 2102, (1978)
- 10) W.Brandt y R.H.Ritchie, Nucl.Instr.Meth. 132, 43, (1976)
- 11) W.Brandt, R.Laubert y A.Ratkowski, Nucl.Instr.Meth. 132, 57, (1976)
- 12) J.C.Slater, Quantum Theory of Molecules and Solids, V1, McGraw Hill Books Co., Inc. 1963, pag9 y 252.
- 13) E.P.Kanter, P.J.Cooney, D.S.Gemmell, Z.Vager, W.J.Pietsch y B.J.Zabransky, Nucl.Instr.Meth, 170, 87, (1980)
- 14) N.R.Arista, Phys.Rev.B18, 1, (1978); W.Brandt, A.J.Ratkowski y R.H.Rithcie, Phys.Rev.Letters, 33, 1325, (1974)
- 15) B.S.Yarlagadda, J.E.Robinson y W.Brandt, Phys.Rev. B17, 3473, (1978)

APENDICE 1

Nos ocuparemos aquí de buscar las soluciones de las ecuaciones :

$$\frac{\partial \bar{F}_0}{\partial z} + \hat{L}_0 \bar{F}_0 = 0 \quad \text{A1-1}$$

$$-\frac{\partial F_0^+}{\partial z} + \hat{L}_0^+ \bar{F}_0^+ = 0 \quad \text{A1-2}$$

con las condiciones de contorno :

$$\bar{F}_0(z=0, \vec{q}, \vec{k}) = \delta(\vec{k}) / (2\pi)^2 \quad \text{A1-3}$$

$$\bar{F}_0^+(z=z_0, \vec{q}, \vec{k}) = \delta(\vec{q}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}_0} / (2\pi)^2 \quad \text{A1-4}$$

donde, recordemos :

$$\hat{L}_0 = -\vec{q} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} + 2N\sigma_0(\vec{k}) \quad \text{A1-5}$$

$$\hat{L}_0^+ = \vec{q} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{k}} + 2N\sigma_0(\vec{k}) \quad \text{A1-6}$$

Veamos la primera de ellas:

$$\frac{\partial \bar{F}_0}{\partial z} - \vec{q} \cdot \frac{\partial \bar{F}_0}{\partial \vec{k}} + 2N\sigma_0(\vec{k}) \bar{F}_0 = 0 \quad \text{A1-7}$$

haciendo el cambio de variables:

$$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q} z \quad \text{A1-8}$$

A1-7 se puede escribir :

$$\frac{\partial \bar{F}_0}{\partial z} + 2N\sigma_0(\vec{k}' - \vec{q} z) \bar{F}_0 = 0 \quad \text{A1-9}$$

entonces:

$$\bar{F}_0(z, \vec{q}, \vec{k}') = e^{-2N \int_0^z dx \sigma_0(\vec{k}' - \vec{q} x)} h(\vec{k}', \vec{q}) \quad \text{A1-10}$$

donde h es una función que la obtenemos de la condición de contorno A1-3 y resulta :

$$\bar{F}_0(z, \vec{q}, \vec{h}) = \begin{cases} \frac{\delta(\vec{h} + \vec{q}_z)}{(2\pi)^2} e^{-2N \int_0^z dx \sigma_0(\vec{q}_x)} & ; z \geq 0 \\ 0 & ; z < 0 \end{cases} \quad \text{A1-11}$$

Luego para \bar{F}_0^+ el procedimiento es completamente similar y no vale la pena por lo tanto repetir detalladamente los pasos algebraicos necesarios para obtenerla , damos simplemente el resultado final :

$$\bar{F}_0^+(z, \vec{q}, \vec{h}) = \begin{cases} \frac{\delta(\vec{q})}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}_0 - 2N \sigma_0(\vec{k})(z_0 - z)} & ; z \leq z_0 \\ 0 & ; z > z_0 \end{cases} \quad \text{A1-12}$$

APENDICE 2

Ofrecemos aquí brevemente algunos detalles del cálculo de la función $F^+(t, \vec{r}, \vec{v})$ así también como de la cantidad $\langle F^+, \hat{V} F' \rangle$ (ver Ecs.(38) y (39) pág.61) utilizadas en el Capítulo 3 para evaluar la transmisión de moléculas por medio de una funcional variacional. Como ya señalamos en el primer capítulo nuestro procedimiento para obtener F^+ se basa en la expresión:

$$F^+ = \int d\sigma G^+ g \quad \text{A2-1}$$

donde G^+ es la función de Green adjunta del problema de transporte dado y g la distribución de fuentes del mismo. En nuestro caso:

$$g(t, \vec{r}_f, \vec{v}_f) = \delta(t - t_0) \times \begin{cases} 1 & ; \frac{1}{2} \mu v_f^2 + u(r_f) \leq 0 \\ 0 & ; \frac{1}{2} \mu v_f^2 + u(r_f) > 0 \end{cases} \quad \text{A2-2}$$

donde $U(\mathcal{N})$ es la energía potencial nuclear en un estado electrónico ligante. Luego hacemos la aproximación :

$$G^+(t_0, \vec{n}_f, \vec{v}_f \rightarrow t, \vec{n}, \vec{v}) \simeq F_{MS}(t_0 - t, \vec{n} - \vec{n}_c + \vec{n}_f, \vec{v} - \vec{v}_c + \vec{v}_f) \quad A2-3$$

donde F_{MS} es la solución de la ecuación de transporte con dispersión múltiple y fluctuación en la pérdida de energía pero sin repulsión coulombiana y con la condición de contorno

$$F_{MS}(t=0, \vec{n}, \vec{v}) = \delta(\vec{n} - \vec{n}_c) \cdot \delta(\vec{v} - \vec{v}_c) \quad A2-4$$

y donde \vec{n}_c y \vec{v}_c son la posición y la velocidad respectivamente de una partícula de masa μ en un campo coulombiano al tiempo t y tal que al tiempo t_0 :

$$\begin{aligned} \vec{n}_c(t_0) &= \vec{n}_f \\ \vec{v}_c(t_0) &= \vec{v}_f \end{aligned} \quad A2-5$$

Por lo tanto la evaluación de cantidades tales como:

$$\langle F^+, \bar{F} \rangle = \int d\vec{n} d\vec{v} F^+(t, \vec{n}, \vec{v}) \bar{F}(t, \vec{n}, \vec{v})$$

y

$$\langle F^+, \hat{V}F \rangle = \int d\vec{n} d\vec{v} F^+(t, \vec{n}, \vec{v}) \hat{V}F(t, \vec{n}, \vec{v})$$

las podemos escribir como:

$$\begin{aligned} \langle F^+, \bar{F} \rangle &= \int d\vec{n} d\vec{v} \int_{-\infty}^t dt' d\vec{v}_f d\vec{n}_f G^+(t', \vec{n}_f, \vec{v}_f \rightarrow t, \vec{n}, \vec{v}) g(t', \vec{n}_f, \vec{v}_f) \cdot \bar{F}(t, \vec{n}, \vec{v}) \\ \langle F^+, \hat{V}F \rangle &= \int d\vec{n} d\vec{v} \int_{-\infty}^t dt' d\vec{v}_f d\vec{n}_f G^+(t', \vec{n}_f, \vec{v}_f \rightarrow t, \vec{n}, \vec{v}) g(t', \vec{n}_f, \vec{v}_f) \hat{V}F(t, \vec{n}, \vec{v}) \end{aligned}$$

Vemos aquí que éstas requieren de una integración multidimensional, aquellas en las variables \vec{n} y \vec{v} pueden hacerse analíticamente pero sobre \vec{n}_f y \vec{v}_f lo hacemos por el método de Monte Carlo .

