

INTERACCION DE PARTICULAS CON SOLIDOS Y PLASMAS DENSOS;
 MODELO DE THOMAS-FERMI PARA ATOMOS CONFINADOS

Néstor R. Arista
 Centro Atómico Bariloche

En el presente trabajo se describen algunas aplicaciones recientes de modelos de gas de electrones inhomogéneos, para la descripción de sistemas atómicos confinados, y en particular en el tratamiento de la pérdida de energía de partículas rápidas en sólidos y en plasmas densos.

El modelo desarrollado consiste por una parte en una extensión de estudios anteriores de Lindhard y Winther para un gas de electrones degenerado, mediante la incorporación de efectos de degeneración parcial y condiciones de contorno apropiadas para describir sistemas atómicos confinados, y por otra, en la aplicación de los desarrollos de Marshak y Bethe, y de Feynman, Metropolis y Teller para el modelo de Thomas-Fermi generalizado a temperaturas finitas.

Los trabajos sobre gas de electrones permiten obtener expresiones para las excitaciones producidas por una partícula con carga $Z_1 e$ y velocidad v , y la correspondiente pérdida de energía en un gas de electrones de densidad n , frecuencia de plasma ω_p y velocidad de Fermi v_F , que puede calcularse a partir de una expresión integral que depende de la función dieléctrica del plasma $\epsilon(q, \omega)$, siendo $\hbar q$ y $\hbar \omega$ las transferencias de impulso y de energía al gas. Usando diversas aproximaciones para $\epsilon(q, \omega)$ pueden obtenerse expresiones analíticas para los casos $v \ll v_F$ y $v \gg v_F$, donde se incluyen efectos de excitaciones individuales y colectivas del gas de electrones.

La extensión de éstos modelos al caso de sistemas atómicos fue estudiada mediante una aproximación de respuesta dieléctrica local para un sistema inhomogéneo, y donde la dependencia de $n(r)$, $\omega_p(r)$ y $v_F(r)$ se describe con modelos atómicos estadísticos (Thomas-Fermi y Lenz-Jensen).

Para extender este tratamiento al caso de temperaturas finitas es necesario considerar primeramente el análisis de

respuesta dieléctrica para un gas de electrones parcialmente degenerado [1], obteniendo desarrollos para $\epsilon(q,\omega)$ para un grado de degeneración arbitrario. A partir de este análisis es posible describir en forma completa los efectos cuánticos y térmicos sobre el proceso de pérdida de energía [2] y obtener nuevas aproximaciones analíticas para los casos de altas y bajas velocidades.

Por otra parte, la generalización del modelo atómico de Thomas-Fermi al caso de temperaturas finitas conduce a una expresión integrodiferencial para el potencial $V(r)$ del tipo:

$$\nabla^2 V(r) = 4\pi e n(r) = \frac{2}{\pi \hbar^3} (2m kT)^{3/2} I_{1/2} \left[\frac{eV(r)}{kT} - \eta \right]$$

en el interior de una esfera con $r < r_0$, y con condiciones de contorno en $r=r_0$ ($I_{1/2}$ es una integral de Fermi de orden 1/2).

El modelo que hemos propuesto para el caso de sólidos y plasmas densos se basa en esta descripción, en conjunción con las expresiones para la respuesta dieléctrica y la pérdida de energía de un gas parcialmente degenerado. A modo de ilustración se incluyen algunos resultados calculados mediante esta descripción [3,4].

La Fig.1 muestra perfiles de densidad electrónica $n(r)$, para átomos de Au confinados en una celda de radio $r_0 = 3.02$ a.u. (correspondiente a la densidad normal, $\rho = 19.3$ g/cm³), y para temperaturas entre 0 y 3 KeV. Puede observarse aquí el efecto de ionización térmica sobre los electrones del "core". Cálculos similares para diversos radios r_0 , permiten estudiar los efectos de ionización por presión.

La Fig.2 muestra la dependencia del poder de frenamiento $S = dE/\rho dx$, con la temperatura y energía de las partículas. Puede verse que S presenta un máximo al aumentar la temperatura. Este incremento en la pérdida de energía ha sido comprobado experimentalmente [5], y puede asignarse a una competencia entre efectos cuánticos (degeneración variable) y térmicos (cinéticos) como resultado de la redistribución de densidad electrónica mostrada en la Fig.1 [3].

Por último, se ha estudiado en mayor detalle el caso de temperatura $T=0$, correspondiente a la transmisión de partículas en sólidos, en el cual existen abundantes datos experimentales.

En la Fig.3 se muestran resultados para la energía de excitación media I , a través de la relación $I_0 = I/Z_2$ (triángulos), en función del número atómico del sólido Z_2 , y se comparan con los datos experimentales (círculos).

En conclusión, podemos indicar que el modelo propuesto permite describir la dependencia con Z_2 , para todos los elementos sólidos, y puede ser fácilmente extendido para describir sistemas atómicos a altas temperaturas.

- [1] N.R.Arista and W.Brandt, Phys.Rev.A23, 1898 (1981); Phys. Rev. A29, 1471 (1984).
- [2] N.R. Arista, J.Phys. C18, 5127 (1985).
- [3] N.R. Arista and A.R. Piriz (a publicarse)
- [4] N.R. Arista (a publicarse)
- [5] T.A. Mehlhorn, Phys. Rev. Lett. 49, 549 (1982).

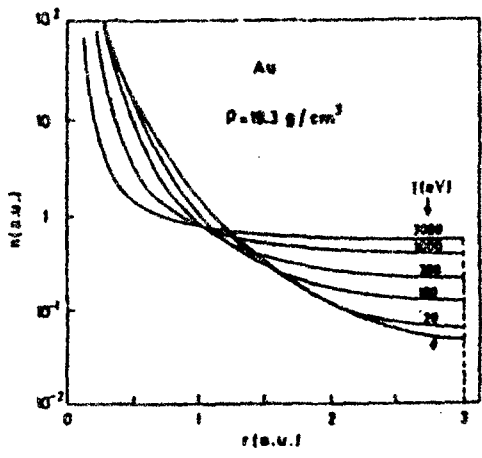


Fig. 1

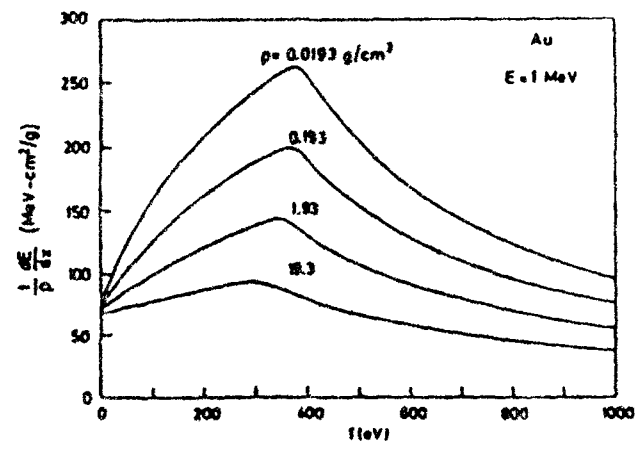


Fig. 2

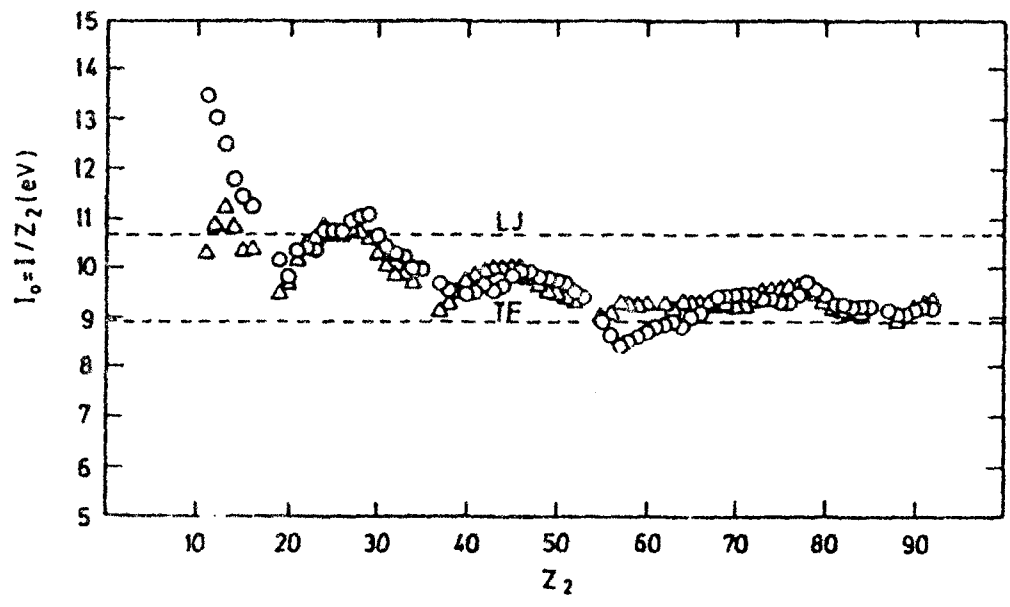


Fig. 3