

01.77.06

C. N. S. de Física	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1977

FRENAMIENTO ELECTRONICO Y RADIACION DE TRANSICION
DE IONES MOLECULARES RAPIDOS AL ATRAVESAR LAMINAS SOLIDAS

Néstor Ricardo Arista

TESIS DOCTORAL

Instituto de Física "Dr. J. A. Balseiro"

Universidad Nacional de Cuyo

1977

01.77.

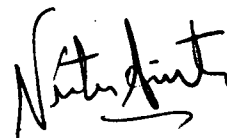
FRENAMIENTO ELECTRONICO Y RADIACION DE TRANSICION DE IONES
MOLECULARES RAPIDOS AL ATRAVESAR LAMINAS SOLIDAS

Néstor Ricardo Arista

Tesis presentada ante la Facultad de Ciencias de la Universidad Nacional de Cuyo, República Argentina, para optar al título de Doctor en Física



Dr. Raúl A. Baragiola
Asesor Científico



Lic. Néstor R. Arista

San Carlos de Bariloche (R.N.)

Argentina

1977

RESUMEN

En la primera parte del presente trabajo se estudia teóricamente la pérdida de energía de un grupo de cargas rápidas (no relativistas) en un gas de electrones. Primeramente se consideran modelos simples para describir la pérdida de energía de partículas rápidas, teniendo en cuenta la excitación de modos colectivos y las colisiones próximas con electrones individuales. Se da luego una descripción más consistente mediante el formalismo de Lindhard para la respuesta dieléctrica de un gas de electrones degenerado.

Los resultados permiten explicar la existencia de efectos de agrupamiento en la pérdida de energía de iones moleculares rápidos en láminas delgadas, en satisfactorio acuerdo con evidencias experimentales recientes.

En la segunda parte se describen efectos de interferencia en la radiación de transición emitida cuando un grupo de cargas no relativistas atraviesa la superficie de un medio material. En particular, se considera la posibilidad de observar estos efectos cuando iones moleculares rápidos se hacen incidir sobre láminas sólidas delgadas.

ABSTRACT

The first part of this work is devoted to a theoretical consideration of the energy loss of swift clusters of charges in an electron gas. We first consider simple models to describe the energy loss of fast (non-relativistic) charges, due to the excitation of long-wavelength plasmons and to short-range collisions with individual electrons. A more consistent description is thereafter given, using Lindhard's formalism for the dielectric response of a degenerate electron gas.

The results show the existence of interference effects in the energy loss of swift molecular ions traversing thin solid films, in satisfactory agreement with recent experimental evidence.

In the second part we describe interference effects in transition radiation emitted when a cluster of non-relativistic charges crosses the surface of a material medium. We consider, in particular, the possibility of observing these effects when swift molecular ions pass through thin solid films.

AGRADECIMIENTOS

El desarrollo del presente trabajo se ha visto beneficiado por el amplio estímulo y espíritu de colaboración encontrado en el grupo de colisiones atómicas, a cuyos integrantes expreso aquí mi reconocimiento.

Agradezco muy particularmente a V.H.Ponce y a T.E.Huber por su participación en los estudios de pérdida de energía y radiación de transición de cargas rápidas.

Agradezco también a W.Meckbach, J.C.Eckardt, V.Grunfeld de Alascio y B.Alascio, por estimulantes discusiones y comentarios de interés.

Finalmente, agradezco en forma muy especial a R.A.Baragiola por la discusión de innumerables problemas y por su crítica y estímulo permanentes.

I N D I C E

<u>PRIMERA PARTE: EFECTOS DE AGRUPAMIENTO EN LA PERDIDA DE ENERGIA DE CARGAS RAPIDAS (NO RELATIVISTAS)</u>	1
1. Introducción:	
a) Pérdida de energía de partículas cargadas en la materia	2
b) Interacción de proyectiles moleculares con sólidos y pérdida de energía	4
c) Descripción del trabajo	5
<u>CAPITULO 1: Pérdida de energía de cargas rápidas en un gas de electrones.</u>	7
2. Formalismo dieléctrico para la pérdida de energía	7
3. Descripción cuántica de la pérdida de energía por excitaciones individuales de electrones libres	12
4. Proyectil diatómico	15
5. Resultados para la pérdida de energía	21
<u>CAPITULO 2: Pérdida de energía con el modelo de Lindhard para el gas de electrones</u>	25
6. Respuesta dieléctrica de un gas de electrones	25
7. Cálculo de la pérdida de energía	29
8. Límite de bajas velocidades	33
9. Límite de altas velocidades	35
10. Integraciones numéricas	36
11. Pérdida de energía y regla de partición	42
<u>CAPITULO 3: Pérdida de energía de iones moleculares en láminas delgadas</u>	45
12. Efecto del ancho de la resonancia de plasma	45
13. Corrección por excitación de capas internas	47
14. Integración de la pérdida de energía en una lámina	50
15. Comparación con resultados experimentales	52

<u>SEGUNDA PARTE: EFECTOS DE INTERFERENCIA EN LA RADIACION</u> DE TRANSICION DE CARGAS NO RELATIVISTAS	56
1.Introducción:	
a)Consideraciones previas	57
b)Descripción del trabajo	58
2.Ecuaciones de Maxwell y vector de Hertz	59
3.Campos de un grupo de cargas en un medio infinito	60
4.Cálculo de los campos para un medio semi-infinito	62
5.Campos de radiación	64
6.Radiación de transición	67
7.Radiación de transición de iones moleculares en láminas sólidas	70
Comentarios finales	73
Apéndice:Radiación de transición para incidencia oblicua	76
REFERENCIAS	79

PRIMERA PARTE

EFFECTOS DE AGRUPAMIENTO EN LA PERDIDA DE ENERGIA
DE CARGAS RÁPIDAS (NO RELATIVISTAS)

1. Introducción

a) Pérdida de energía de partículas cargadas en la materia

El frenamiento de partículas cargadas en la materia ha sido un tema estudiado durante muchos años¹⁻⁶, siendo por esta causa la bibliografía sumamente abundante. Nos limitaremos aquí a mencionar algunos hechos de interés en lo que concierne a la pérdida de energía de cargas rápidas en materiales sólidos.

Los procesos que contribuyen a la pérdida de energía de partículas cargadas no relativistas son las colisiones elásticas con los átomos del material frenante, y procesos inelásticos de excitación e ionización de los electrones de dichos átomos. Los procesos de colisiones elásticas son importantes a bajas energías (en el rango de los KeV/nucleón), pero su contribución disminuye rápidamente a energías mayores, de modo que no serán de interés en el presente trabajo. Consideraremos aquí velocidades mayores que la velocidad de Bohr ($v_B = 2.2 \times 10^8$ cm/seg), aunque pequeñas respecto a la velocidad de la luz.

En uno de los primeros trabajos sobre la pérdida de energía de partículas cargadas, N. Bohr estableció un importante criterio de adiabaticidad^{2,3}. Para ilustrar este concepto consideremos un electrón atómico que es perturbado por una partícula cargada que incide con velocidad v y parámetro de impacto b ; el tiempo de interacción entre la carga y el electrón será del orden de b/v , mientras que el electrón atómico tendrá asociado un tiempo característico $t_v = \omega_v^{-1}$ (ω_v puede considerarse como la frecuencia de revolución clásica). Puede verse que si el tiempo de interacción es suficientemente grande comparado con t_v el electrón puede acomodarse adiabáticamente al efecto de la perturbación, sin producirse transferencia neta de energía. Esto permite identificar un parámetro de impacto adiabático $b_{ad} = v/\omega_v$, tal que las colisiones con $b \gg b_{ad}$ no dan lugar a pérdidas de energías apreciables. El concepto de adiabaticidad puede formularse también cuánticamente⁷ si se considera la probabilidad de excitar un electrón atómico transfiriéndole una energía de excitación E_v . El tiempo característico de la transición es \hbar/E_v y el correspondiente parámetro de impacto adiabático es $b_{ad} = \hbar v/E_v$. La vinculación entre el caso clásico y el

cuántico resulta pues de reemplazar ω_v^{-1} por \hbar/E_v .

El tratamiento cuántico de la pérdida de energía fue realizado por Bethe^{4,5} en 1930, usando la aproximación de Born para calcular la sección eficaz diferencial para dispersión inelástica. Para velocidades mayores que las de los electrones del material frenante, la fórmula obtenida por Bethe para la pérdida de energía por unidad de distancia recorrida de una carga Ze es:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi e^4 Z^2}{mv^2} n_a B \quad (1.1)$$

siendo

$$B = Z' \ln(2mv^2/U) \quad (1.2)$$

donde v es la velocidad del proyectil, e y m son la carga y masa del electrón, U es el potencial de excitación medio de los átomos del material frenante, Z' es su número atómico y n_a es la densidad de átomos del mismo. El término dE/dx es llamado el poder de frenamiento de dicho material, y el factor adimensional B es denominado el número de frenamiento.

Otro tratamiento importante de la pérdida de energía es el formalismo dieléctrico, introducido por Fermi⁸ para describir la pérdida de energía en materiales densos, usando un modelo de osciladores clásicos para los electrones atómicos. Posteriormente Lindhard y Winther⁹ usaron el formalismo dieléctrico para calcular la pérdida de energía en un gas de electrones, mediante una descripción cuántica de los electrones en base al modelo de Lindhard¹⁰ para la constante dieléctrica. En razón de su simplicidad, este modelo ha sido usado posteriormente en forma extensiva para cálculos de pérdida de energía¹¹, straggling¹² (dispersión en la pérdida de energía), caminos libres medios de electrones en sólidos¹³, etc. Con posteriores refinamientos, mediante una descripción de densidades electrónicas con funciones de onda atómicas de Hartree-Fock-Slater, el modelo de Lindhard y Winther ha sido aplicado al cálculo de poderes de frenamiento de todos los elementos de la tabla periódica¹⁴, obteniéndose una descripción satisfactoria para las oscilaciones del frenamiento en función del número atómico de los átomos del blanco.

En el trabajo nos referiremos frecuentemente a la pérdida de energía por unidad de tiempo, que denotamos por dW/dt . El poder de frenamiento dE/dx es convencionalmente definido como la pérdida de energía por unidad de distancia recorrida. En consecuencia la relación entre ambas magnitudes es simplemente

$$\frac{dE}{dx} = \frac{1}{v} \frac{dW}{dt} \quad (1.3)$$

b) Interacción de proyectiles moleculares con sólidos y pérdida de energía

Los fenómenos de interacción de proyectiles moleculares con láminas sólidas delgadas han motivado gran interés recientemente, permitiendo obtener mayor información sobre el comportamiento de iones rápidos en sólidos^{15,16}. En particular se ha estudiado la disociación de iones moleculares rápidos al atravesar láminas delgadas^{17,18}, lo cual ocurre debido a que los electrones de unión de la molécula son arrancados al penetrar ésta las primeras capas atómicas, y los iones atómicos resultantes se repelen con fuerzas coulombianas modificadas por el apantallamiento dinámico y la generación de ondas de plasma^{18,19}. Algunos efectos interesantes han sido además observados cuando iones moleculares se hacen incidir, sobre láminas monocristalinas, en direcciones de channelling^{20,21}. También se han encontrado efectos moleculares en la emisión de radiación característica de los iones transmitidos²² y en la emisión de electrones secundarios²³.

El problema que concierne a la primer parte del presente trabajo es la pérdida de energía de iones moleculares en láminas delgadas, fenómeno que ha sido previamente descrito en forma teórica^{24,25} y observado experimentalmente^{24,26}. El aspecto físico que diferencia a este problema del de la pérdida de energía de iones atómicos es que cuando dos o más cargas se mueven en un medio material manteniéndose a distancias relativas pequeñas (de algunos angstroms), los electrones del material pueden ser excitados en forma correlacionada por las cargas incidentes, lo cual afecta la disipación de energía; o sea, la energía transferida por dichas

cargas a los electrones será distinta según que las cargas estén agrupadas o estén muy distanciadas entre sí.

En el presente trabajo usaremos el formalismo dieléctrico previamente mencionado para calcular la pérdida de energía, discutiendo diversos aspectos del problema con el modelo de un gas de electrones, y analizando posteriormente el caso de iones moleculares rápidos en láminas de carbono.

c) Descripción del trabajo

El problema que consideramos en esta primer parte presenta dos aspectos principales: en primer lugar se estudia la pérdida de energía de un grupo de cargas no relativistas moviéndose en un gas de electrones libres, considerando primeramente un modelo sencillo apropiado para velocidades grandes de las cargas (con respecto a la velocidad de Fermi del gas de electrones) y usando luego el modelo de constante dieléctrica de Lindhard, que permite estudiar todo el rango de velocidades. En segundo lugar, los resultados se aplican a la descripción de efectos de agrupamiento en la pérdida de energía de iones moleculares en láminas sólidas delgadas, fenómeno de reciente observación experimental.

Esta primer parte se divide en tres capítulos. En el Capítulo 1 se considera un modelo relativamente simple para las excitaciones del gas de electrones, apropiado para calcular la pérdida de energía de cargas rápidas, tratando en forma separada la excitación de electrones individuales y de oscilaciones de plasma. Este tratamiento permite obtener resultados analíticos sencillos, y pone de manifiesto los parámetros y aspectos físicos relevantes del problema.

Un estudio más sistemático de la pérdida de energía de cargas correlacionadas se realiza en el Capítulo 2, usando el modelo de Lindhard para la constante dieléctrica de un gas de electrones; este modelo permite tratar dentro de un mismo formalismo los procesos de excitaciones colectivas e individuales, dando una descripción más precisa de los mismos. En particular, permite calcular la pérdida de energía para velocidades bajas (respecto de la velocidad de Fermi), y determinar el rango de velocidades en el cual los resultados del Capítulo 1 son aplicables. Permite, por último,

descartar la existencia de una vinculación general entre la pérdida de energía de cargas correlacionadas y la regla de partición para las contribuciones al frenamiento de cargas simples, debidas a excitaciones colectivas e individuales.

En el Capítulo 3 se considera el problema específico de la pérdida de energía de un grupo de iones en láminas sólidas delgadas. Los resultados de los Capítulos 1 y 2 se utilizan para calcular la pérdida de energía por excitación de los electrones de valencia, considerándose correcciones debido al ancho de la resonancia de plasma y a la excitación de capas internas. Se calcula finalmente la pérdida de energía de moléculas de hidrógeno al atravesar láminas de carbono, comparándose los resultados con datos experimentales recientes.

CAPITULO 1

PERDIDA DE ENERGIA DE CARGAS RAPIDAS EN UN GAS DE ELECTRONES

Resumen: En la sección 2 se estudia la pérdida de energía de un grupo de cargas mediante el formalismo general de respuesta dieléctrica.

En la sección 3 se considera la pérdida de energía debida a excitaciones individuales en un gas de electrones, suponiendo que la velocidad de las partículas cargadas es grande en relación a las velocidades de los electrones.

En las secciones 4 y 5, los resultados de las secciones previas se aplican al cálculo de la pérdida de energía de dos cargas rápidas en un gas de electrones, discutiéndose separadamente las contribuciones debidas a excitaciones individuales y colectivas; y considerando finalmente tres casos límites importantes para la separación entre las cargas.

2. Formalismo dieléctrico para la pérdida de energía

Obtendremos aquí una expresión general para la energía disipada por un conjunto de cargas no-relativistas que se mueven en un medio material. Usando la aproximación de respuesta lineal, la pérdida de energía quedará expresada en términos de la constante dieléctrica longitudinal.

La respuesta de un medio material a una perturbación externa es en general una función causal, no local, complicada. Esto es, la respuesta inducida (cargas, campos, etc.) en un punto \vec{r} , a tiempo t , es función de los valores que asume la perturbación en todos los puntos \vec{r}' a todos los tiempos t' anteriores. Para poder escribir una relación algebraica sencilla entre la respuesta del medio y la perturbación externa, es conveniente hacer una transformación de Fourier de los campos y densidades de carga. Definimos dicha transformación, para una función escalar o vectorial $A(\vec{r}, t)$ como

$$A(\vec{k}, \omega) = (2\pi)^{-2} \int d^3r \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} A(\vec{r}, t) \quad (2.1)$$

En la aproximación de respuesta lineal, en que se basa el presente formalismo, el desplazamiento $\vec{D}(\vec{r}, t)$ y el campo eléctrico $\vec{E}(\vec{r}', t')$ estarán relacionados a través de una función $\chi_{DE}(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ de la siguiente forma:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \int d^3r' \int_{-\infty}^{\infty} dt' \chi_{DE}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \vec{E}(\vec{r}', t') \quad (2.2)$$

Si el medio posee invariancia de traslación, y sus propiedades no dependen del tiempo, χ_{DE} será función de la diferencia de coordenadas espacio temporales: $\chi_{DE} = \chi_{DE}(\vec{r} - \vec{r}', t - t')$, de modo que si aplicamos la transformación (2.1) a la ecuación (2.2) obtenemos una relación local en las variables \vec{k}, ω

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = \epsilon(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) \quad (2.3)$$

siendo $\epsilon(\vec{k}, \omega) = (2\pi)^2 \chi_{DE}(\vec{k}, \omega)$.

Consideremos ahora un grupo de N cargas $Z_i e$, moviéndose en el medio material con velocidad \vec{v} ($v \ll c$). Si despreciamos pequeños apartamientos de las velocidades individuales respecto de \vec{v} podemos escribir la densidad de carga correspondiente como

$$\rho_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = \sum_i Z_i e \delta(\vec{r} - \vec{r}_i - \vec{v}t) \quad (2.4)$$

siendo \vec{r}_i las posiciones de las respectivas cargas a tiempo $t=0$.

Transformando a las variables \vec{k}, ω obtenemos

$$\rho_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) = (2\pi)^{-1} \sum_i Z_i e e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \delta(\omega - \vec{k} \cdot \vec{v}) \quad (2.5)$$

de modo que las frecuencias y longitudes de ondas que intervienen en el análisis espectral satisfacen $\omega \leq kv$.

El campo eléctrico $\vec{E}(\vec{k}, \omega)$ debido a estas cargas puede separarse en una componente transversal \vec{E}_t (perpendicular a \vec{k}) y una componente longitudinal \vec{E}_l (paralela a \vec{k}) cuya relación es aproximadamente³ $E_t/E_l \sim (v/c)^2$; siendo además la relación entre el campo magnético B y E_l de orden (v/c) . Dado que consideramos velocidades no relativistas, despreciaremos los campos eléctrico transversal y magnético, pues contribuyen a las fuerzas reactivas sobre las cargas $Z_i e$ con términos de orden $(v/c)^2$.

Al limitarnos a campos longitudinales, el problema de determinar \vec{E} y \vec{D} se reduce a resolver la ecuación de Poisson, que se escribe en términos de las variables \vec{k}, ω como

$$i\vec{k} \cdot \vec{D}(\vec{k}, \omega) = 4\pi\rho_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \quad (2.6)$$

El campo eléctrico generado por la distribución de carga (2.5) resulta entonces

$$\vec{E}(\vec{k}, \omega) = -\frac{4\pi i\vec{k}}{k^2} \frac{\rho_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega)}{\epsilon(\vec{k}, \omega)} = -\frac{2i\vec{k}}{k^2} \frac{\delta(\omega - \vec{k} \cdot \vec{v})}{\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})} \sum_i z_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \quad (2.7)$$

En esta expresión están superpuestos los campos instantáneos de las cargas externas y los campos debidos a la polarización inducida en el medio. Los efectos de dispersión espacial y temporal en la respuesta del medio están descriptos por la dependencia de la constante dieléctrica en el vector de onda \vec{k} y en la frecuencia ω .

El campo eléctrico en un punto del espacio \vec{r} , en función del tiempo t , será entonces

$$\begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= (2\pi)^{-2} \int d^3k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \vec{E}(\vec{k}, \omega) \\ &= -(2\pi)^{-2} \sum_i (z_i e) \int d^3k \frac{2i\vec{k}}{k^2} \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_i - \vec{v} t)}}{\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})} \end{aligned} \quad (2.8)$$

En particular, la fuerza que actúa sobre una de las cargas externas j será:

$$\vec{F}_j = z_j e \vec{E}(\vec{r}_j + \vec{v}t, t) = -\frac{z_j e^2}{(2\pi)^2} \sum_i z_i \int d^3k \frac{2i\vec{k}}{k^2} \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_{ji}}}{\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})} \quad (2.9)$$

siendo $\vec{r}_{ji} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$.

El requerimiento físico de que los campos sean magnitudes reales impone la siguiente condición para la constante dieléctrica:

$\epsilon(-\vec{k}, -\omega) = \epsilon^*(\vec{k}, \omega)$; por consiguiente

$$\begin{aligned} \text{Re} \left[\frac{1}{\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})} \right] &\text{ es función par de } \vec{k} \\ \text{Im} \left[\frac{1}{\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})} \right] &\text{ es función impar de } \vec{k} \end{aligned}$$

Usando esta propiedad en (2.9) podemos escribir \vec{F}_j en forma explícitamente real

$$\vec{F}_j = \frac{z_j e}{(2\pi)^2} \sum_i z_i e \int d^3k \frac{2\vec{k}}{k^2} \left\{ \cos \vec{k} \cdot \vec{r}_{ji} \text{Im} \left[\frac{1}{\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})} \right] + \sin \vec{k} \cdot \vec{r}_{ji} \text{Re} \left[\frac{1}{\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})} \right] \right\} \quad (2.10)$$

Podemos ahora comparar el comportamiento de los dos términos de la integral respecto a un cambio de signo en \vec{r}_{ji} , o lo que es equivalente, comparar la fuerza que la carga i ejerce sobre la carga j , con la que esta última ejerce sobre la primera. Vemos que las fuerzas mutuas que se ejercen entre las cargas i y j , debido al término $\text{Re}\{1/\epsilon\}$, son iguales y opuestas. Podemos llamarlas fuerzas internas pues dan lugar a transferencias de energía entre una carga y otra, y se cancelan mutuamente si sumamos las fuerzas que actúan sobre todo el conjunto de cargas[†]. Las fuerzas que se ejercen debido al término $\text{Im}\{1/\epsilon\}$ son por el contrario disipativas; en efecto, la pérdida de energía neta del grupo de cargas resulta dada por

$$\frac{dW}{dt} = - \sum_j \vec{v}_j \cdot \vec{F}_j = \frac{e^2}{2\pi^2} \int d^3k \frac{\vec{k} \cdot \vec{v}}{k^2} \text{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})} \right] \left\{ \sum_i z_i^2 + \sum_{i \neq j} z_i z_j \cos \vec{k} \cdot \vec{r}_{ij} \right\} \quad (2.11)$$

donde se han separado los términos con $i=j$, que dan la pérdida de energía de cargas totalmente independientes, y los términos con $i \neq j$, que representan efectos de interferencia en la pérdida de energía debidos a la reacción, sobre cada una de las cargas externas, de la polarización dinámica del medio inducida por las restantes cargas.

Es interesante calcular en forma alternativa, la energía absorbida por el medio debido al trabajo que el campo eléctrico $\vec{E}(\vec{r}, t)$ realiza sobre las corrientes inducidas en el material $\vec{j}_{\text{ind}}(\vec{r}, t)$; esto es,

$$\begin{aligned} \frac{dW}{dt} &= \int d^3r \vec{j}_{\text{ind}}(\vec{r}, t) \cdot \vec{E}(\vec{r}, t) \\ &= \frac{1}{2\pi} \int d^3k \int d\omega \int d\omega' \sigma^*(\vec{k}, \omega) \vec{E}^*(\vec{k}, \omega) \cdot \vec{E}(\vec{k}, \omega') e^{i(\omega - \omega')t} \end{aligned} \quad (2.12)$$

[†] Estas fuerzas incluyen las fuerzas electrostáticas directas entre las cargas externas. Para tener solamente las fuerzas internas producidas por la polarización del medio basta con substituir $\text{Re}\{1/\epsilon\}$ por $\text{Re}\{1/\epsilon\} - 1$.

donde hemos transformado a las variables \vec{k}, ω , y hemos usado la propiedad $\vec{j}_{\text{ind}}(-\vec{k}, -\omega) = \vec{j}_{\text{ind}}^*(\vec{k}, \omega)$. La conductividad $\sigma(\vec{k}, \omega)$ expresa la relación

$$\vec{j}_{\text{ind}}(\vec{k}, \omega) = \sigma(\vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega) \quad (2.13)$$

Para integrar en ω y ω' conviene escribir

$$\vec{E}(\vec{k}, \omega) = \vec{E}(\vec{k}) \delta(\omega - \vec{k} \cdot \vec{v}) \quad (2.14)$$

siendo

$$\vec{E}(\vec{k}) = - \frac{4\pi i \vec{k}}{k^2} \frac{\rho_{\text{ext}}(\vec{k})}{\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})} \quad (2.15)$$

$$\rho_{\text{ext}}(\vec{k}) = \frac{1}{2\pi} \sum_i z_i e \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) \quad (2.16)$$

Descomponiendo la conductividad en parte real e imaginaria $\sigma(\vec{k}, \omega) = \sigma_1(\vec{k}, \omega) + i\sigma_2(\vec{k}, \omega)$, obtenemos

$$\frac{dW}{dt} = \frac{1}{2\pi} \int d^3k \sigma_1(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v}) |\vec{E}(\vec{k})|^2, \quad (2.17)$$

dado que σ_2 debe ser función impar de $(\vec{k} \cdot \vec{v})$

Usando (2.15) en (2.17) resulta

$$\frac{dW}{dt} = 8\pi \int \frac{d^3k}{k^2} \frac{\sigma_1(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})}{|\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})|^2} |\rho_{\text{ext}}(\vec{k})|^2 \quad (2.18)$$

Puede verse que esta expresión coincide con (2.11) usando la relación entre la constante dieléctrica y la conductividad²⁷

$$\epsilon(\vec{k}, \omega) = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma(\vec{k}, \omega) \quad (2.19)$$

Esta deducción ilustra ciertos aspectos interesantes, contenidos en el factor $\text{Im}[-1/\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})]$. En primer lugar, la parte real de la conductividad aparece dando cuenta de las corrientes inducidas que están en fase con el campo eléctrico $\vec{E}(\vec{k}, \omega)$, que son las que producen absorción de energía neta. En segundo lugar, la presencia del factor de apantallamiento $|\epsilon(\vec{k}, \vec{k} \cdot \vec{v})|^{-2}$ se debe a que los electrones del medio responden al campo eléctrico total $\vec{E}(\vec{k}, \omega) = \vec{E}_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) / \epsilon(\vec{k}, \omega)$, resultante del campo eléctrico externo y del campo eléctrico inducido.

Finalmente, es conveniente indicar que, independientemente del tratamiento clásico con que hemos caracterizado a las cargas externas, una descripción cuántica o clásica del comportamiento del

medio puede ser considerada, a través de una expresión apropiada para la función de pérdida de energía $\text{Im}\{-1/\epsilon(\vec{k}, \omega)\}$. Para describir procesos de transferencia de energía a electrones distantes de la trayectoria de las cargas, en que se perturba a un número grande de electrones, un cálculo clásico de la constante dieléctrica puede ser suficiente. En cambio, para describir excitaciones individuales por colisiones próximas con los electrones del medio resulta conveniente recurrir a un tratamiento cuántico para la constante dieléctrica, lo cual se considerará en el Capítulo 2.

3. Descripción cuántica de la pérdida de energía por excitaciones individuales de electrones libres

Es un hecho conocido que la pérdida de energía de cargas rápidas en la materia se debe en buena parte a colisiones binarias próximas con los electrones del medio. Por esta razón vamos a considerar aquí en forma particular, la pérdida de energía de un grupo de cargas, debido a excitaciones individuales en un gas de electrones libres. Supondremos que la velocidad de las cargas \vec{v} es mucho mayor que la velocidad de los electrones, y calcularemos la probabilidad de excitación con la teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. Como estado normal del sistema, representaremos a los electrones con impulsos $\hbar\vec{q}$ contenidos dentro de una esfera de Fermi de radio $\hbar k_F$.

Consideremos la transición de un electrón de un estado inicial de impulso $\hbar\vec{q}$ ($q < k_F$) a un estado final $\hbar\vec{q}'$ ($q' > k_F$), debido a la perturbación provocada por un potencial externo dependiente del tiempo

$$V(\vec{r}, t) = \sum_i \frac{-Z_i e^2}{|\vec{r} - \vec{r}_i - \vec{v}t|} \quad (3.1)$$

que representa el efecto de las cargas externas $Z_i e$.

Las funciones de onda para los estados inicial y final del electrón serán

$$\begin{aligned} \psi_i^0 &= L^{-3/2} e^{i(\vec{q} \cdot \vec{r} - vt)} \\ \psi_f^0 &= L^{-3/2} e^{i(\vec{q}' \cdot \vec{r} - v't)} \end{aligned} \quad (3.2)$$

con normalización apropiada para una caja de volumen L^3 . Dado que

consideramos electrones libres, $v = \hbar q^2 / 2m$ y $v' = \hbar q'^2 / 2m$, donde m es la masa del electrón.

El elemento de matriz de la perturbación (3.1) es:

$$V_{fi}(t) = \int d^3r \psi_f^{0*} V(\vec{r}, t) \psi_i^0 = - \frac{4\pi e^2}{k^2 L^3} e^{i(\omega - \vec{k} \cdot \vec{v})t} \sum_i Z_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \quad (3.3)$$

siendo $\omega = v' - v$, $\vec{k} = \vec{q}' - \vec{q}$.

La amplitud de probabilidad para el estado final \vec{q}' es ²⁸

$$a_f(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt V_{fi}(t) = \frac{4\pi e^2}{\hbar L^3 k^2} \left[\frac{e^{i\lambda t} - 1}{i\lambda} \right] \sum_i Z_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \quad (3.4)$$

siendo $\lambda = \omega - \vec{k} \cdot \vec{v}$.

Para tiempos suficientemente grandes podemos usar el límite:

$$\left| \frac{e^{i\lambda t} - 1}{i\lambda} \right|_{t \rightarrow \infty}^2 \rightarrow 2\pi t \delta(\lambda)$$

y obtenemos la siguiente expresión para la probabilidad de transición por unidad de tiempo

$$W_{qq'} = \frac{|a_f(t)|^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{4\pi e^2}{L^3 k^2} \right)^2 \left| \sum_i Z_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \right|^2 \delta(\epsilon - \vec{p} \cdot \vec{v}) \quad (3.5)$$

siendo $\epsilon = \hbar\omega =$ energía transferida

$\vec{p} = \hbar\vec{k} =$ impulso transferido

(la forma particular, $\epsilon = \vec{p} \cdot \vec{v}$, para la conservación de energía, es consecuencia de haber supuesto las cargas Z_i infinitamente masivas).

La probabilidad de excitar cualquiera de los electrones del sistema al estado final q' será

$$W_{q'} = 2 \sum_{q < k_F} W_{qq'} \quad (3.6)$$

donde el factor 2 se debe a la multiplicidad de spin. Para simplificar los cálculos supondremos que las velocidades de los electrones son despreciables respecto a \vec{v} , y que el impulso transferido $\hbar\vec{k}$ es grande: $\vec{q}' = \vec{k} \gg \vec{q}$. La suma en (3.6) la calculamos aproximadamente, para $k_F \rightarrow 0$:

$$W_{q'} \approx N_e W_{0q'} \quad (3.7)$$

siendo N_e el número de electrones en el volumen L^3 .

La energía total transferida a excitaciones electrónicas por unidad de tiempo es entonces

$$\frac{dW}{dt} \approx \int d^3q' E_{q'} W_{q'} (L/2\pi)^3 \quad (3.8)$$

con $E_{q'} = \hbar^2 q'^2 / 2m$. En (3.8) hemos transformado la suma sobre estados finales en una integral.

De (3.5), (3.7) y (3.8) obtenemos para la pérdida de energía

$$\frac{dW}{dt} \approx \frac{2e^4 \hbar n}{m} \int \frac{d^3k}{k^2} \left| \sum_i z_i e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i} \right|^2 \delta(E_k - \hbar \vec{k} \cdot \vec{v}) \quad (3.9)$$

siendo $n = N_e / L^3$ la densidad de electrones. La conservación de energía queda aquí expresada como $\hbar^2 k^2 / 2m = \hbar \vec{k} \cdot \vec{v}$, o bien

$$k = (2mv/\hbar) \cos \theta$$

siendo θ el ángulo entre \vec{k} y \vec{v} . El valor máximo $k = (2mv/\hbar)$ corresponde a una colisión "frontal", en que el electrón inicialmente en reposo, es chocado por un proyectil muy masivo, recibiendo un impulso $2m\vec{v}$.

El problema tratado aquí puede también considerarse desde otro punto de vista, tomando las cargas $Z_i e$ como fijas, y los electrones incidiendo sobre las mismas con velocidades próximas a $-\vec{v}$. En este caso los electrones son dispersados elásticamente por el potencial $V(\vec{r}) = \sum_i (-Z_i e^2) / |\vec{r} - \vec{r}_i|$. Si calculamos la sección eficaz de dispersión elástica en aproximación de Born obtenemos nuevamente el factor de estructura $|\sum_i Z_i \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i)|^2$, que da cuenta de las interferencias entre las ondas dispersadas por los diversos centros de potencial presentes. La pérdida de energía anteriormente calculada se relaciona en este sistema de referencia con el impulso transferido a los electrones al ser dispersados.

4. Proyectil diatómico

Vamos a considerar aquí el caso particular de dos cargas Z_1e y Z_2e , moviéndose en un medio material con velocidades iguales. Esto corresponde al caso de incidencia de moléculas diatómicas sobre láminas sólidas y es el caso más simple de estudiar, tanto teórica como experimentalmente.

Calcularemos la pérdida de energía mediante el modelo relativamente simple de un gas de electrones, para velocidades de las cargas mucho mayores que las velocidades de los electrones.

Distinguiremos dos zonas de características diferentes: a) zona de colisiones próximas, con parámetros de impacto relativamente chicos y transferencias de impulsos grandes: donde la energía transferida a cada electrón, en una excitación individual, es grande; b) zona de colisiones distantes, con transferencias de impulso consecuentemente pequeñas: la energía transferida a cada electrón es pequeña, pero el número de electrones perturbados es grande, dando origen a movimientos colectivos del plasma de electrones y a transferencias de energía importantes.

La clasificación de las colisiones de acuerdo al parámetro de impacto b es en principio complementaria de la clasificación de acuerdo a la transferencia de impulso $\hbar\vec{k}$: existiendo una vinculación aproximada a través del principio de incerteza (Fano¹)

$$\hbar k \sim \hbar/b \quad (4.1)$$

La descripción en términos del impulso transferido es frecuentemente preferida por el hecho de que $\hbar\vec{k}$ es un observable a diferencia de b . Pero, más específicamente, para nuestros objetivos, la descripción en términos de k es ventajosa en cuanto permite distinguir unívocamente (al usar el modelo de Lindhard para la constante dieléctrica) entre las pérdidas de energía debidas a excitaciones colectivas y a excitaciones individuales, como veremos en el Capítulo 2.

Por ahora nos limitaremos a una descripción cualitativa de los efectos importantes, que permita obtener resultados analíticos sencillos para la pérdida de energía de cargas correlacionadas rápidas. Distinguiremos entonces las dos regiones antes mencionadas en la siguiente forma: a) $k > k_c$, zona de excitaciones individuales; b) $k < k_c$, zona de excitaciones colectivas. Las características de

estas dos regiones han sido estudiadas en detalle por Pines y Bohm^{27,29}. Si bien el valor de k_c no nos interesará particularmente, podemos considerar que es del orden de²⁷ $k_c \approx \omega_p/v_F$, donde ω_p es la frecuencia de plasma correspondiente a un gas de electrones de densidad n , y v_F es la correspondiente velocidad de Fermi[#]:

$$\omega_p^2 = 4\pi n e^2/m \quad (4.2)$$

$$v_F^3 = (\hbar/m)^3 3\pi^2 n \quad (4.3)$$

El valor de k_c indica que la existencia de oscilaciones colectivas organizadas en un gas de electrones deja de ser efectiva para $k \gtrsim \omega_p/v_F$, es decir, para longitudes de onda suficientemente pequeñas.

a) Pérdida de energía por excitaciones individuales ($k > k_c$)

Denotamos con \vec{r}_0 el vector de posición relativa entre las dos cargas $Z_1 e$ y $Z_2 e$, y con θ_0 el ángulo entre \vec{r}_0 y \vec{v} . La orientación de \vec{k} la describimos por el ángulo polar θ y el ángulo azimutal ϕ , como se indica en Fig.1.

La integral (3.9) nos da en este caso el siguiente resultado:

$$\begin{aligned} \frac{dW_a}{dt} &= \frac{2e^4 n}{mv} \int_{k_c}^{\infty} \frac{dk}{k} \int d\Omega_k \{ Z_1^2 + Z_2^2 + 2Z_1 Z_2 \cos \vec{k} \cdot \vec{r}_0 \} \delta(\cos \theta - \hbar k / 2mv) \\ &= \frac{4\pi e^4 n}{mv} \{ (Z_1^2 + Z_2^2) L_a + 2 Z_1 Z_2 I_a \} \end{aligned} \quad (4.4)$$

donde los términos L_a e I_a están dados por

 # Nota: Los parámetros característicos de un gas de electrones degenerado de densidad n son la velocidad de Fermi v_F , el vector de onda $k_F = mv_F/\hbar$, la frecuencia de plasma ω_p , el radio medio por partícula r_s y la energía de Fermi $E_F = mv_F^2/2$. Otras relaciones importantes son $\omega_p^2 = 4\pi n e^2/m$, $k_F^3 = 3\pi^2 n$ y $(4\pi/3)r_s^3 n = 1$. En el modelo de Lindhard es además conveniente usar el parámetro adimensional $\chi^2 = e^2/\pi\hbar v_F$.

$$L_a = \int_{k_c}^{\infty} \frac{dk}{k} \int \frac{d\Omega_k}{2\pi} \delta(\cos\theta - \hbar k/2mv) = \ln\left(\frac{2mv}{\hbar k_c}\right) \quad (4.5)$$

$$I_a = \int_{k_c}^{k_2} \frac{dk}{k} \cos(k^2 z_0/k_2) J_0\left\{(k\rho_0/k_2)(k_2^2 - k^2)^{1/2}\right\} \quad (4.6)$$

y donde

$$\begin{cases} k_2 = 2mv/\hbar \\ z_0 = r_0 \cos\theta_0 \\ \rho_0 = r_0 \sin\theta_0 \end{cases} \quad (4.7)$$

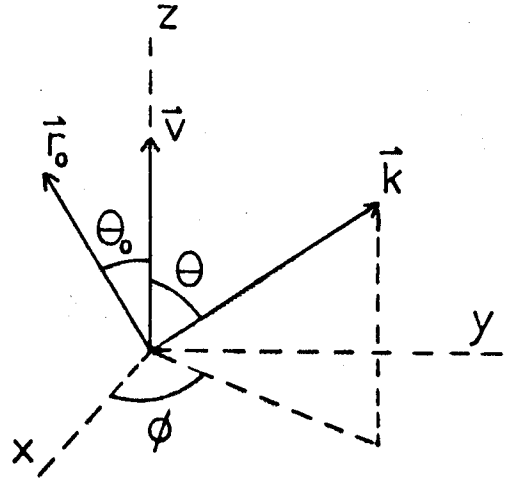


Figura 1

Para una posterior comparación con resultados experimentales, es conveniente calcular la pérdida de energía promedio, correspondiente a una distribución estadísticamente isotrópica para las posibles orientaciones de \vec{r}_0 . Para calcular el promedio angular del término de interferencia I_a en (4.4) usamos el valor de la integral³⁰

$$\int_0^1 dx \cos(ax) J_0\{b(1-x^2)^{1/2}\} = \frac{\sin(a^2+b^2)^{1/2}}{(a^2+b^2)^{1/2}} \quad (4.8)$$

de modo que la pérdida de energía media, debida a excitaciones individuales resulta:

$$\left\langle \frac{dW_a}{dt} \right\rangle = \frac{4\pi n e^4}{mv} \left\{ (z_1^2 + z_2^2) \ln\left(\frac{2mv}{\hbar k_c}\right) + 2z_1 z_2 \int_{r_0 k_c}^{r_0 k_2} dx \frac{\sin x}{x^2} \right\} \quad (4.9)$$

El primer término de esta expresión corresponde a la pérdida de energía de cargas independientes, mientras que el término de interferencia tiene en cuenta los efectos de excitación correlacionada de los electrones por interactuar con ambas cargas $z_1 e$ y $z_2 e$.

b) Pérdida de energía por excitaciones colectivas ($k < k_c$)

Para calcular la pérdida de energía usaremos aquí el resultado (2.11), con una expresión simplificada para la constante dieléctrica $\epsilon(k, \omega)$. Para longitudes de onda largas será suficiente considerar una descripción semiclásica para el plasma electrónico. Esto significa describir los electrones mediante una ecuación de Boltzmann para la función de distribución de velocidades $f(\vec{r}, \vec{u}, t)$, tomando como distribución de equilibrio $f_0(u)$ la correspondiente a la estadística de Fermi-Dirac. De la ecuación de Boltzmann linealizada, en términos de las variables \vec{k}, ω se obtiene³¹

$$\epsilon(k, \omega) = 1 - \frac{4\pi n e^2}{m} \int \frac{d^3 u f_0(u)}{(\omega - \vec{k} \cdot \vec{u})^2} \quad (4.10)$$

donde n es la densidad de electrones y $f_0(u)$ está normalizada de modo tal que $\int d^3 u f_0(u) = 1$.

Dado que nos interesa el límite de longitudes de onda largas y frecuencias altas, podemos usar la siguiente expresión aproximada^{31, 32}, que se obtiene de (4.10) para $k \ll k_F$ y $\omega/k \gg v_F$:

$$\epsilon(k, \omega) \approx 1 - (\omega_p/\omega)^2 \left\{ 1 + \frac{3}{5} v_F^2 k^2 / \omega^2 \right\} + i\delta \quad (4.11)$$

donde ω_p es la frecuencia de plasma (4.2) y δ es una parte imaginaria positiva pequeña ($0 < \delta \ll 1$), que asegura el comportamiento causal de la respuesta del plasma²⁷.

La parte real de la constante dieléctrica se anula para valores de la frecuencia ω dados por

$$\omega_k^2 \approx \omega_p^2 + \frac{3}{5} v_F^2 k^2 \quad (4.12)$$

lo cual constituye una relación de dispersión para ondas de plasma de vector de onda k y frecuencia ω .

La función de pérdida de energía que resulta de (4.11) en el límite $\delta \rightarrow 0$ es:

$$\text{Im} \left\{ \frac{-1}{\epsilon(k, \omega)} \right\} \approx \frac{\pi \omega_p^2}{2\omega_k} \left\{ \delta(\omega - \omega_k) - \delta(\omega + \omega_k) \right\} \quad (4.13)$$

Esta fórmula representa la absorción de energía debido a la excitación de oscilaciones colectivas en el plasma. Estas oscilaciones

pueden ser cuantificadas, dando lugar en ese caso a un cuanto de energía $\hbar\omega_k$ correspondiente a la excitación de un "plasmón".

Para hallar la pérdida de energía reemplazamos (4.13) en la integral

$$\frac{dW}{dt} = \frac{e^2}{2\pi^2} \int d^3k \frac{\vec{k} \cdot \vec{v}}{k^2} \text{Im} \left\{ \frac{-1}{\epsilon(k, \vec{k} \cdot \vec{v})} \right\} \{Z_1^2 + Z_2^2 + 2Z_1 Z_2 \cos \vec{k} \cdot \vec{r}_0\}, \quad (4.14)$$

que resulta de (2.11) en el caso de considerar solamente dos cargas externas $Z_1 e$ y $Z_2 e$, con $\vec{r}_{12} = \vec{r}_0$. La integral en el ángulo azimutal (ver Fig.1) se calcula usando

$$\int_0^{2\pi} d\phi \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}_0) = 2\pi \cos(kz_0 \cos\theta) J_0(k\rho_0 \sin\theta) \quad (4.15)$$

donde $z_0 = r_0 \cos\theta_0$, $\rho_0 = r_0 \sin\theta_0$.

La integración en θ se calcula trivialmente usando las funciones $\delta(\vec{k} \cdot \vec{v} \pm \omega_k)$ de (4.13), lo cual da un límite inferior k_1 para la integración en k (es decir, $k > k_1$), siendo

$$k_1^2 = (\omega_{k_1}/v)^2 = (\omega_p/v)^2 + \frac{3}{5}(v_F/v)^2 k_1^2$$

y como suponemos $v \gg v_F$ resulta $k_1 \approx \omega_p/v$. Esto corresponde a una longitud de onda máxima para las excitaciones colectivas, generadas por las cargas externas, de valor $\lambda_p = 2\pi v/\omega_p$.

De este modo obtenemos para la pérdida de energía por excitaciones colectivas

$$\frac{dW_b}{dt} = \frac{4\pi n e^4}{mv} \{ (Z_1^2 + Z_2^2) L_b + 2Z_1 Z_2 I_b \} \quad (4.16)$$

siendo

$$L_b = \int_{k_1}^{k_c} \frac{dk}{k} = \ln(k_c v/\omega_p) \quad (4.17)$$

$$I_b = \int_{k_1}^{k_c} \frac{dk}{k} \cos(\omega_k z_0/v) J_0\{\rho_0 (k^2 - \omega_k^2/v^2)^{1/2}\}$$

y donde $k_1 = \omega_p/v$.

Es interesante considerar el caso particular en que las cargas $Z_1 e$ y $Z_2 e$ estén espacialmente alineadas en la dirección de movimiento \vec{v}/v , es decir, para $z_0=r_0$ y $\rho_0=0$. En este caso se obtiene (aproximando $\omega_k = \omega_p$):

$$\frac{dW_b}{dt} = \frac{4\pi n e^4}{mv} \ln\left(\frac{k_c v}{\omega_p}\right) \left\{ (Z_1^2 + Z_2^2) + 2Z_1 Z_2 \cos\left(\frac{\omega_p r_0}{v}\right) \right\} \quad (4.18)$$

En particular, si las cargas son iguales, esta expresión se anula toda vez que

$$\frac{\omega_p r_0}{v} = (2j+1) \quad , \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

o bien

$$\frac{r_0}{v} = (T_p/2) (2j+1) \quad (4.19)$$

siendo $T_p = 2\pi/\omega_p$. La condición (4.19) se satisface siempre que el intervalo de tiempo que separa el pasaje de las dos cargas r_0/v , sea igual a un número impar de semiperíodos de la oscilación de plasma. En tal caso la energía transferida por la primer carga al medio se cancela con la energía que la segunda carga recibe del mismo; o dicho de otra forma, se produce interferencia destructiva entre las ondas de plasma generadas por las dos partículas.

Si las dos cargas son diferentes, el factor entre llaves en (4.18) oscila entre $(Z_1 + Z_2)^2$ y $(Z_1 - Z_2)^2$, dependiendo del modo en que interfieran las ondas generadas por cada una de las cargas en el plasma.

Finalmente, podemos calcular el promedio angular de (4.16), usando (4.8), lo cual nos da la pérdida de energía media correspondiente a una distribución estadísticamente isotrópica de las orientaciones de \vec{r}_0

$$\left\langle \frac{dW_b}{dt} \right\rangle = \frac{4\pi n e^4}{mv} \left\{ (Z_1^2 + Z_2^2) \ln\left(\frac{k_c v}{\omega_p}\right) + 2Z_1 Z_2 \int_{r_0 k_1}^{r_0 k_c} dx \frac{\sin x}{x^2} \right\} \quad (4.20)$$

5. Resultados para la pérdida de energía

Sumando (4.9) y (4.20) obtenemos la pérdida de energía media, debida a excitaciones individuales y colectivas:

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = \frac{4\pi n e^4}{mv} \{ (Z_1^2 + Z_2^2) L + 2Z_1 Z_2 I \} \quad (5.1)$$

siendo

$$L = \ln \left(\frac{2mv^2}{\hbar\omega_p} \right) \quad (5.2)$$

$$I = \int_{r_0 k_1}^{r_0 k_2} dx \frac{\sin x}{x^2} \quad (5.3)$$

donde $k_1 = \omega_p/v$, $k_2 = 2mv/\hbar$.

Es interesante observar que al sumar las dos contribuciones, las dependencias en k_c se han cancelado; este es un hecho conveniente, dado que las aproximaciones usadas en las secciones 4.a) y 4.b) no son apropiadas para la zona intermedia en que $k \sim k_c$.

El primer término de (5.1) corresponde a la fórmula asintótica de Bethe para el caso de un gas de electrones, y representa la pérdida de energía de dos cargas independientes, de valores $Z_1 e$ y $Z_2 e$, con velocidad v grande.

El término de interferencia en (5.1) puede integrarse por partes, obteniendo

$$I = \int_{r_0 k_1}^{r_0 k_2} dx \frac{\sin x}{x^2} = G(r_0 \omega_p/v) - G(2mvr_0/\hbar) \quad (5.4)$$

en términos de la función

$$G(x) = \frac{\sin x}{x} - Ci(x), \quad (5.5)$$

la cual está representada en la Fig.2. La función coseno integral está definida como

$$Ci(x) = - \int_x^\infty dx \frac{\cos x}{x}$$

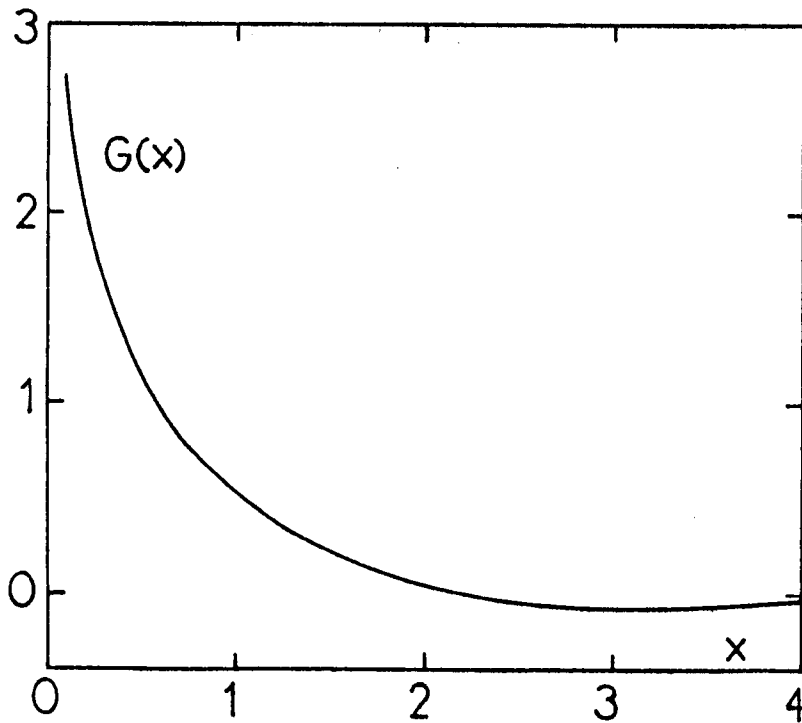


Fig.2 - función
 $G(x) = \frac{\sin x}{x} - Ci(x)$

Para valores límites de x , la función $G(x)$ tiene el siguiente comportamiento

$$\begin{aligned} x \rightarrow \infty & : G(x) \rightarrow 0 \\ x \rightarrow 0 & : G(x) \rightarrow (1-\gamma) + \ln(1/x) \end{aligned} \quad (5.6)$$

siendo $\gamma=0.577$, la constante de Euler.

Podemos entonces describir el comportamiento del término de interferencia I , dado por (5.4), comparando r_0 con las distancias características $r_{\max} = v/\omega_p$ y $r_{\min} = \hbar/2mv$, que pueden interpretarse respectivamente como la distancia adiabática correspondiente a excitaciones de plasma, y el valor cuántico del parámetro de impacto mínimo (para una colisión entre una partícula clásica y un electrón, con velocidad relativa v).

Resultan entonces los siguientes casos límites:

i) Límite de cargas separadas

Corresponde al caso en que la separación r_0 es mucho mayor que la distancia adiabática:

$$r_0 \gg r_{\max} = v/\omega_p \quad (5.7)$$

en cuyo caso es además $r_0 \gg \hbar/2mv$.

De acuerdo con (5.6), $G(x) \rightarrow 0$ en (5.4) y el término de interferencia se anula. De modo que la pérdida de energía es la que corresponde a dos cargas independientes

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle \cong \frac{4\pi n e^4}{mv} (Z_1^2 + Z_2^2) \ln(2mv^2/\hbar\omega_p) \quad (5.8)$$

ii) Límite de cargas unidas

Esto corresponde a

$$r_0 \ll r_{\min} = \hbar/2mv \quad (5.9)$$

de modo que la separación entre las partículas es inobservable aún para las colisiones más próximas; la condición $r_0 \ll v/\omega_p = r_{\max}$ está por supuesto asegurada en este caso. Usando (5.6) en (5.4) obtenemos

$$I \cong \ln(2mv^2/\hbar\omega_p) \quad (5.10)$$

resultando entonces una pérdida de energía

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle \cong \frac{4\pi n e^4}{mv} (Z_1 + Z_2)^2 \ln(2mv^2/\hbar\omega_p) \quad (5.11)$$

que es la que corresponde a una carga simple de valor $(Z_1 + Z_2)e$.

iii) Límite mixto

Llamaremos así al siguiente caso límite

$$\frac{\hbar}{2mv} \ll r_0 \ll \frac{v}{\omega_p} \quad (5.12)$$

Con estas condiciones obtenemos

$$I = (1 - \gamma) + \ln\left(\frac{v}{r_0\omega_p}\right) \quad (5.13)$$

Este límite corresponde a un caso intermedio muy importante, en que las cargas se comportan como separadas respecto a las excitaciones individuales más próximas (pues $r_0 \gg \hbar/2mv$), pero actúan como cargas unidas en cuanto a las excitaciones colectivas de mayor longitud de onda (pues $r_0 \ll v/\omega_p$).

Para el caso concreto que nos interesa, en que las cargas $Z_1 e$ y $Z_2 e$ provienen de iones moleculares incidentes sobre un sólido, podemos considerar $r_0 \sim 1 \text{ \AA}$ (por ejemplo, la separación internuclear

de H_2^+ en el estado fundamental es $r_0=1.06 \text{ \AA}$); mientras que un valor típico para la energía de las excitaciones de plasma es $\hbar\omega_p \sim 15 \text{ eV}$ (por ejemplo²⁷ Al, Si, Ge, Sb, Bi).

Para velocidades grandes# ($v \gg 1$ unidad atómica) la condición $2mvr_0/\hbar \gg 1$ se cumple entonces siempre, de modo que el límite unido no es aquí realizable prácticamente. Esto nos permite además limitarnos a considerar la siguiente expresión para I, correspondiente a $2mvr_0/\hbar \gg 1$ y $\omega_p r_0/v$ arbitrario:

$$I = G(r_0\omega_p/v) = \sin(r_0\omega_p/v)/(r_0\omega_p/v) - Ci(r_0\omega_p/v) \quad (5.14)$$

Para los valores antes mencionados ($r_0 \sim 2 \text{ u.a.}, \omega_p \sim 0.5 \text{ u.a.}$), se satisface además la condición $\omega_p r_0/v \ll 1$, puesto que v es grande; en este caso podemos usar la expresión (5.13) correspondiente al límite mixto. De (5.2) y (5.13) obtenemos valores de I/L del orden de 0.4 para $v > 3 \text{ u.a.}$ ($= 6.6 \times 10^8 \text{ cm/seg}$), lo cual da un efecto apreciable sobre la pérdida de energía, siempre que Z_1 y Z_2 no difieran mucho.

Debido a la repulsión coulombiana entre las cargas Z_1 y Z_2 , la separación r_0 aumenta con el tiempo, por lo cual en la práctica puede no ser apropiado limitarse al caso $\omega_p r_0/v \ll 1$. La expresión (5.14) será pues en general la más apropiada. La misma describe los casos intermedios entre el límite mixto y el límite separado, incluyendo obviamente ambos casos límite.

Para entender algunos aspectos más específicos de la pérdida de energía de cargas correlacionadas en un gas de electrones, consideraremos en el Capítulo 2 un estudio más sistemático, basado en el modelo de Lindhard para la respuesta dieléctrica de un gas de electrones degenerado; lo que permite tratar en forma compacta y más precisa la contribución de excitaciones individuales y correctivas. Esto nos permitirá asimismo evaluar cuantitativamente la aplicabilidad del modelo que hemos desarrollado previamente.

Nota: Las unidades atómicas (u.a.) de velocidad y de distancia son, respectivamente, la velocidad y el radio de Bohr. Un resumen de unidades atómicas se incluye al final del presente trabajo (ver contratapa).

CAPITULO 2

PERDIDA DE ENERGIA CON EL MODELO DE LINDHARD PARA EL GAS DE ELECTRONES

Resumen: Se considera en este Capítulo una descripción más sistemática de la pérdida de energía en un gas de electrones, mediante el modelo de Lindhard para la respuesta dieléctrica de un plasma cuántico.

En la sección 6 se resumen los resultados de la teoría cuántica para la respuesta dieléctrica de un gas de electrones degenerado; aplicándose los mismos en la sección 7 al cálculo de la pérdida de energía de cargas externas moviéndose correlacionadamente.

En la sección 8 se estudia el caso límite de velocidades pequeñas ($v \ll v_F$); se encuentra que los efectos de interferencia sobre la pérdida de energía no alteran la dependencia de la misma con la velocidad, y que tales efectos dependen en este caso de la relación entre la separación de las cargas y la longitud de onda de los electrones que están sobre la superficie de Fermi.

El caso de velocidades grandes ($v \gg v_F$) es considerado nuevamente en la sección 9. En la sección 10 se presentan resultados numéricos para la pérdida de energía, obtenidos con el modelo de Lindhard, los que permiten discutir la validez de las aproximaciones analíticas obtenidas en el Capítulo 1.

Se discute finalmente, en la sección 11, aproximaciones propuestas por otros autores, sobre la idea de relacionar la pérdida de energía de un grupo de cargas con reglas de partición para el frenamiento

6. Respuesta dieléctrica de un gas de electrones

Los resultados de la teoría semiclassical para la respuesta dieléctrica de un gas de electrones (usados en la sección 4.b) son satisfactorios cuando las longitudes de onda consideradas son grandes respecto a las longitudes de onda asociadas a los electrones, es decir, para $k^{-1} \gg \lambda_F = \hbar/mv_F$, siendo m la masa del electrón y v_F la velocidad de Fermi. De lo contrario, un tratamiento cuántico

resulta necesario; esto es precisamente lo que ocurre en nuestro caso cuando queremos describir las excitaciones individuales con valores grandes de k , que se extienden hasta $k \sim 2m\nu/\hbar$.

En esta sección resumiremos algunas propiedades bien conocidas de un gas de electrones degenerado^{9,10,27,32-34}, que serán de interés en relación al cálculo de la pérdida de energía.

La descripción cuántica de la respuesta dieléctrica de un gas de electrones mediante los métodos de campo autoconsistente y de RPA (random phase approximation) conduce a resultados equivalentes^{32,33}. El planteo del problema dentro de la aproximación de campo autoconsistente consiste en hallar cómo se perturba cuánticamente el sistema frente a campos externos, suponiendo que los electrones responden a la acción del campo total (campo externo más campo inducido, sin correcciones de campo local). Mediante teoría de perturbaciones dependientes del tiempo se obtiene la respuesta dieléctrica del sistema, a través de la llamada constante dieléctrica de Lindhard.

Siguiendo la nomenclatura convencional usaremos, en lugar de las variables k, ω , las variables adimensionales

$$u = \omega / k v_F, \quad z = k / 2 k_F \quad (6.1)$$

La constante dieléctrica de Lindhard puede entonces escribirse^{10,27}

$$\epsilon(k, \omega) = \epsilon_1(k, \omega) + i\epsilon_2(k, \omega) = 1 + \frac{\chi^2}{z^2} \{ f_1(u, z) + if_2(u, z) \} \quad (6.2)$$

siendo $\chi^2 = e^2 / \pi \hbar v_F$, un parámetro adimensional que depende de la densidad del gas. Las funciones adimensionales f_1 y f_2 están dadas por:

$$f_1(u, z) = \frac{1}{2} + \frac{1}{8z} \{ g(z-u) + g(z+u) \} \quad (6.3)$$

donde

$$g(x) = (1-x^2) \ln \left| \frac{x+1}{x-1} \right| \quad (6.4)$$

$$f_2(u, z) = \begin{cases} (\pi/2)u & \text{si } z+u < 1 \\ \frac{\pi}{8z} \{ 1 - (z-u)^2 \} & \text{si } |z-u| < 1 < z+u \\ 0 & \text{si } |z-u| > 1 \end{cases} \quad (6.5)$$

Los contornos $u=z-1$, $u=z+1$ y $u+z=1$ delimitan las zonas indicadas en la Fig.3.

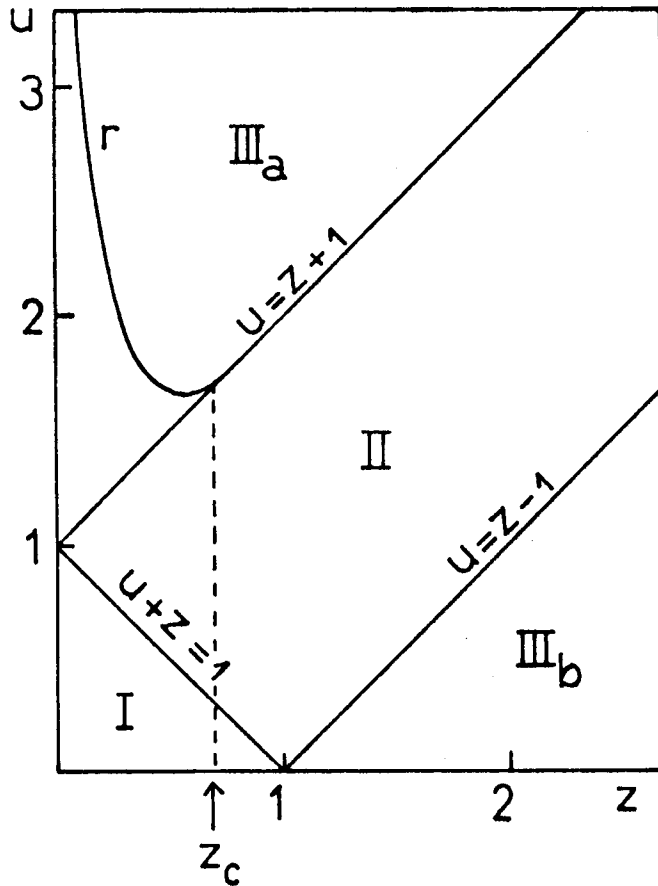


Figura 3

dispersión entre ω y k (o bien entre u y z) correspondiente a la existencia de modos longitudinales propios no amortiguados. Para $k \ll k_F$ la curva de resonancia r conduce a la relación de dispersión (4.12).

Para $z > z_c$ ($k > k_0$) la curva r penetra en la región en que $\epsilon_2(k, \omega) \neq 0$ y en consecuencia las excitaciones colectivas pueden decaer en excitaciones individuales. Esto puede verse en forma relativamente sencilla²⁷, considerando la excitación de un electrón de la esfera de Fermi, desde un estado inicial de vector de onda \vec{q} a un estado final \vec{q}' , con transferencia de energía $\hbar\omega$ y transferencia de impulso $\hbar\vec{k}$. Las leyes de conservación nos dan

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2m} \{ (\vec{k} + \vec{q})^2 - q^2 \} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{\hbar^2}{m} \vec{q} \cdot \vec{k} \quad (6.6)$$

Como $\vec{q} \cdot \vec{k}$ varía entre $-v_F k$ y $+v_F k$ (cuando q varía en todo el interior de la esfera de Fermi), (6.6) nos da

En la región I es

$$f_2 = (\pi/2)u,$$

en la región II es

$$f_2 = \frac{\pi}{8z} \{ 1 - (z-u)^2 \}$$

y en $III_{a,b}$ es

$$f_2 = 0$$

La curva indicada con r es donde se anula la constante dieléctrica; dado que f_2 es cero en toda la región III_a , la ecuación de r viene dada por $\epsilon_1(k, \omega) = 0$ y define una relación de

$$k^2 - 2kk_F < \frac{2m\omega}{\hbar} < k^2 + 2kk_F \quad (6.7)$$

o bien

$$z - 1 < u < z + 1 \quad (6.8)$$

Estas igualdades definen la región de excitaciones individuales que comprende las regiones I y II en Fig.3. Las desigualdades (6.7) y (6.8) son aplicables tanto a las excitaciones individuales producidas por una perturbación externa, como al decaimiento de un plasmón de energía $\hbar\omega = \hbar\omega_k$ e impulso $\hbar\vec{k}$ en un par electrón-agujero.

Veamos ahora de qué forma los modelos aproximados usados en las secciones 3 y 4, para describir la pérdida de energía por excitaciones individuales y colectivas, pueden obtenerse a partir de la constante dieléctrica de Lindhard. En primer lugar, en la región III_a, la única contribución a la función de pérdida de energía $\text{Im}\{-1/\epsilon\}$ proviene de la curva de resonancia r, donde se anula la constante dieléctrica; podemos usar en esta región el siguiente desarrollo de la función $f_1(u, z)$, correspondiente a $z \ll 1 \ll u$:

$$f_1(u, z) \approx -\frac{1}{3u^2} - \frac{1}{5u^4} + \dots \quad (6.9)$$

lo cual nos da

$$\epsilon(k, \omega) \approx 1 - \frac{\omega_P^2}{\omega^2} \left\{ 1 + \frac{3}{5} \frac{v_F^2 k^2}{\omega^2} + \dots \right\} \quad (6.10)$$

que coincide con (4.11). Obtenemos así nuevamente la expresión (4.13) para $\text{Im}\{-1/\epsilon\}$ en la región III_a, lo cual nos permitiera calcular la pérdida de energía por excitaciones colectivas para valores de k menores que k_c .

También es posible reobtener la descripción simplificada de las excitaciones individuales con $k > k_c$, mediante una aproximación apropiada para $\epsilon(u, z)$. Para ello es necesario considerar valores de u y z grandes, de modo tal que $\epsilon_1(u, z) = 1$, y

$$\text{Im}\{-1/\epsilon\} \approx \epsilon_2(u, z) = \frac{\chi^2}{z^2} f_2(u, z) \quad (6.11)$$

aproximando además f_2 para valores $u, z \gg 1$:

$$f_2(u, z) = \frac{\pi}{8z} \{1 - (z-u)^2\} \stackrel{\approx}{=} \frac{\pi}{6z} \delta(u-z) \quad (6.12)$$

de modo que la región II de la Fig.3 se ha aproximado por la recta $u=z$ (o bien $\omega = \hbar k^2/2m$) manteniendo igual área para la integral de f_2 respecto de u ó de z . Cuando reemplazamos $z = k/2k_F$ y $\omega = kv \cos \theta$, la función $\delta(u-z)$ se transforma en $2k_F \delta(k - \frac{2mv}{\hbar} \cos \theta)$. Esto permite describir las excitaciones individuales como se hizo en las secciones 3 y 4, e indica que la integral (3.9) puede obtenerse como una aproximación particular de la integral (2.11) del formalismo dieléctrico. La aproximación consiste pues en despreciar el efecto de apantallamiento ($\epsilon_1 \stackrel{\approx}{=} 1$) y el ancho de la región II (que corresponde a considerar $v_F \rightarrow 0$). El procedimiento es lícito siempre que se considere valores grandes de k ($k \gg k_F$) y de ω ($\omega \stackrel{\approx}{=} \hbar k^2/2m \gg E_F/\hbar$).

7. Cálculo de la pérdida de energía

Consideremos ahora nuevamente el caso de dos cargas $Z_1 e$ y $Z_2 e$ moviéndose a velocidad \vec{v} y con separación internuclear \vec{r}_0 . De acuerdo con el formalismo dieléctrico descrito en la sección 2, la pérdida de energía puede escribirse

$$\frac{dW}{dt} = \frac{e^2}{2\pi^2} \int d^3k \frac{\vec{k} \cdot \vec{v}}{k^2} \text{Im} \left\{ \frac{-1}{\epsilon(k, \vec{k} \cdot \vec{v})} \right\} \{ (Z_1^2 + Z_2^2) + 2Z_1 Z_2 \cos \vec{k} \cdot \vec{r}_0 \} \quad (7.1)$$

Si la distribución de las posibles orientaciones de \vec{r}_0 es estadísticamente isotrópica, podemos calcular la pérdida de energía media haciendo un promedio angular del término de interferencia; obtenemos así

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = \frac{e^2}{2\pi^2} \int d^3k \frac{\vec{k} \cdot \vec{v}}{k^2} \text{Im} \left\{ \frac{-1}{\epsilon(k, \vec{k} \cdot \vec{v})} \right\} \{ (Z_1 + Z_2)^2 + 2Z_1 Z_2 \frac{\sin kr_0}{kr_0} \} \quad (7.2)$$

Tomando la dirección de \vec{v} como eje de coordenadas polares (Fig.1) resulta, $d^3k = k dk \frac{d\omega}{v} d\phi$, siendo $\omega = kv \cos \theta$; la integración en $d\phi$ es inmediata y se obtiene

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = \frac{2e^2}{\pi v} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} \omega d\omega \text{Im} \left\{ \frac{-1}{\epsilon(k, \omega)} \right\} \{ (Z_1^2 + Z_2^2) + 2Z_1 Z_2 \frac{\sin kr_0}{kr_0} \} \quad (7.3)$$

Introduciendo ahora la expresión de Lindhard para la constante dieléctrica, y expresando las integrales en términos de u y z , obtenemos

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = \frac{4\pi n e^4}{m v} \{ (z_1^2 + z_2^2) L + 2 z_1 z_2 I \} \quad (7.4)$$

siendo

$$L = \frac{6}{\pi \chi^2} \int_0^\infty z dz \int_0^w u du \operatorname{Im} \left\{ \frac{-1}{\epsilon(u, z)} \right\} \quad (7.5)$$

$$I = \frac{6}{\pi \chi^2} \int_0^\infty z dz \int_0^w u du \operatorname{Im} \left\{ \frac{-1}{\epsilon(u, z)} \right\} \frac{\sin(2k_F r_0 z)}{2k_F r_0 z} \quad (7.6)$$

donde $\chi^2 = e^2 / \pi \hbar v_F$, y el límite superior de integración en u es la velocidad reducida $w = v / v_F$.

Dado que (7.5) y (7.6) deben integrarse sobre los puntos en que $\operatorname{Im}\{-1/\epsilon\} \neq 0$, podemos separar las contribuciones a L e I provenientes de excitaciones individuales y colectivas de la siguiente forma

$$L = L_s + L_r \quad (7.7)$$

$$I = I_s + I_r$$

donde L_s e I_s son las contribuciones debidas a excitaciones individuales (creación de pares electrón-agujero), y resultan de integrar (7.5) y (7.6) en la región del plano u - z en que $\epsilon_2(u, z) \neq 0$; esto es, la franja sombreada de la Fig.4(a) (regiones I y II de Fig.3), definida por $|u-z| < 1$. La zona de integración está delimitada superiormente por la línea $u=w=v/v_F$.

L_r e I_r son, por su parte, las contribuciones debidas a excitaciones colectivas (plasmones), que resultan de integrar a lo largo de la curva r , definida por $\epsilon_1(u, z) = 0$ y $z < z_c$, donde las integrales de superficie pueden convertirse en integrales de línea sobre la curva de resonancia r . Debido a que w determina el límite de integración en u , existe una velocidad mínima para excitación de modos colectivos, que corresponde al punto en que la curva r se sumerge en la zona de excitaciones individuales. Designando por u_c y z_c las coordenadas de dicho punto (con $u_c = 1 + z_c$, ver Fig.4(a)),

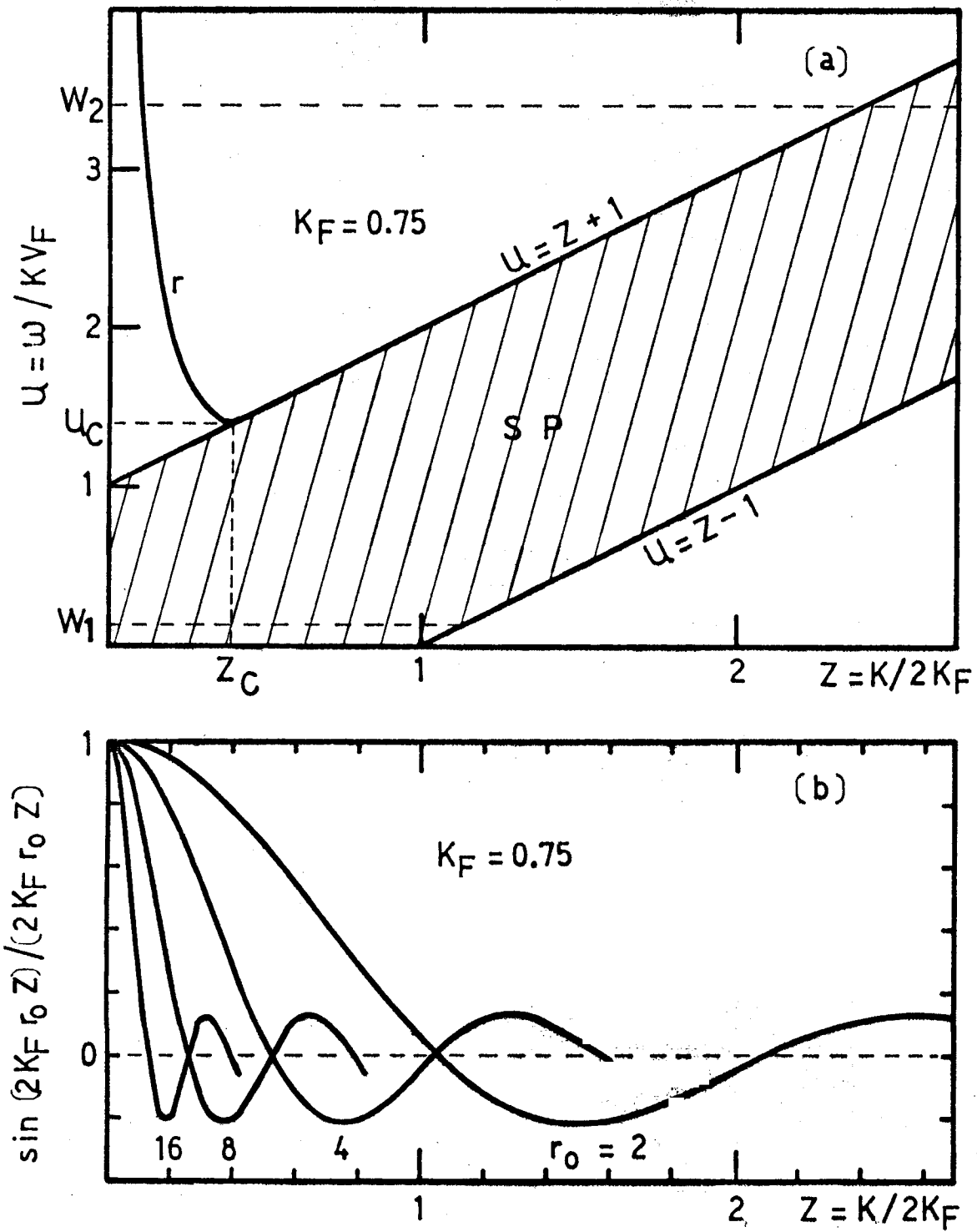


Fig. 4

su valor resulta de resolver $\epsilon_1(u_c, u_c^{-1}) = 0$, lo cual da³⁵

$$\frac{1}{(u_c^{-1})} \left[u_c \ln\left(\frac{u_c}{u_c^{-1}}\right) - 1 \right] = \frac{2}{\chi^2} \quad (7.8)$$

y la velocidad correspondiente es $v_{\min} = u_c v_F$. Para densidades en el rango correspondiente a metales reales, las soluciones de (7.8) dan valores de u_c entre 1.1 y 1.5.³⁶

Veamos ahora cómo las integrales de superficie pueden reducirse a integrales de línea. Dado que la curva de resonancia está definida por $\epsilon_1(u, z) = 0$ podemos desarrollar

$$\epsilon(u, z) \approx (u - u(z)) \left[\frac{\partial \epsilon_1(u, z)}{\partial u} \right]_{u=u(z)} + i\epsilon_2(u(z), z) \quad (7.9)$$

siendo $u = u(z)$ la ecuación de la curva r .

Para $\epsilon_2 \rightarrow 0$, de (7.9) resulta

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(u, z)} \right] = \frac{\pi \delta(u - u(z))}{\partial \epsilon_1(u, z) / \partial u} \quad (7.10)$$

De (7.5) y (7.10) obtenemos para L_r :

$$L_r = \frac{6}{\chi^2} \int_{z(w)}^{z_c} dz \frac{z u(z)}{\left[\partial \epsilon_1(u, z) / \partial u \right]_{u=u(z)}} \quad (7.11)$$

y una expresión similar resulta para I_r , salvo el factor de interferencia $g(z) = \sin(2k_F r_0 z) / (2k_F r_0 z)$:

$$I_r = \frac{6}{\chi^2} \int_{z(w)}^{z_c} dz \frac{\sin(2k_F r_0 z)}{(2k_F r_0 z)} \frac{z u(z)}{\left[\partial \epsilon_1(u, z) / \partial u \right]_{u=u(z)}} \quad (7.12)$$

Los valores de $L_{r,s}$ y de $I_{r,s}$ resultan entonces de calcular numéricamente las correspondientes integrales, lo cual se realizó para diversos valores de la velocidad v y de la separación r_0 . Antes de considerar estos cálculos vamos a estudiar dos casos límites más simples: el caso de $v \ll v_F$ y el de $v \gg v_F$, respectivamente.

8. Límite de bajas velocidades

Consideremos ahora una velocidad v pequeña respecto a la velocidad de Fermi v_F ; esto es, una velocidad reducida $w \ll 1$, como la indicada con w_1 en Fig.4(a). Es claro que en este caso no hay excitación de modos colectivos y solo interesan las excitaciones individuales que ocupan una delgada franja horizontal con $0 \leq u \leq w$ y $0 \leq z \leq 1$.

Dicho de otra forma, para $v \ll v_F$ solamente son excitados los electrones situados cerca de la superficie de Fermi, en una cáscara esférica de ancho $\hbar\omega \sim 2\hbar k_F v \ll E_F$. La velocidad relativa entre las cargas externas $Z_1 e, Z_2 e$ y los electrones que pueden ser excitados es entonces $\sim v_F$. Esto sugiere que las interferencias van a depender del parámetro $k_F r_0$.

De (6.2) resulta:

$$\text{Im}\{-1/\varepsilon\} = \frac{z^2 \chi^2 f_2(u, z)}{\{\chi^2 f_2(u, z)\}^2 + \{z^2 + \chi^2 f_1(u, z)\}^2} ; \quad (8.1)$$

de acuerdo con (6.5) podemos usar la siguiente expresión para f_2 :

$$f_2(u, z) = (\pi/2) u \quad (8.2)$$

la cual es aplicable prácticamente en toda la región de integración, exceptuando un pequeño triángulo sobre el punto $z=1, u=0$. Podemos entonces aproximar:

$$\text{Im}\{-1/\varepsilon\} \approx \frac{\pi}{2} \chi^2 \frac{u z^2}{\{z^2 + \chi^2 f_1(0, z)\}^2} \quad (8.3)$$

donde hemos despreciado un término proporcional a u^2 en el denominador, y hemos reemplazado $f_1(u, z) \approx f_1(0, z)$, dado que consideramos $u \leq w \ll 1$. Usando (8.3) en (7.5) obtenemos

$$L = 3 \int_0^1 z dz \int_0^w u du \frac{z^2 u}{\{z^2 + \chi^2 f_1(0, z)\}^2} \quad (8.4)$$

e integrando en u resulta

$$L = w^3 \int_0^1 \frac{z^3 dz}{\{z^2 + \chi^2 f_1(0, z)\}^2} \quad (8.5)$$

Procediendo análogamente se obtiene, para el término de interferencia,

$$I = w^3 \int_0^1 \frac{z^3 dz}{\{z^2 + \chi^2 f_1(0, z)\}^2} \frac{\sin(2k_F r_0 z)}{2k_F r_0 z} \quad (8.6)$$

En ambas expresiones (8.5) y (8.6) la única dependencia con la velocidad de las cargas está en el factor $w^3 = (v/v_F)^3$. Conviene pues definir dos coeficientes C_L y C_I , de la siguiente forma:

$$L = w^3 C_L \quad ; \quad I = w^3 C_I \quad (8.7)$$

de modo que C_L depende sólo de la densidad del gas de electrones a través de χ^2 , mientras que C_I depende de χ^2 y de $k_F r_0$.

En términos de estos coeficientes, el poder de frenamiento a bajas velocidades resulta (ver ecuación (7.4)):

$$\left\langle \frac{dE}{dx} \right\rangle = \frac{1}{v} \left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = \frac{4\pi n e^4}{m v_F^2} w \left[(Z_1^2 + Z_2^2) C_L + 2 Z_1 Z_2 C_I \right] \quad (8.8)$$

El primer término de esta expresión, proporcional a C_L , corresponde al resultado de Lindhard para la pérdida de energía de dos cargas independientes $Z_1 e$ y $Z_2 e$, con velocidad $v \ll v_F$, y está caracterizado por la dependencia lineal con la velocidad. El resultado (8.8) indica que tal dependencia subsiste para la pérdida de energía de cargas que se mueven a distancias próximas; dado que el coeficiente C_I no depende de w . Además, la dependencia en $k_F r_0$ de C_I indica que la longitud con la cual r_0 debe compararse, en el caso $v \ll v_F$, es la longitud de onda asociada a los electrones que están sobre la superficie de Fermi, es decir, $\lambda_F = k_F^{-1} = \hbar / m v_F$.

En la Fig.5 se ha representado el cociente C_I/C_L , en función de $k_F r_0$, de acuerdo con resultados de integración numérica de (8.5) y (8.6), realizados para $v_F = 0.6$ y 0.9 unidades atómicas. Estos resultados indican que los efectos de interferencia en la pérdida de energía son importantes para $k_F r_0 \gtrsim 2$.

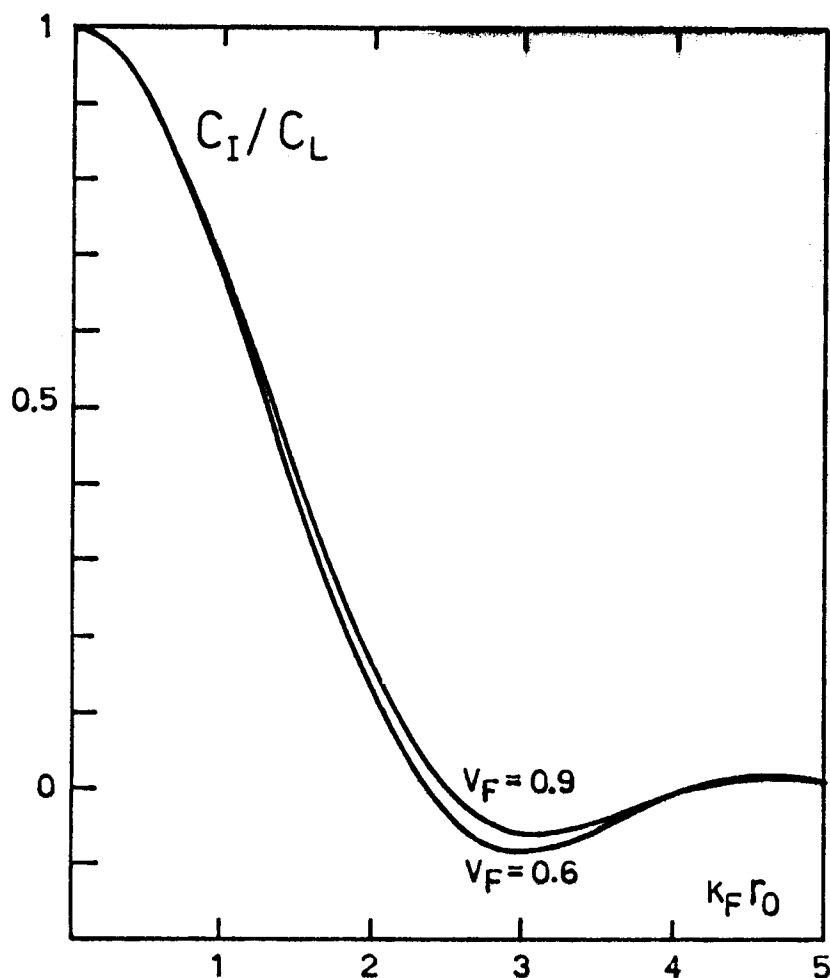


Fig.5

9. Límite de altas velocidades

Si bien este caso ya ha sido considerado en el Capítulo 1, es interesante ver de qué forma puede tratarse con el presente formalismo. Para ésto necesitamos la siguiente expresión aproximada para la constante dieléctrica¹⁰ :

$$\epsilon(k, \omega) \approx 1 + \frac{\omega_P^2}{\left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)^2 - (\omega + i\delta)^2} \quad (9.1)$$

siendo δ una cantidad positiva infinitesimalmente pequeña. Esta aproximación corresponde al caso en que $\omega/k \gg v_F$, pero k es arbitrario, y describe en una forma muy simple las excitaciones individuales y colectivas. Es apropiada para un cálculo sencillo de la pérdida de energía de cargas rápidas ($v \gg v_F$).

De la expresión (9.1) obtenemos (para $\delta \rightarrow 0$):

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(k, \omega)} \right] \approx \frac{\pi \omega_p^2}{2 \omega_k} \{ \delta(\omega - \omega_k) - \delta(\omega + \omega_k) \} \quad (9.2)$$

siendo

$$\omega_k^2 = \omega_p^2 + (\hbar k^2/2m)^2 \quad (9.3)$$

Para valores de k pequeños (9.2) y (9.3) describen la excitación de modos colectivos, con $\omega_k \approx \omega_p$, y para valores de k grandes, describen excitaciones individuales con $\omega_k \approx \hbar k^2/2m$.

Reemplazando (9.2) en (7.3) obtenemos

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = \frac{4\pi n e^4}{mv} \int_{k_1}^{k_2} \frac{dk}{k} \{ (Z_1^2 + Z_2^2) + 2Z_1 Z_2 \frac{\sin kr_0}{kr_0} \} ; \quad (9.4)$$

donde los límites k_1 y k_2 se determinan de modo tal que la función $\delta(\omega - \omega_k)$ contribuya a la integral en ω de (7.3); es decir, de modo que $\omega_k < kv$, lo cual nos da

$$2 (\hbar/2m)^2 k_{1,2}^2 = v^2 \pm \left[v^4 - (\hbar \omega_p/m)^2 \right]^{1/2}, \quad (9.5)$$

y, para $(mv^2/\hbar \omega_p)^4 \gg 1$, resulta

$$k_1 \approx \omega_p/v \quad ; \quad k_2 \approx 2mv/\hbar \quad (9.6)$$

Con estos límites, (9.4) nos da nuevamente los resultados ya obtenidos en la sección 5.

10. Integraciones numéricas

Salvo en los casos límites considerados en las secciones 8 y 9, el cálculo de la pérdida de energía de cargas correlacionadas en un gas de electrones requiere una evaluación numérica de las integrales (7.5), (7.6), (7.11) y (7.12). Esto ha sido realizado para diversos valores de la velocidad reducida $w=v/v_F$, y de la separación internuclear r_0 . Los cálculos se hicieron para $v_F = 0.6, 0.75$ y 0.9 unidades atómicas, lo cual abarca un rango importante en relación con valores de v_F correspondientes a metales reales³⁷.

Los términos L_S e I_S han sido calculados usando (7.5) y (7.6) e integrando sobre la región de excitaciones individuales,

en donde $\epsilon_2(u, z) \neq 0$. Para cada valor de u se integra numéricamente en z , entre los límites $z_1 \leq z \leq u+1$, siendo z_1 el máximo entre $u-1$ y 0 ; el valor de u se integra a su vez entre 0 y $w = v/v_F$ (el máximo valor que asume z es $w+1$).

Los términos L_r e I_r se integran según (7.11) y (7.12) a partir del punto z_c, u_c ($u_c = 1+z_c$). Partiendo de z_c se comienza a recorrer la curva de resonancia r , con pequeños incrementos negativos de z ; para cada valor de z se halla el correspondiente valor de u , resolviendo $\epsilon(u, z) = 0$ mediante el método de Newton.

Como la dependencia de w aparece sólo en el límite de integración, pero no en el integrando, al ir aumentando w no es necesario integrar nuevamente sobre toda la región que contribuye, sino solamente sobre las regiones de integración que se van agregando. Esto hace que el procedimiento de cálculo sea relativamente rápido.

En la Fig.6 hemos representado los resultados de L , L_r y L_s ($L = L_r + L_s$) para $v_F = 0.75$ u.a., los que muestran un típico comportamiento logarítmico para w grande. En la Fig.7 hemos representado los correspondientes poderes de frenamiento reducidos L/w^2 , L_r/w^2 y L_s/w^2 , que salvo un factor $(4\pi n e^4 z^2 / m v_F^2)$, representan respectivamente el poder de frenamiento total y las contribuciones debidas a excitaciones colectivas e individuales, para una carga de valor Ze . La línea de rayas en el rango de velocidades grandes corresponde a la fórmula aproximada de Bethe

$$\frac{1}{w^2} \ln\left(\frac{2mv^2}{\hbar \omega_p}\right) ; \quad (10.1,$$

mientras que la línea de rayas en la región de velocidades pequeñas corresponde a la aproximación analítica

$$C_L = \{ \ln(\beta/\chi^2) - \alpha/\beta \} / 2\alpha^2$$

con $\alpha = 1 - \chi^2/3$, $\beta = 1 + 2\chi^2/3$, obtenida por Lindhard integrando (8.5) con $f_1(0, z) = 1 - z^2/3$.

Es conveniente comentar aquí la regla de partición de Lindhard y Winther⁹; la misma establece que para velocidades mayores que la velocidad mínima para excitación de modos colectivos, $v \geq v_{\min} = v_F u_c$, se cumple la siguiente relación entre las contribuciones a L :

$$L_s = L_r + C \quad (10.2)$$

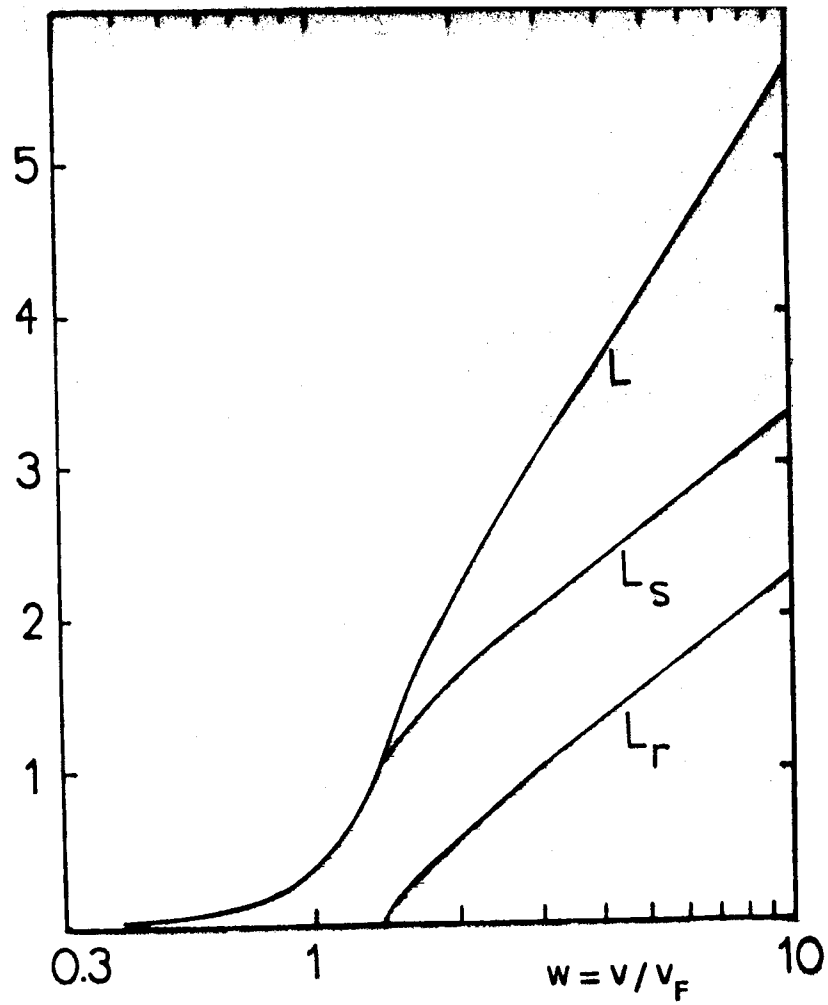


Fig.6

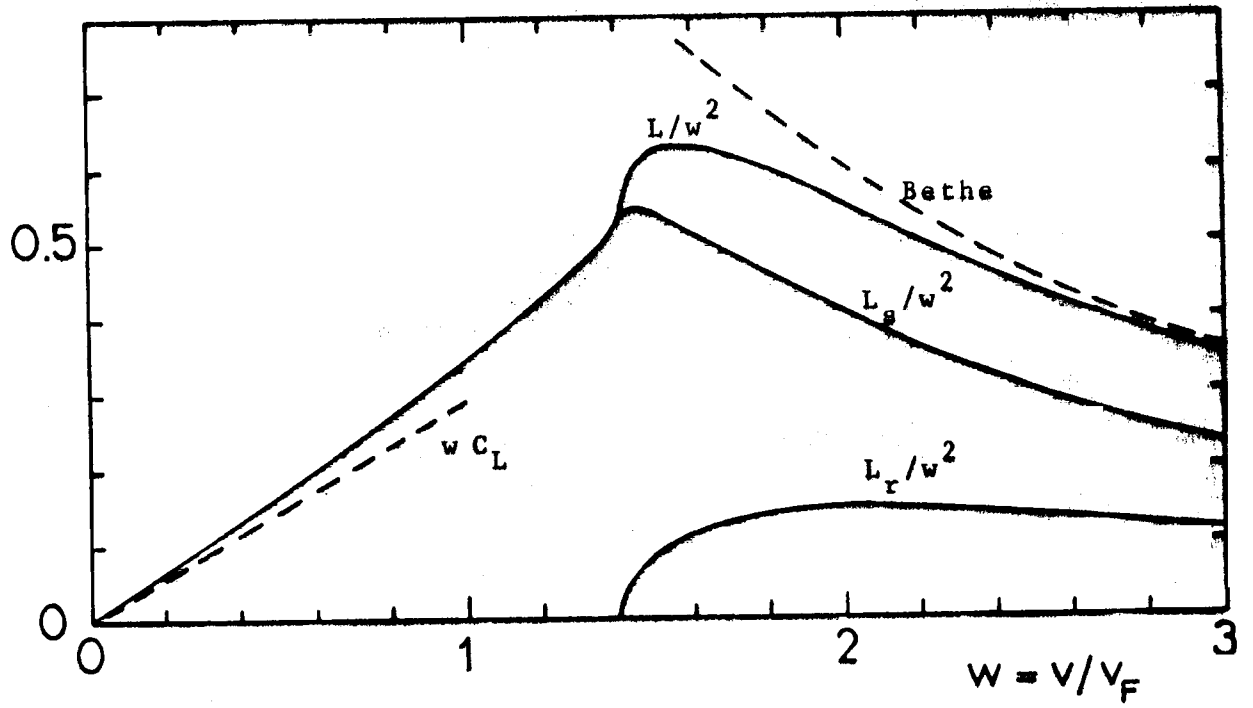


Fig.7

donde la constante C no depende de la velocidad v (es sólo función de la densidad del gas de electrones). Es decir que la diferencia entre las curvas de L_S y L_R debe mantenerse constante, como se observa en la Fig.6.

En consecuencia, para que haya equipartición entre las pérdidas de energía por excitaciones individuales y colectivas, es decir, para que sea $L_S \approx L_R$, la velocidad debe ser suficientemente grande como para que $L_R, L_S \gg C$. Esto requiere por lo general velocidades demasiado grandes como para que un tratamiento no relativista siga siendo válido.

En la Tabla I presentamos los resultados de integración numérica, realizados para $v_F = 0.6, 0.75, \text{ y } 0.9$ unidades atómicas. Los valores denominados L_{ap} e I_{ap} son los que resultan de las expresiones aproximadas siguientes, que corresponden a velocidades grandes (sección 5):

$$L_{ap} = \ln\left(\frac{2mv^2}{\hbar\omega_p}\right) \quad (10.3)$$

$$I_{ap} = \frac{\sin(\omega_p r_0/v)}{(\omega_p r_0/v)} - Ci(\omega_p r_0/v) \quad (10.4)$$

Se presentan resultados para separaciones internucleares de valores $r_0 = 2, 3, 4 \text{ y } 8$ u.a. Las fluctuaciones en el valor de la constante de partición $C = L_S - L_R$ dan idea de la precisión de los cálculos (pues L_R y L_S han sido integrados independientemente).

Puede observarse que para velocidades grandes I_S es mucho menor que I_R , lo cual físicamente corresponde al hecho ya señalado de que para excitaciones individuales violentas las cargas externas tienden a comportarse en forma independiente. Matemáticamente, esto puede explicarse observando la variación del factor de interferencia $g(z) = \sin(2k_F r_0 z)/(2k_F r_0 z)$ en la Fig.4(b), el cual tiende a cancelar la integración para valores grandes de z (al calcular I_S integrando en la región sombreada), pero afecta menos la integración sobre la curva r en donde los valores de z son pequeños.

Los resultados presentados en esta Tabla indican un excelente acuerdo entre L y L_{ap} , y entre I e I_{ap} , para velocidades grandes; el acuerdo es razonablemente bueno aún para $w \approx 2$.

Tabla I

Cálculos de la pérdida de energía a partir de la constante dieléctrica de Línrdhard

	$v_F = 0.6$				$v_F = 0.75$				$v_F = 0.9$						
	$\omega_p=0.303$	$z_c=0.435$	$C=0.965$		$\omega_p=0.423$	$z_c=0.400$	$C=1.03$		$\omega_p=0.556$	$z_c=0.373$	$C=1.07$				
$w = v/v_F$	10.0	8.0	6.0	4.0	2.0	10.0	8.0	6.0	4.0	2.0	10.0	8.0	6.0	4.0	2.0
L_s	3.22	3.00	2.71	2.29	1.52	3.31	3.09	2.80	2.38	1.62	3.38	3.15	2.86	2.45	1.68
L_r	2.25	2.03	1.74	1.32	0.56	2.29	2.05	1.76	1.35	0.59	2.30	2.08	1.79	1.37	0.61
L	5.48	5.03	4.45	3.61	2.08	5.60	5.14	4.56	3.74	2.20	5.68	5.23	4.65	3.82	2.29
L_{ap}	5.47	5.03	4.45	3.64	2.25	5.58	5.14	4.56	3.75	2.36	5.67	5.23	4.65	3.84	2.46
$r_0=2$															
I_s	0.54	0.54	0.54	0.55	0.57	0.43	0.43	0.43	0.43	0.43	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34
I_r	2.18	1.95	1.66	1.25	0.50	2.19	1.95	1.66	1.26	0.51	2.18	1.95	1.66	1.25	0.52
I	2.72	2.49	2.20	1.80	1.07	2.62	2.38	2.09	1.69	0.95	2.52	2.29	2.00	1.59	0.86
I_{ap}	2.72	2.49	2.21	1.81	1.13	2.61	2.38	2.10	1.70	1.02	2.52	2.29	2.00	1.61	0.94
$r_0=3$															
I_s	0.23	0.23	0.23	0.23	0.23	0.14	0.14	0.14	0.14	0.14	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08
I_r	2.09	1.86	1.57	1.16	0.44	2.07	1.84	1.55	1.15	0.43	2.03	1.81	1.52	1.12	0.42
I	2.31	2.09	1.80	1.39	0.67	2.21	1.98	1.69	1.29	0.57	2.11	1.89	1.60	1.19	0.50
I_{ap}	2.31	2.09	1.81	1.41	0.75	2.20	1.98	1.70	1.30	0.65	2.11	1.89	1.61	1.21	0.57
$r_0=4$															
I_s	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	-0.00	-0.00	-0.00	-0.00	-0.00	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03	-0.03
I_r	1.97	1.74	1.46	1.05	0.37	1.92	1.69	1.40	1.01	0.34	1.86	1.63	1.35	0.95	0.30
I	2.03	1.80	1.52	1.11	0.42	1.92	1.69	1.40	1.01	0.34	1.82	1.60	1.31	0.92	0.27
I_{ap}	2.03	1.81	1.52	1.13	0.50	1.92	1.70	1.41	1.02	0.41	1.83	1.61	1.32	0.94	0.33
$r_0=8$															
I_s	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.05	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	-0.00	-0.00	-0.00	-0.00	-0.00
I_r	1.39	1.17	0.89	0.53	0.04	1.26	1.03	0.76	0.41	-0.02	1.14	0.93	0.66	0.32	-0.06
I	1.34	1.12	0.85	0.48	0.01	1.24	1.01	0.74	0.39	-0.05	1.14	0.93	0.66	0.32	-0.06
I_{ap}	1.34	1.13	0.86	0.50	0.03	1.24	1.02	0.75	0.41	-0.02	1.15	0.94	0.67	0.33	-0.04

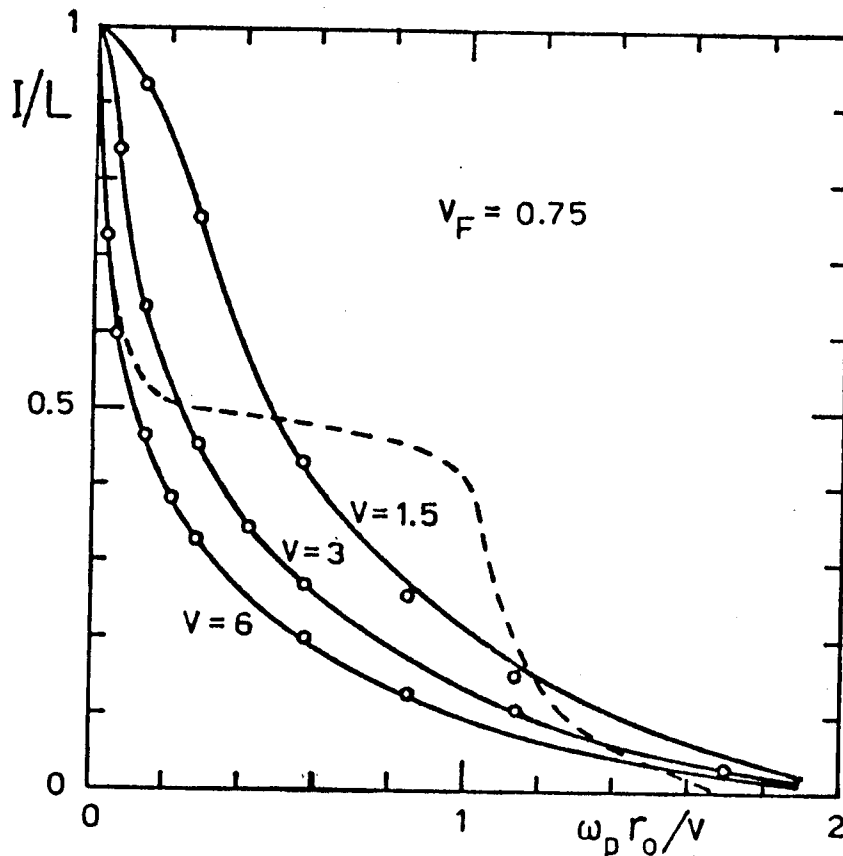


Figura 8

En la Fig.8 hemos representado el cociente I/L en función de $\omega_p r_0 / v$, para $v_F = 0.75$ u.a. ($\omega_p = 0.423$ u.a.) y para $v = 1.5, 3.0$ y 6.0 u.a.. Los círculos son el resultado de integraciones numéricas usando la función dieléctrica de Lindhard. Las curvas continuas corresponden a las expresiones analíticas aproximadas obtenidas en la sección 5 # :

$$L \approx \ln (2mv^2 / \hbar \omega_p) \quad (10.5)$$

$$I \approx G(r_0 \omega_p / v) - G(2mvr_0 / \hbar) \quad (10.6)$$

siendo

$$G(x) = \frac{\sin x}{x} - Ci(x) \quad (10.7)$$

Algunas discrepancias son observables para $v = 1.5$ a.u., mientras que para velocidades mayores el acuerdo es remarcable.

La curva de rayas es el resultado de cálculos aproximados de otros autores²⁴ a partir de un modelo de altas velocidades,

#Nota: El término $G(2mvr_0 / \hbar)$ es importante sólo para r_0 muy chico, pero debe incluirse aquí para obtener el límite unido correcto: $I/L \rightarrow 1$ cuando $r_0 \rightarrow 0$.

similar en principio al nuestro; dichos cálculos están sin embargo caracterizados por la existencia de un "plateau" en $I/L \approx 0.5$, para $\hbar/2mv < r_0 < v/\omega_p$. Tal comportamiento está en desacuerdo con los resultados presentados en el presente trabajo (y con los presentados previamente²⁵). Nos referiremos nuevamente a esta discrepancia en la próxima sección.

El valor de la relación I/L resulta importante para comparar la pérdida de energía media $\langle dW/dt \rangle$ de cargas correlacionadas, dada por (7.4), con la pérdida de energía de cargas independientes, dada por

$$\sum_i \frac{dW_i}{dt} = \frac{4\pi n e^4}{mv} (Z_1^2 + Z_2^2) L \quad (10.8)$$

Esto determina una relación de pérdida de energía

$$R = \frac{\langle dW/dt \rangle}{\sum_i dW_i/dt} = 1 + \left(\frac{2Z_1 Z_2}{Z_1^2 + Z_2^2} \right) \frac{I}{L}, \quad (10.9)$$

y en particular, si $Z_1 = Z_2$:

$$R = 1 + \frac{I}{L} \quad (10.10)$$

11. Pérdida de energía y regla de partición

Un argumento sencillo para estimar la pérdida de energía de un grupo de cargas rápidas ha sido dado por Brandt, Ratkowski y Ritchie^{24,15}, sobre la base de la regla de equipartición del frenamiento y de una hipótesis simplificatoria.

La hipótesis es que si la separación r_0 entre las cargas (consideramos sólo dos cargas) es tal que:

$$\frac{\hbar}{2mv} \ll r_0 \ll \frac{v}{\omega_p} \quad (11.1)$$

entonces las cargas actuarán como independientes respecto a las excitaciones individuales (colisiones "próximas"), y como una

única carga, de valor $(Z_1+Z_2)e$, respecto a las excitaciones colectivas (colisiones "distantes"). De acuerdo con ésto, la pérdida de energía media será:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle &= \frac{4\pi ne^4}{mv} \left\{ (Z_1^2+Z_2^2) L_S + (Z_1+Z_2)^2 L_R \right\} \\ &\approx \frac{4\pi ne^4}{mv} \left\{ (Z_1^2+Z_2^2) L + 2Z_1Z_2 L_R \right\} \end{aligned} \quad (11.2)$$

siendo $L=L_S+L_R$; mientras que la pérdida de energía de cargas independientes estará dada por (10.8). Con esto resulta una relación de pérdida de energía

$$R = \frac{\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle}{\sum_i \frac{dW_i}{dt}} \approx 1 + \left(\frac{2Z_1Z_2}{Z_1^2+Z_2^2} \right) \frac{L_R}{L} \quad (11.3)$$

En particular, si $Z_1=Z_2$:

$$R \approx 1 + (L_R/L) \quad (11.4)$$

La regla de equipartición de Bohr establece que la pérdida de energía de una carga rápida se distribuye en proporciones aproximadamente iguales en pérdidas por colisiones próximas y por colisiones distantes; es decir: $L_R/L \approx L_S/L \approx 0.5$, de donde resulta $R \approx 1.5$. De este modo la existencia de un "plateau" en los cálculos antes mencionados fue interpretada como una manifestación de la regla de partición $L_R/L \approx 0.5$.

Para tratar de obtener un valor más apropiado de R , Brandt y Ritchie¹⁵ usaron posteriormente la regla de partición de Lindhard y Winther, según la cual para $v > v_{\min}$ (ver ecuación (7.8)) es $L_S=L_R+C$, donde C no depende de la velocidad v . En este caso R resulta siempre menor que 1.5 (en mejor acuerdo con los resultados experimentales)

Notemos que la condición (11.1) es la correspondiente al llamado límite mixto en la sección 5, y que, además, el comportamiento de cargas separadas o unidas es rigurosamente correcto sólo si consideramos, respectivamente, las colisiones próximas en que la transferencia de impulso es grande, tales que $k \gg r_0^{-1}$, o las colisiones

distantes en el sentido de que $k \ll r_0^{-1}$; pero para valores intermedios de k , sobre los cuáles es necesario integrar, el comportamiento es más complicado. Por otra parte, cuando la condición (11.1) se cumple, nuestro tratamiento aproximado²⁵ da una expresión sencilla para I (ver sección 5):

$$I \approx (1-\gamma) + \ln\left(\frac{v}{r_0 \omega_P}\right) \quad (11.5)$$

En este caso las cargas actúan como separadas respecto a excitaciones individuales violentas ($r_0 k_2 = r_0 (2mv/\hbar) \gg 1$), y como cargas unidas para excitaciones colectivas de longitud de onda largas ($r_0 k_1 = r_0 \omega_P / v \ll 1$), pero las interferencias sobre todo el rango intermedio de k están integradas adecuadamente.

Este comportamiento indica además que no hay una relación sencilla entre I y L_T , y que por consiguiente no es posible establecer una vinculación general entre la pérdida de energía de cargas correlacionadas y la regla de partición.

La expresión (10.9), junto con (10.5) y (10.6), describe correctamente los efectos de interferencia en la pérdida de energía para velocidades grandes y separaciones r_0 arbitrarias, y será apropiada para describir la pérdida de energía de iones correlacionados rápidos en el interior de un sólido, teniendo en cuenta que la separación internuclear entre los iones aumenta con el tiempo por efecto de la repulsión entre los mismos.

CAPITULO 3

PERDIDA DE ENERGIA DE IONES MOLECULARES EN LAMINAS DELGADAS

Resumen: En los capítulos previos hemos estudiado la pérdida de energía de un grupo de cargas en un gas de electrones, con especial interés en el caso de velocidades grandes. El objeto del presente Capítulo es considerar la existencia de efectos de agrupamiento en la pérdida de energía de iones rápidos en láminas delgadas, para un caso en que existen mediciones experimentales. La aplicabilidad de algunos de los resultados obtenidos anteriormente debe pues discutirse en forma particular teniendo en cuenta las propiedades del material frenante.

Correcciones a la pérdida de energía, debido al ancho finito de la resonancia de plasma y a la excitación de electrones de capas internas, se consideran en las secciones 12 y 13. En la sección 14 se describe la integración de la pérdida de energía en una lámina delgada, teniendo en cuenta la repulsión entre los iones. Finalmente se considera el caso de iones moleculares de hidrógeno incidiendo sobre láminas de carbono comparándose los resultados experimentales con los calculados aquí.

12. Efecto del ancho de la resonancia de plasma

En el modelo de Lindhard para la constante dieléctrica las excitaciones colectivas están descriptas por una curva de resonancia de ancho nulo, lo cual manifiesta que en la aproximación RPA los plasmones tienen vida media infinita para $k < k_c$. En casos reales diversos mecanismos de decaimiento dan a la resonancia de plasma un ancho finito ³⁸. El objeto de la presente sección es dar una descripción simple del efecto del ancho de la resonancia sobre el valor del término de interferencia I , y obtener una estimación de este efecto.

Consideramos nuevamente velocidades grandes, y además separaciones internucleares r_0 grandes, despreciando en consecuencia la contribución al valor de I debida a excitaciones individuales. Para describir la resonancia de plasma usaremos el modelo de

Drude ^{33,39} para $\epsilon(\omega)$, lo cual nos da

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(\omega)} \right] = \omega_p^2 \frac{\gamma \omega}{(\omega^2 - \omega_p^2)^2 + \gamma^2 \omega^2} \quad (12.1)$$

donde γ es, aproximadamente, el ancho total del pico (correspondiendo a un tiempo de relajación γ^{-1}).

El término de interferencia I , de acuerdo con (7.6), resulta dado por

$$I = \frac{2}{\pi \omega_p^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \frac{\sin kr_0}{kr_0} \int_0^{kv} d\omega \omega \text{Im}\{-1/\epsilon(\omega)\} \quad (12.2)$$

integrando por partes respecto de k y usando (12.1) se obtiene:

$$I = I(x_p, \Gamma) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty dx G(x) \frac{\Gamma x^2}{(x^2 - x_p^2)^2 + x^2 \Gamma^2} \quad (12.3)$$

en donde los parámetros x_p y Γ están dados por

$$x_p = \frac{r_0 \omega_p}{v} ; \quad \Gamma = \frac{r_0 \gamma}{v} \quad (12.4)$$

y comparan, respectivamente, el intervalo de tiempo que separa las cargas $\sim r_0/v$, con el período de las oscilaciones de plasma $T_p = 2\pi/\omega_p$ y con el tiempo de relajación γ^{-1} . La función $G(x) = \sin x/x - \text{Ci}(x)$ es la representada en la Fig.3 .

En particular, para $\Gamma/x_p \rightarrow 0$, (12.3) nos da $I(x_p, 0) = G(x_p)$, lo cual corresponde al resultado (5.14) para ancho nulo de la resonancia; mientras que para $\Gamma \neq 0$, (~~12.3~~^{12.3}) promedia la función de interferencia sobre la curva de ancho finito. La relación $I(x_p, \Gamma)/I(x_p, 0)$, que representa la reducción en el valor de I debida al ancho de la resonancia de plasma, ha sido calculada para diversos valores de x_p con los resultados que se muestran en la Fig.9 .

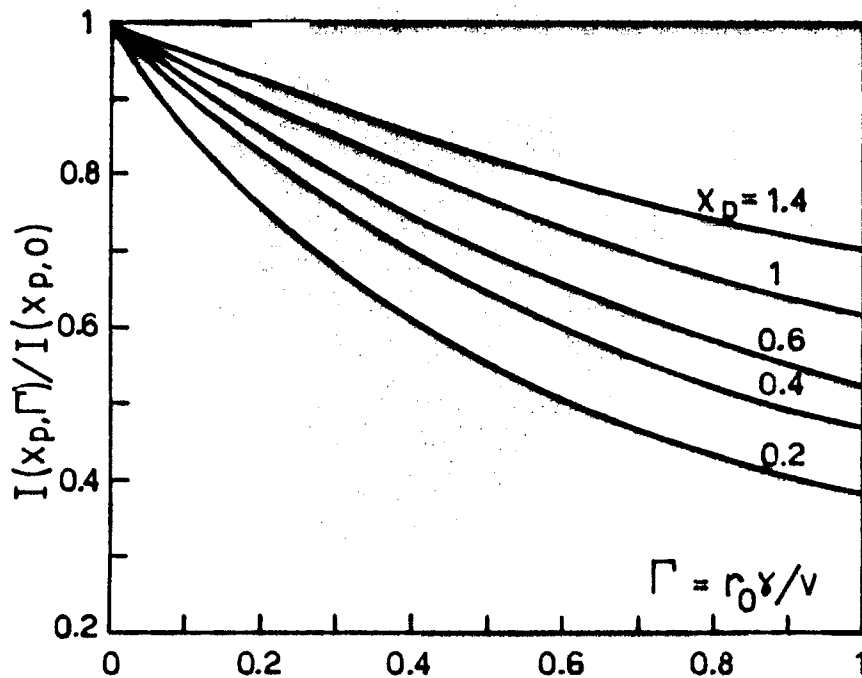


Figura 9

13. Corrección por excitación de capas internas

Hasta aquí hemos tenido en cuenta la pérdida de energía de cargas agrupadas debida únicamente a electrones de valencia, con la hipótesis de que un modelo de electrones libres sea aplicable. Discutiremos ahora en qué forma los resultados previos deben corregirse al incluir los procesos de excitación de capas internas, y consideraremos esta corrección para el caso particular del carbono.

En términos generales, este tipo de excitaciones dará contribuciones adicionales a la pérdida de energía calculada previamente. Para el caso de dos cargas $Z_1 e$ y $Z_2 e$, moviéndose con velocidad v en el medio material, la pérdida de energía (por unidad de tiempo) $\langle dW_c/dt \rangle$ debida a excitación de capas internas, puede escribirse en una forma análoga a la obtenida para excitación de electrones externos; esto es:

$$\left\langle \frac{dW_c}{dt} \right\rangle = \frac{4\pi n_a e^4}{mv} \left\{ (Z_1^2 + Z_2^2) B_c + 2Z_1 Z_2 I_c \right\} \quad (13.1)$$

siendo n_a la densidad de átomos del material frenante. Los términos B_c e I_c tienen sin embargo un comportamiento cuantitativamente

diferente al de los correspondientes términos (ecuación (7.4)) que describen la excitación de los electrones de valencia, debido principalmente a que las energías de excitación de las capas internas son mucho mayores. En particular, el valor del término de interferencia I_c dependerá de la relación entre el valor de r_0 y el parámetro de impacto adiabático para transferir una energía de excitación E_v a un electrón de una capa interna, es decir $b_{ad} = \hbar v / E_v$. Para que los efectos de interferencia en la excitación de electrones de capas internas sean importantes es necesario que $b_{ad} > r_0$, o bien:

$$v > r_0 E_v / \hbar \quad (13.2)$$

pues en este caso el electrón que es excitado puede interactuar en forma no adiabática con ambos proyectiles. Esta condición requiere en la práctica valores de la velocidad v generalmente grandes. Por ejemplo, para la capa K del carbono es $E_K = 284 \text{ eV} \approx 10 \text{ u.a.}$, y si tomamos como separación entre las cargas un valor $r_0 \approx 1 \text{ \AA} \approx 2 \text{ u.a.}$, la condición (13.2) implica $v > 20 \text{ u.a.}$, lo cual significa velocidades considerablemente grandes (respecto a la velocidad de Bohr). Por el contrario, si $v \ll r_0 E_v / \hbar$, los parámetros de impacto adiabáticos son mucho menores que r_0 , pudiendo entonces desprejarse el término de interferencia I_c en (13.1) y la pérdida de energía por excitación de capas internas será la que corresponde a capas separadas.

Por su parte el término $(Z_1^2 + Z_2^2) B_c$, que representa la pérdida de energía de cargas independientes, es importante sobre un rango más amplio de velocidades. Para velocidades suficientemente grandes, tales que $2mv^2 \gg E_v$, el número de frenamiento B_c tiene un comportamiento logarítmico del tipo de Bethe. Para velocidades menores el comportamiento de B_c es más complicado. El problema de excitación de capas internas, y el cálculo de B_c , ha sido considerado por diversos autores dado que concierne, más específicamente, al frenamiento de cargas aisladas¹.

La pérdida de energía de dos cargas en movimiento correlacionado resulta entonces de adicionar las fórmulas (7.4) y (13.1) que corresponden a excitación de electrones de valencia y de capas internas. Nos ocuparemos un poco más en detalle del caso en que I_c sea desprejiable, es decir, que no haya efectos de agrupamiento

en la excitación de capas internas; esto puede abarcar en la práctica un rango de velocidades relativamente amplio. En tal caso podemos escribir la pérdida de energía de dos cargas correlacionadas en la siguiente forma:

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = \frac{4\pi n_a e^4}{mv} \left\{ (Z_1^2 + Z_2^2) (N_v L + B_c) + 2Z_1 Z_2 N_v I \right\} \quad (13.3)$$

siendo N_v el número de electrones de valencia por átomo (la densidad de electrones de valencia es $n = n_a N_v$). La única diferencia con la ecuación (7.4) es la inclusión del término de corrección B_c

Conviene entonces definir los números de frenamiento B_v y B_t como

$$\begin{aligned} B_v &= N_v L \\ B_t &= B_v + B_c \end{aligned} \quad (13.4)$$

Por otra parte, la pérdida de energía correspondiente a cargas independientes será:

$$\sum_i \frac{dW_i}{dt} = \frac{4\pi n_a e^4}{mv} (Z_1^2 + Z_2^2) B_t \quad (13.5)$$

Resultando así una relación de pérdida de energía

$$R = \frac{\langle dW/dt \rangle}{\sum_i dW_i/dt} = 1 + \left[\frac{2Z_1 Z_2}{Z_1^2 + Z_2^2} \right] \frac{B_v}{B_t} \frac{I}{L}; \quad (13.6)$$

de modo que la diferencia respecto a la expresión (10.9) obtenida anteriormente se debe al factor de corrección

$$\frac{B_v}{B_t} = \frac{B_v}{B_v + B_c} \quad (13.7)$$

El grado de importancia de este factor dependerá del rango de velocidades que se considere y de las propiedades atómicas del material frenante. En la Tabla II presentamos valores de B_v/B_t

para el caso particular del carbono. Los valores de B_c se han obtenido a partir de la teoría de Bethe - Walske⁴⁰ para excitación de capa K, y $B_v = N_v L$ se ha calculado con $N_v = 4$ y L dado por la fórmula (10.5), correspondiente a velocidades grandes y tomando $\hbar\omega_p = 25$ eV.

Tabla II

Corrección por excitación de la capa K para el carbono

v(u.a.)	2.0	3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0
B_v	8.66	11.9	14.2	16.0	17.4	18.7	19.7
B_c	0.04	0.22	0.61	1.15	1.75	2.36	2.97
B_v/B_t	1.0	0.98	0.96	0.93	0.91	0.89	0.87

De los valores presentados en esta Tabla se deduce que la corrección por excitación de capa K del carbono es poco importante para las velocidades consideradas, que corresponden al rango en que existen resultados experimentales.

14. Integración de la pérdida de energía en una lámina

En las secciones previas hemos considerado la pérdida de energía de dos cargas $Z_1 e$, $Z_2 e$, con separación $r = r_0$ fija. Para comparar con resultados experimentales hay que tener en cuenta que al atravesar una lámina de espesor Δx , la separación r entre las cargas no será constante.

Despreciando efectos de apantallamiento a distancias r pequeñas (la longitud de apantallamiento dinámico, dada por v/ω_p , es grande para cargas rápidas¹⁹) podemos suponer que las cargas se separarán por efecto de su repulsión coulombiana¹⁷. En este caso la variación de $r = r(t)$ con el tiempo t puede calcularse mediante^{17,41}

$$t = \left(\frac{\mu}{Z_1 Z_2 e^2} \right)^{1/2} \left(\frac{r_i}{2} \right)^{3/2} \left\{ \frac{2}{x} \sqrt{1-x} + \ln \left| \frac{1+\sqrt{1-x}}{1-\sqrt{1-x}} \right| \right\} \quad (14.1)$$

siendo r_i la separación a tiempo $t=0$ y $x = r_i/r(t)$; μ es la masa reducida de las cargas Z_1e y Z_2e .

La pérdida de energía ΔE en una lámina de espesor Δx resultará de integrar

$$\Delta E = \int_0^T dt \left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle \quad (14.2)$$

donde $\langle dW/dt \rangle$ es la pérdida de energía correspondiente a una separación $r = r(t)$; T es el tiempo de tránsito en la lámina, es decir $T = \Delta x/v$.

Una expresión más conveniente es

$$\Delta E = \int_{r_i}^{r_f} dr \left(\frac{dt}{dr} \right) \left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle \quad (14.3)$$

siendo $r_i = r(0)$ y $r_f = r(T)$, la separación inicial y final entre las cargas al atravesar la lámina, y siendo

$$\frac{dt}{dr} = \left[\frac{2Z_1Z_2e^2}{\mu} \left(\frac{1}{r_i} - \frac{1}{r} \right) \right]^{-1/2} \quad (14.4)$$

Por otra parte, la pérdida de energía correspondiente a cargas independientes ΔE_{ind} será:

$$\Delta E_{ind} = \sum_i \frac{dW_i}{dt} T \quad (14.5)$$

La relación de pérdida de energía en la lámina será entonces

$$R = \frac{\Delta E}{\Delta E_{ind}} = \frac{1}{T} \int_{r_i}^{r_f} dr \left(\frac{dt}{dr} \right) \frac{\langle dW/dt \rangle}{\sum_i dW_i/dt} \quad (14.6)$$

donde el cociente que aparece en el integrando estará dado por (13.6), en función de los valores de I y de L . Al disponer de expresiones analíticas simples para I y para L , la integración numérica de (14.6) no presenta inconvenientes. Para dicha integración L tiene un valor constante (por considerarse constante la velocidad), pero I en cambio depende de la separación $r(t)$.

15. Comparación con resultados experimentales

A efectos de comparar la teoría con resultados experimentales de pérdida de energía de haces de H_2^+ incidiendo sobre láminas de carbono, es necesario hacer un comentario para este caso particular, respecto de la aplicabilidad de los resultados obtenidos previamente, con un modelo de electrones libres. Nos limitaremos a considerar velocidades grandes ($v \gg v_F$), dado que en este caso el poder de frenamiento es poco sensible respecto de detalles de los estados electrónicos del blanco¹.

Para velocidades grandes, los procesos relevantes en la pérdida de energía de partículas cargadas, por excitación de electrones de valencia, son las excitaciones individuales violentas de dichos electrones, y las excitaciones colectivas de longitudes de onda largas; de ambos procesos, solamente el último será importante en cuanto a la magnitud del término de interferencia.

Las excitaciones individuales debidas a colisiones violentas suponen transferencias de energías grandes, de modo que los electrones de valencia pueden considerarse como libres al respecto. Las inhomogeneidades en la densidad electrónica tampoco son muy importantes para estas colisiones, pues las cargas al moverse realizan, en cierta forma, un promedio de la densidad local.

En cuanto a la caracterización de las excitaciones colectivas, no es posible dar argumentos generales, cuando se considera elementos que no presentan comportamiento típico de electrones libres. Puede en cambio obtenerse información importante en ese sentido, para cada elemento en particular, a partir de datos de pérdida de energía de electrones, o mediciones de propiedades ópticas en la región ultravioleta.

En la Fig.10 se muestran los resultados obtenidos por Taft y Philipp⁴², a partir de mediciones ópticas, para la parte real ϵ_1 e imaginaria ϵ_2 de la constante dieléctrica del carbono (grafito), y para la función de pérdida de energía $\text{Im}\{-1/\epsilon\}$, en función de la energía $E = \hbar\omega$, en el rango óptico. Se observa aquí la existencia de dos picos importantes en la función $\text{Im}\{-1/\epsilon\}$, para energías de 7 y 25 eV. La existencia de los mismos y los valores de las energías están en buen acuerdo con mediciones de pérdida de energía de electrones en carbono⁴³. Puede verse también que ambos picos

aparecen para energías en que $\epsilon_1 = 0$ y ϵ_2 es pequeño; son pues considerados como debidos a oscilaciones de plasma.

Dado que la pérdida de energía depende del producto (ver ecuación (7.3) o (12.2)):

$$\omega \operatorname{Im}\{-1/\epsilon\},$$

la contribución del pico de 7 eV es poco importante. En efecto, las áreas de ambos picos en Fig. 10 están en una relación aproximada de 1:11, y al ser multiplicados por sus respectivas energías dan

una relación 1:39 (esta es aproximadamente la misma relación en que los electrones π y σ contribuyen a la regla de suma de $\operatorname{Im}\{-1/\epsilon\}$, de acuerdo con una integración más cuidadosa de Taft y Philipp⁴²). En consecuencia, solamente tendremos en cuenta la resonancia de 25 eV en el cálculo de la pérdida de energía.

La curva de $\operatorname{Im}\{-1/\epsilon\}$ para $\hbar\omega > 15$ eV puede aproximarse con la fórmula de Drude (12.1). El valor de γ apropiado puede obtenerse de la Fig.10, a partir del valor máximo:

$$\operatorname{Im}\{-1/\epsilon\}_{\max} = \frac{\omega_p}{\gamma} \approx 3.7 \quad (15.1)$$

Para $\omega_p = 25$ eV/ $\hbar \approx 0.92$ u.a., obtenemos $\gamma \approx 0.25$ u.a. El valor de γ permite estimar la corrección al valor de I debido al ancho de la resonancia de plasma.

En la Fig.11 se muestran los resultados de Tape y colaboradores²⁶ para la relación de pérdida de energía R de iones moleculares y atómicos de hidrógeno en láminas de carbono (200 - 2000 Å de espesor) para energías de 655 KeV a 1 Mev por nucleón. Las curvas a y b son resultados teóricos obtenidos para un valor intermedio de la

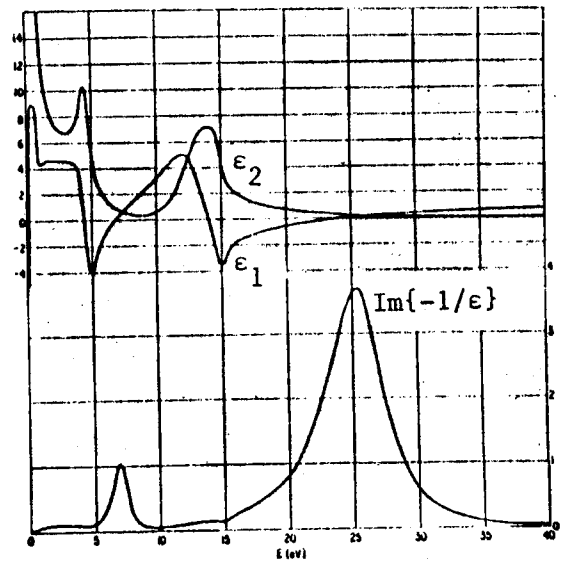


Fig.10

velocidad: $v = 6$ u.a., integrando numéricamente la expresión (14.6) para tener en cuenta la repulsión coulombiana entre los protones provenientes de la molécula de H_2^+ . Se ha tomado como separación inicial $r_i = 1.3 \text{ \AA}$, lo cual es un promedio de separaciones internucleares, sobre los estados vibracionales de H_2^+ que son poblados en una fuente de iones^{24,45}

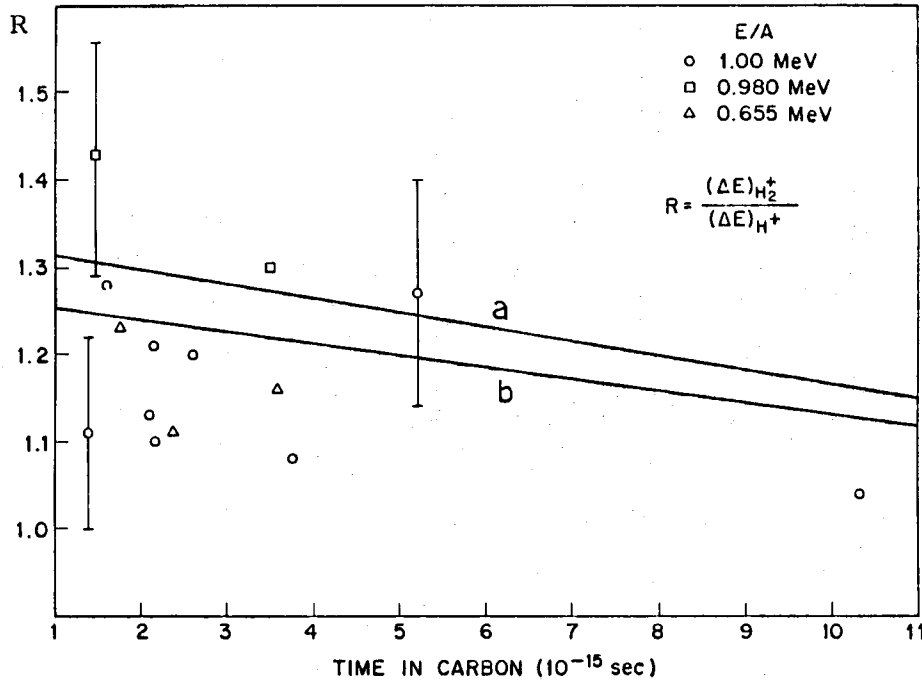


Figura 11

La curva (a) resulta de integrar (14.6) numéricamente, para distintos tiempos de tránsito en la lámina, usando la expresión no corregida (10.10):

$$\frac{\langle dW/dt \rangle}{\sum_i dW_i/dt} = 1 + I/L \quad (15.2)$$

con las expresiones (10.3) y (10.4) para L e I respectivamente.

La curva (b) resulta de usar la expresión corregida (13.6) debido a excitación de capas internas, con $B_v/B_t = 0.91$, de acuerdo con los cálculos para la capa K del carbono (Tabla II); el ancho de la resonancia de plasma da un factor de corrección adicional $I(x_p, \Gamma)/I(x_p, 0) \approx 0.9$, que ha sido también tenido en cuenta.

Pese a los amplios márgenes de incerteza experimental en los resultados mostrados, las siguientes conclusiones pueden extraerse: 1°) los resultados experimentales dan evidencia de la existencia de efectos de agrupamiento en la pérdida de energía de iones moleculares; 2°) los valores de R son claramente menores que el valor 1.5 previsto por una descripción basada en la regla de equipartición; 3°) la magnitud de los efectos observados concuerda con las expectativas teóricas.

Conviene indicar además que la amplitud de los errores experimentales es en buena parte adjudicable al método de medición empleado. La dificultad reside en medir la energía de los iones transmitidos en la lámina, dado que al stragglings natural de la pérdida de energía se añade una dispersión que resulta aún más grande, debida a la energía de repulsión electrostática liberada en la disociación molecular (observada en el sistema del laboratorio). Esto origina un ancho en los espectros de energía de los iones observados que es del mismo orden de magnitud que el efecto que se quiere medir.

Un método diferente de medición de poderes de frenamiento ha sido introducido por H.H. Andersen y colaboradores⁴⁴, basado en la medición directa de la energía depositada en la lámina. Tal procedimiento no estaría afectado por la explosión coulombiana de las moléculas, y podría ser un método adecuado para una medición más precisa de la pérdida de energía de iones moleculares rápidos en láminas sólidas.

SEGUNDA PARTE

EFFECTOS DE INTERFERENCIA EN LA RADIACION DE TRANSICION
DE UN GRUPO DE CARGAS NO RELATIVISTAS

1. Introducción

a) Consideraciones previas

El fenómeno de "radiación de transición" consiste en la emisión de un pulso de radiación electromagnética cuando una partícula cargada atraviesa, con velocidad constante, la superficie de separación entre dos medios con diferentes propiedades dieléctricas. Esta radiación es originada por la polarización eléctrica inducida en el medio material, y surge como una consecuencia directa de las ecuaciones de la electrodinámica. La teoría de la radiación de transición fue formulada por Ginzburg y Frank⁴⁶, y ha sido motivo de continuo interés posteriormente⁴⁷⁻⁵¹. Revisiones sobre el tema han sido efectuadas por Frank⁵⁰ y, más recientemente, por Ter-Mikaelian⁵¹.

En el caso de conductores perfectos esta radiación puede pensarse como debida a la desaparición (o aparición) instantánea de un dipolo, formado por la carga externa y la carga imagen, en el momento en que la primera entra al medio material (o sale del mismo). Un cálculo microscópico aproximado de la radiación de transición, como resultante de la polarización dinámica inducida en el medio por la carga externa, fue realizado por Ashley y Ritchie⁴⁸.

El caso de una lámina delgada atravesada por partículas rápidas fue estudiado por Pafomov⁴⁹ (ver también Ritchie y Eldridge⁴⁷), quien demostró que si la lámina es transparente se producen efectos de interferencia entre la radiación emitida por cada superficie. Si los efectos de atenuación en el material son importantes, es decir, si el ancho de la lámina es mayor que la profundidad desde la cual la radiación puede emerger, la intensidad de radiación emitida por la lámina (hacia adelante o hacia atrás) coincide con la correspondiente a un medio semi infinito.

Las primeras investigaciones experimentales de la radiación emitida por superficies al ser bombardeadas con electrones fueron realizadas por Lilienfeld⁵² en 1919, cuando el origen de dicha radiación era aún desconocido. Más recientemente ha sido demostrado que la radiación de Lilienfeld corresponde al fenómeno de radiación de transición descrito teóricamente por Ginzburg y Frank⁵³.

La radiación emitida por diversos materiales, tanto en la región visible como en el ultravioleta, ha sido experimentalmente estudiada, hallándose en general un buen acuerdo con la teoría^{50, 51}. Los casos más estudiados son los de láminas y blancos gruesos de elementos metálicos, bombardeados con haces de electrones de energías variables (entre 2 y 80 KeV). La emisión de radiación de transición ha sido además observada por Goldsmith y Jelley⁵⁴, para el caso de protones, con energías de 1 a 5 MeV, incidiendo en metales.

b) Descripción del trabajo

Se estudia aquí teóricamente la radiación de transición producida cuando un grupo de cargas no relativistas atraviesa la superficie de separación entre un medio material no magnético, con constante dieléctrica $\epsilon(\omega)$, y el vacío.

Se analizan los efectos de interferencia que tienen lugar; demostrándose que los mismos son importantes, para partículas no relativistas, cuando la separación entre las cargas del grupo es considerablemente menor que la longitud de onda de la radiación emitida. En tal caso dichos efectos pueden describirse mediante un factor de interferencia que depende únicamente de la frecuencia de la radiación y de la estructura del grupo de cargas en el momento de cruzar la interfase.

Se analizan finalmente las condiciones para que los efectos de interferencia en la radiación de transición sean observables cuando se hace incidir proyectiles moleculares rápidos sobre láminas sólidas delgadas⁵⁵.

En la sección 2 se plantea el problema de determinar los campos electromagnéticos a partir del vector de Hertz. En la sección 3 se calculan los campos correspondientes a un grupo de cargas en un medio infinito, y en la sección 4 se obtienen los campos para un medio semi infinito, en el caso de incidencia normal. Los campos de radiación se obtienen en la sección 5 mediante el procedimiento de la integral de fase estacionaria. En la sección 6 se describen los efectos de interferencia en la radiación emitida y en la sección 7 se aplican los resultados al caso de proyectiles moleculares de hidrógeno incidiendo sobre láminas sólidas.

2. Ecuaciones de Maxwell y vector de Hertz

Para obtener los campos electromagnéticos producidos por densidades de carga y corriente $\rho(\vec{r}, t)$ y $\vec{j}(\vec{r}, t)$ en un medio material no magnético, caracterizado por una constante dieléctrica dependiente de la frecuencia $\epsilon(\omega)$, es conveniente hacer un análisis de Fourier de los campos y fuentes, del tipo

$$X(\vec{r}, \omega) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} X(\vec{r}, t) \quad (2.1)$$

de modo que las ecuaciones de Maxwell toman la siguiente forma (para permeabilidad $\mu=1$)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D}(\vec{r}, \omega) = 4\pi\rho(\vec{r}, \omega) \quad (2.2)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H}(\vec{r}, \omega) = 0 \quad (2.3)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}(\vec{r}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \vec{H}(\vec{r}, \omega) \quad (2.4)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, \omega) = \frac{4\pi}{c} \vec{j}(\vec{r}, \omega) - \frac{i\omega}{c} \vec{D}(\vec{r}, \omega) \quad (2.5)$$

y consideramos además una relación local simple entre el desplazamiento $\vec{D}(\vec{r}, \omega)$ y el campo eléctrico $\vec{E}(\vec{r}, \omega)$ # :

$$\vec{D}(\vec{r}, \omega) = \epsilon(\omega) \vec{E}(\vec{r}, \omega) \quad (2.6)$$

Si introducimos ahora el vector de Hertz $\vec{\Pi}(\vec{r}, \omega)$, a través de las siguientes relaciones⁵⁶

$$\vec{H}(\vec{r}, \omega) = -\frac{i\omega}{c} \epsilon(\omega) \vec{\nabla} \times \vec{\Pi}(\vec{r}, \omega) \quad (2.7)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, \omega) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{\Pi}(\vec{r}, \omega)) + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) \vec{\Pi}(\vec{r}, \omega) \quad (2.8)$$

resulta inmediato que las ecuaciones (2.3) y (2.4) se satisfacen trivialmente, mientras que la ecuación (2.5) nos da

Para medios anisotrópicos la relación entre \vec{D} y \vec{E} es de tipo tensorial; aquí consideramos sólo el caso de materiales isotrópicos, que son los más comunmente usados en estudios de radiación de transición.

$$\nabla^2 \vec{\Pi}(\vec{r}, \omega) + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) \vec{\Pi}(\vec{r}, \omega) = - \frac{4\pi i}{\omega \epsilon(\omega)} \vec{J}(\vec{r}, \omega) \quad (2.9)$$

Puede verse además que la ecuación (2.2) también se satisface a partir de (2.9) y de la ecuación de continuidad

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, \omega) = i\omega\rho(\vec{r}, \omega) \quad (2.10)$$

Nuestro problema consistirá pues en resolver, para una situación particular, la ecuación (2.9); determinando luego los campos electromagnéticos mediante (2.7) y (2.8). Una simplificación conveniente resulta de aplicar, a los campos y fuentes, la siguiente transformación

$$X(\vec{k}, z, \omega) = (2\pi)^{-1} \int dx \int dy e^{-i(xk_x + yk_y)} X(\vec{r}, \omega) \quad (2.11)$$

de modo que la ecuación (2.9) se reduce a una ecuación diferencial ordinaria en la variable z:

$$\left[k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) \right] \vec{\Pi}(\vec{k}, z, \omega) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \vec{\Pi}(\vec{k}, z, \omega) = \frac{4\pi i}{\omega \epsilon(\omega)} \vec{J}(\vec{k}, z, \omega) \quad (2.12)$$

La dependencia en x e y queda así expresada a través del vector bidimensional $\vec{k} = (k_x, k_y)$, mientras que la dependencia en z la trataremos en forma explícita, lo cual será apropiado para determinar los campos en el caso de considerar un medio material semi infinito en la región $z < 0$.

3. Campos de un grupo de cargas en un medio infinito

Calcularemos aquí el vector de Hertz correspondiente a un grupo de N cargas, de valores $Z_n e$, moviéndose en un medio material infinito con velocidad v_n en dirección \hat{z} #. La densidad de corriente asociada a este grupo de cargas será:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \hat{z} \sum_n v_n Z_n e \delta(\vec{r} - \vec{r}_n - \hat{z} v_n t) \quad (3.1)$$

siendo $\vec{r}_n = (x_n, y_n, z_n)$ la posición de la carga $Z_n e$ a tiempo $t = 0$.

El caso de incidencia oblicua se trata en el Apéndice.

Transformando, mediante (2.1) y (2.11), de las variables x, y, t a las más convenientes k_x, k_y, ω , obtenemos:

$$\vec{j}(\vec{k}, z, \omega) = \hat{z} \sum_n j_n(\vec{k}, \omega) e^{i\omega z/v_n} \quad (3.2)$$

siendo

$$j_n(\vec{k}, \omega) = \frac{z_n e}{(2\pi)^{3/2}} \exp\{-i(\vec{k} \cdot \vec{\rho}_n + \omega z_n/v_n)\} \quad (3.3)$$

y donde $\vec{\rho}_n = (x_n, y_n)$ es la componente vectorial de \vec{r}_n perpendicular al eje z .

Un procedimiento conveniente para resolver (2.12) es superponer los campos $\vec{\Pi}_n(\vec{k}, z, \omega)$ generados por las correspondientes corrientes $j_n(\vec{k}, \omega) \exp(i\omega z/v_n)$; dado que la dependencia en z de estas corrientes aparece sólo en el factor $\exp(i\omega z/v_n)$, la solución buscada será de la forma

$$\vec{\Pi}_n(\vec{k}, z, \omega) = \hat{z} \Pi_n(\vec{k}, \omega) e^{i\omega z/v_n} \quad (3.4)$$

y el valor de $\Pi_n(\vec{k}, \omega)$ se determina por sustitución en (2.12), resultando

$$\Pi_n(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi i}{\omega \epsilon(\omega)} \frac{j_n(k, \omega)}{\{k^2 + (\omega/v_n)^2 - (\omega/c)^2 \epsilon(\omega)\}} \quad (3.5)$$

El vector de Hertz correspondiente al grupo de cargas, en un medio semi-infinito, será entonces simplemente

$$\begin{aligned} \vec{\Pi}(\vec{k}, z, \omega) &= \sum_n \vec{\Pi}_n(\vec{k}, z, \omega) \\ &= \frac{4\pi i \hat{z}}{\omega \epsilon(\omega)} \sum_n \frac{j_n(\vec{k}, \omega) e^{i\omega z/v_n}}{\{k^2 + (\omega/v_n)^2 - (\omega/c)^2 \epsilon(\omega)\}} \end{aligned} \quad (3.6)$$

El comportamiento asintótico de los campos está relacionado con el signo de los términos $\lambda_n = (\omega/v_n)^2 - (\omega/c)^2 \epsilon(\omega)$; siempre que éstos sean positivos se obtienen campos no radiativos; por el contrario, si algún λ_n es negativo, es decir si $v_n > c/\sqrt{\epsilon(\omega)}$, se produce radiación de Cherenkov en el rango de frecuencias en que esto ocurre (ver por ejemplo Jackson³, sección 13.4).

Dado que consideramos velocidades no relativistas podemos aproximar $\lambda_n = (\omega/v_n)^2$, y en consecuencia no aparecerá tal radiación.

Obtenemos así para el caso no relativista

$$\vec{\Pi}(\vec{k}, z, \omega) = \frac{4\pi i \hat{z}}{\omega \epsilon(\omega)} \sum_n \frac{e^{i\omega z/v_n}}{\{k^2 + \omega^2/v_n^2\}} j_n(\vec{k}, \omega) \quad (3.7)$$

Otro tipo de campos, y con propiedades esencialmente diferentes, resultan de resolver la ecuación homogénea correspondiente a (2.12), es decir, la ecuación que se obtiene para $\vec{j}(\vec{k}, z, \omega) \equiv 0$. En efecto, proponiendo una solución de la ecuación homogénea, del tipo $\vec{\Pi}(\vec{k}, z, \omega) = \vec{A}(\vec{k}, \omega) e^{i\kappa z}$, resulta

$$\kappa^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) - k^2 \quad (3.8)$$

y el valor de $\vec{A}(\vec{k}, \omega)$ queda indeterminado. La relación (3.8) es precisamente la condición para describir la propagación de una onda electromagnética de frecuencia ω y vector de onda $\vec{q} = (\vec{k}, \kappa)$ en un medio material, es decir

$$q^2 = k^2 + \kappa^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) \quad (3.9)$$

Las soluciones de la ecuación homogénea representan pues ondas electromagnéticas libre, cuya existencia es aquí independiente de la presencia de cargas externas.

4. Cálculo de los campos para un medio semi infinito

Consideremos ahora un grupo de cargas incidiendo con velocidades v_n en dirección \hat{z} , desde un medio material con constante dieléctrica $\epsilon(\omega)$ (para $z < 0$) hacia el vacío (para $z > 0$). Calcularemos primero el vector de Hertz para una componente de corriente j_n (ver ecuación (3.2)) y luego superpondremos los campos correspondientes a todas las cargas $Z_n e$.

Las soluciones de la ecuación homogénea para el vector de Hertz son en este caso necesarias para satisfacer las condiciones de contorno en $z = 0$; en consecuencia aparecen campos de características radiativas, que darán lugar a radiación de transición.

Proponemos las siguientes expresiones para el vector de Hertz $\vec{\Pi}_n$, debido a la corriente j_n , en cada medio:

Medio 1: $\epsilon = \epsilon(\omega)$, $z < 0$

$$\Pi_n^{(1)}(\vec{k}, z, \omega) = A_n^{(1)} e^{-i\kappa_1 z} + B_n^{(1)} e^{i\omega z/v_n} \quad (4.1)$$

siendo

$$\kappa_1 = \left[\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(\omega) - k^2 \right]^{1/2} \quad (4.2)$$

$$B_n^{(1)} = \frac{4\pi i}{\omega \epsilon(\omega)} \frac{j_n(\vec{k}, \omega)}{(k^2 + \omega^2/v_n^2)} \quad (4.3)$$

Medio 2: $\epsilon = 1$, $z > 0$

$$\Pi_n^{(2)}(\vec{k}, z, \omega) = A_n^{(2)} e^{i\kappa_2 z} + B_n^{(2)} e^{i\omega z/v_n} \quad (4.4)$$

donde

$$\kappa_2 = \left[\frac{\omega^2}{c^2} - k^2 \right]^{1/2} \quad (4.5)$$

$$B_n^{(2)} = \frac{4\pi i}{\omega} \frac{j_n(\vec{k}, \omega)}{(k^2 + \omega^2/v_n^2)} \quad (4.6)$$

y en ambos medios la dirección de $\vec{\Pi}_n$ es la del versor \hat{z} . Los términos $B_n \exp(i\omega z/v_n)$ son soluciones de la ecuación (2.12) en los medios 1 y 2 (ver ecuación (3.7)), pero no satisfacen las condiciones de contorno. Los términos $A_n^{(1)} \exp(-i\kappa_1 z)$ y $A_n^{(2)} \exp(i\kappa_2 z)$ son soluciones de la ecuación homogénea en ambos medios y los coeficientes A_n se determinan de modo tal que los campos (4.1) y (4.4) verifiquen las siguientes condiciones de contorno (ver Stratton⁵⁶)

$$\left. \frac{\partial}{\partial z} \Pi_n^{(1)}(\vec{k}, z, \omega) \right|_{z=0} = \left. \frac{\partial}{\partial z} \Pi_n^{(2)}(\vec{k}, z, \omega) \right|_{z=0} \quad (4.7)$$

$$\epsilon(\omega) \Pi_n^{(1)}(\vec{k}, z, \omega) \Big|_{z=0} = \Pi_n^{(2)}(\vec{k}, z, \omega) \Big|_{z=0}$$

que son las apropiadas para el caso en que el vector de Hertz es perpendicular a la interfase.

De esta forma se obtiene:

$$A_n^{(1)} \equiv A_n^{(1)}(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi i}{v_n} \frac{j_n(\vec{k}, \omega)}{(k^2 + \omega^2/v_n^2)} \frac{(1-\epsilon)}{\epsilon(\kappa_1 + \epsilon\kappa_2)} \quad (4.8)$$

$$A_n^{(2)} \equiv A_n^{(2)}(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi i}{v_n} \frac{j_n(\vec{k}, \omega)}{(k^2 + \omega^2/v_n^2)} \frac{(1-\epsilon)}{(\kappa_1 + \epsilon\kappa_2)} \quad (4.9)$$

donde $\epsilon = \epsilon(\omega)$. De modo que si $\epsilon(\omega)$ es distinto de 1 puede haber campos de radiación, tanto en el medio material como en el vacío.

5. Campos de radiación

Para determinar los valores de los campos de radiación en la región de vacío (región 2) debemos hallar el valor asintótico de la parte radiativa del vector de Hertz, esto es

$$\vec{H}_n^{\text{rad}}(\vec{R}, \omega) = \frac{\hat{z}}{2\pi} \int d^2k e^{i(\vec{k} \cdot \vec{\rho} + \kappa_2 z)} A_n^{(2)}(\vec{k}, \omega) \quad (5.1)$$

donde $\vec{R} = (\vec{\rho}, z) = (x, y, z)$ son las coordenadas de un punto de observación distante de la superficie del material, y $A_n^{(2)}(\vec{k}, \omega)$ está dado por (4.9).

Es conveniente definir un vector de onda tridimensional

$$\vec{q} = (\vec{k}, \kappa_2) = (\vec{k}, \{(\omega/c)^2 - k^2\}^{1/2}) \quad (5.2)$$

cuyo módulo es $q = \omega/c$; la fase de la integral (5.1) puede escribirse entonces

$$f(\vec{k}) = \vec{k} \cdot \vec{\rho} + \kappa_2 z \equiv \vec{q} \cdot \vec{R} \quad (5.8)$$

Para $R \rightarrow \infty$ la fase $f(\vec{k})$ varía muy rápidamente con \vec{k} , y tiende a cancelar el valor de la integral (5.1). Asintóticamente la única contribución a la misma proviene de un entorno del punto en que la fase es estacionaria. En nuestro caso el punto de fase estacionaria corresponde, como es físicamente obvio, a que \vec{q} sea paralela a \vec{R} (y en consecuencia $\vec{k} \parallel \vec{\rho}$). Designando por θ y ϕ los ángulos esféricos (polar y azimutal) del vector \vec{R} , el valor $\vec{k} = \vec{k}_0$ para el cual la fase es estacionaria está dado por

$$k_{0x} = q \sin \theta \cos \phi \quad (5.4)$$

$$k_{0y} = q \sin \theta \sin \phi$$

Un procedimiento conveniente para calcular los campos asintóticos es desarrollar la fase hasta segundo orden⁵⁷ alrededor del punto $\vec{k} = \vec{k}_0$:

$$f(\vec{k}) = qR - \frac{1}{2} \sum_{i,j} f_{ij} \Delta k_i \Delta k_j \quad (5.5)$$

siendo $\Delta k_i = k_i - k_{0i}$, y siendo $f_{ij} = -\partial^2 f / \partial k_i \partial k_j \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0}$

Este desarrollo permite calcular el vector de Hertz en la zona radiativa como

$$\vec{H}_n^{\text{rad}}(\vec{R}, \omega) = \hat{z} \frac{e^{iqR}}{2\pi} A_n^{(2)}(\vec{k}_0, \omega) \iint d^2k \exp\left\{-\frac{i}{2} \sum f_{ij} \Delta k_i \Delta k_j\right\} \quad (5.6)$$

obteniéndose finalmente

$$\vec{H}_n^{\text{rad}}(\vec{R}, \omega) = -iqz \hat{z} \frac{e^{iqR}}{R} \cos \theta A_n^{(2)}(\vec{k}, \omega) \quad (5.7)$$

lo cual describe una onda esférica saliente, con $q = \omega/c$ como corresponde a una onda electromagnética en el vacío. Hemos reemplazado en (5.7) \vec{k}_0 por \vec{k} , lo cual no originará confusiones; el vector \vec{k} es paralelo a la superficie $z=0$, su dirección está ahora determinada por el ángulo ϕ (correspondiente al punto de observación) y su magnitud es (de acuerdo con (5.4)):

$$k = \frac{\omega}{c} \sin \theta \quad (5.8)$$

El valor de $A_n^{(2)}$ determinado por (4.9) puede ahora escribirse como:

$$A_n^{(2)}(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi i}{\omega^2} \frac{(1-\epsilon)}{(\kappa_1 + \epsilon \kappa_2)} v_n j_n(\vec{k}, \omega) \quad (5.9)$$

donde $\epsilon = \epsilon(\omega)$ y donde hemos despreciado el término k^2 en el denominador de (4.9) pues según (5.8) es $k^2 \ll \omega^2/v_n^2$.

De (4.2), (4.5) y (5.8), κ_1 y κ_2 resultan dados por

$$\begin{aligned}\kappa_1 &= \frac{\omega}{c} (\epsilon - \sin^2 \theta)^{1/2} \\ \kappa_2 &= \frac{\omega}{c} \cos \theta\end{aligned}\tag{5.10}$$

Para hallar los campos en la zona radiativa usamos las expresiones (2.7) y (2.8), que en el caso del vacío se escriben

$$\begin{aligned}\vec{H} &= -\frac{i\omega}{c} \vec{\nabla} \times \vec{\Pi} \\ \vec{E} &= \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{\Pi}) + \frac{\omega^2}{c^2} \vec{\Pi}\end{aligned}\tag{5.11}$$

En términos de los vectores esféricos $\vec{e}_R, \vec{e}_\theta, \vec{e}_\phi$ las componentes de $\vec{\nabla} \times \vec{\Pi}_n^{\text{rad}}$ resultan, en lo que a orden de magnitud respecta,

$$(\vec{\nabla} \times \vec{\Pi}_n^{\text{rad}})_R \sim (\vec{\nabla} \times \vec{\Pi}_n^{\text{rad}})_\theta \sim \frac{k\rho_n}{R} \Pi_n^{\text{rad}}\tag{5.12}$$

y dado que Π_n^{rad} varía como $1/R$, estas componentes no contribuyen a campos radiativos. Limitándonos a términos que varían como $1/R$, obtenemos para el campo magnético en la zona radiativa:

$$\vec{H}_n^{\text{rad}}(\vec{R}, \omega) = -(\omega/c)^2 \sin \theta \Pi_n^{\text{rad}}(\vec{R}, \omega) \hat{e}_\phi\tag{5.13}$$

Un análisis análogo para el caso del campo eléctrico da como resultado

$$\vec{E}_n^{\text{rad}}(\vec{R}, \omega) = -(\omega/c)^2 \sin \theta \Pi_n^{\text{rad}}(\vec{R}, \omega) \hat{e}_\theta\tag{5.14}$$

Podemos ahora superponer los campos producidos por todas las corrientes j_n ; usando (5.13), (5.14), (5.7), (5.9) y (3.3) obtenemos

$$\begin{pmatrix} \vec{H}^{\text{rad}}(\vec{R}, \omega) \\ \vec{E}^{\text{rad}}(\vec{R}, \omega) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{e}_\phi \\ \hat{e}_\theta \end{pmatrix} D(\vec{R}, \omega) \sum_n z_n v_n \exp\{-i(\vec{k} \cdot \vec{\rho}_n + \frac{\omega z_n}{v_n})\}\tag{5.15}$$

siendo

$$D(\vec{R}, \omega) = \frac{4\pi e}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\omega}{c^3} \frac{(\epsilon-1)}{(\kappa_1 + \epsilon\kappa_2)} \frac{\sin\theta \cos\theta}{R} e^{i\omega R/c} \quad (5.16)$$

con κ_1 y κ_2 dados por (5.10).

El término de la sumatoria en (5.15) incluye todas las magnitudes que tienen que ver con las cargas incidentes, mientras que el factor $(\epsilon-1)/(\kappa_1 + \epsilon\kappa_2)$ en (5.16) involucra las propiedades del medio material.

La polarización de la radiación no es afectada por los efectos de interferencia, resultando el campo eléctrico orientado en el "plano de emisión", definido por la normal a la superficie (eje \hat{z}) y la dirección de observación (versor $\hat{n} = \vec{R}/R$).

6. Radiación de transición

Con los resultados de la sección anterior podemos ahora calcular la intensidad de la radiación de transición emitida cuando un grupo de cargas atraviesa normalmente la superficie de un medio material.

El flujo de energía (por unidad de área pero integrado en el tiempo) en un punto de observación \vec{R} estará dado por:

$$\begin{aligned} \vec{S}(\vec{R}) \cdot \hat{n} &= \frac{c}{4\pi} \hat{n} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dt \vec{E}(\vec{R}, t) \times \vec{H}(\vec{R}, t) \\ &= \frac{c}{4\pi} \hat{n} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \vec{E}(\vec{R}, \omega) \times \vec{H}^*(\vec{R}, \omega) \end{aligned} \quad (6.1)$$

siendo $\hat{n} = \vec{R}/R$ el versor en la dirección de observación; la segunda igualdad resulta de hacer un análisis en frecuencias de los campos y utilizar el carácter real de $\vec{E}(\vec{R}, t)$ y de $\vec{H}(\vec{R}, t)$.

Obtenemos entonces la siguiente expresión para la intensidad de radiación emitida en un intervalo de frecuencia $d\omega$ y en un elemento de ángulo sólido $d\Omega$:

$$\frac{d^2s}{d\Omega d\omega} = \frac{c}{2\pi} R^2 \hat{n} \cdot \{ \vec{E}(\vec{R}, \omega) \times \vec{H}^*(\vec{R}, \omega) \} \quad (6.2)$$

y sustituyendo los campos dados por (5.15) y (5.16) obtenemos

$$\frac{d^2S}{d\Omega d\omega} = \frac{d^2S^0}{d\Omega d\omega} G(\vec{k}, \omega) \quad (6.3)$$

donde

$$\frac{d^2S^0}{d\Omega d\omega} = \frac{e^2 v^2}{\pi^2 c^3} \sin^2 \theta \cos^2 \theta \left| \frac{\epsilon(\omega) - 1}{\epsilon(\omega) \cos \theta + \{\epsilon(\omega) - \sin^2 \theta\}^{1/2}} \right|^2 \quad (6.4)$$

$$G(\vec{k}, \omega) = \left| \sum_n z_n (v_n/v) \exp\{-i(\vec{k} \cdot \vec{\rho}_n + \omega z_n/v_n)\} \right|^2 \quad (6.5)$$

siendo v la velocidad promedio del grupo de cargas, que hemos introducido aquí pues resultará útil para el análisis que sigue. La expresión (6.4) da la intensidad de radiación de transición correspondiente a un protón no relativista con velocidad v ⁵⁰.

El "factor de estructura" (6.5) describe los efectos de interferencia en la radiación de transición debidos al agrupamiento entre las cargas, y es independiente de las propiedades del medio.

Consideremos ahora el caso en que las velocidades individuales v_n se apartan poco del valor promedio v ; es decir $v_n = v + u_n$, con $|u_n| \ll v$ (y además $\sum_n u_n = 0$), y supongamos además que las separaciones entre las cargas del grupo sean mucho menores que la longitud de onda de la radiación emitida $\lambda = 2\pi/c = 2\pi/\omega$, de modo tal que $\vec{k} \cdot \vec{\rho}_n \ll 1$. En este caso de (6.5) obtenemos:

$$G(\vec{k}, \omega) \approx G_0(\omega) \equiv \left| \sum_n z_n \exp(i\omega z_n/v_n) \right|^2 \quad (6.6)$$

lo cual describe efectos de interferencia en la radiación de transición, independientes del ángulo de observación, y debidos a la existencia de correlaciones temporales entre los campos producidos por cada una de las cargas. Las fases en el factor de interferencia (6.6) están determinadas por los tiempos $t_n = -z_n/v_n$, que corresponden al pasaje de las cargas z_n e por la superficie $z=0$.

Estos resultados son claramente independientes de la elección que uno haga del origen del tiempo; en particular, podemos elegir

como $t=0$ el instante en que el centro geométrico del grupo de cargas pasa por la superficie, de modo que $\sum_n z_n = 0$, siendo entonces los valores de z_n del orden de las distancias relativas entre las cargas, y podemos escribir el factor de interferencia como

$$G_0(\omega) = \left| \sum_n z_n \exp(i\omega z_n/v) \right|^2 \quad (6.7)$$

despreciando términos en las fases de orden #

$$\left(\frac{u_n}{v} \right) \cdot \left(\frac{\omega z_n}{v} \right) \quad (6.8)$$

La relación (6.7) indica en forma más explícita que los efectos de interferencia dependen directamente de los valores de las coordenadas z_n en el momento en que el grupo de cargas atraviesa la superficie. Para partículas no relativistas los efectos de interferencia son importantes para separaciones relativas del orden de

$$\Delta z \sim \frac{2\pi v}{\omega} = \lambda \left(\frac{v}{c} \right)$$

es decir, pequeñas respecto de la longitud de onda λ de la radiación emitida.

Los resultados obtenidos previamente indican, en síntesis, que la intensidad de radiación de transición inducida por un grupo de cargas con velocidad $v \ll c$, y separaciones $\Delta z \ll \lambda$, es igual al producto de la intensidad correspondiente a un protón aislado, incidiendo con la misma velocidad, por un factor de interferencia $G_0(\omega)$ que es independiente de los ángulos de observación θ y ϕ , y está determinado por la estructura del grupo de cargas al atravesar la superficie. La polarización y dependencia angular de la radiación de transición es la misma que la correspondiente a un protón incidiendo aisladamente.

La extensión de los cálculos previos, para el caso de incidencia oblicua, conduce a una expresión formalmente análoga a (6.3),

El significado de estos términos es claro si escribimos (6.8) como $\omega \delta z_n / v$, donde $\delta z_n = u_n (z_n / v)$ representa incrementos en las distancias entre las cargas durante el breve tiempo $\tau \sim z_n / v$ en que el grupo de cargas atraviesa la superficie. Estos incrementos son poco importantes si las cargas se separan lentamente ($|u_n| \ll v$).

con las siguientes diferencias (ver Apéndice) : en la expresión (6.4) para $d^2S^0/d\Omega d\omega$ se debe reemplazar v por v_z (la componente de la velocidad del grupo de cargas, en la dirección normal a la superficie); la expresión (6.5) para el factor $G(\vec{k}, \omega)$ ya no es aplicable; pero si el tamaño del grupo de cargas es pequeño respecto de la longitud de onda $\lambda=2\pi c/\omega$, se obtiene para $G_0(\omega)$ una expresión similar a (6.7), con v_z en lugar de v .

7. Radiación de transición de iones moleculares en láminas sólidas

Vamos a discutir finalmente la posibilidad de observar efectos de interferencia en la emisión de radiación de transición, en el caso de iones moleculares que atraviesan láminas sólidas.

Consideraremos el caso de incidencia normal, analizando las condiciones de interferencia para la radiación de transición emitida "hacia adelante", cuando el grupo de cargas emerge de la lámina; para que el tratamiento de medio semi infinito sea apropiado es necesario que el ancho de la lámina sea mayor que la longitud de atenuación de la radiación (que suele ser del orden de la longitud de onda de la radiación, para metales en el rango de frecuencias interesantes⁵⁰). Nos restringiremos a considerar el caso más simple en que el grupo está formado por dos protones; esto presenta interés en relación con experimentos en los que se bombardea láminas sólidas con iones H_2^+ (ver referencias 15-18 y 20-26).

Durante el tránsito por la lámina los protones se distancian debido a las fuerzas repulsivas, y sus velocidades se modifican en cantidades \vec{u}_n pequeñas ($u_n \ll v$); si la separación entre los protones es chica respecto de λ los resultados de la sección previa son aplicables, y las interferencias pueden describirse en función de la diferencia de tiempos con que los protones atraviesan la superficie. Denotemos por r_0 y θ_0 la distancia entre los mismos y el ángulo entre el eje internuclear y la dirección de movimiento \hat{z} , en el momento en que los protones atraviesan dicha superficie; la orientación azimutal del vector \vec{r}_0 no es importante en este caso (que corresponde a que $\vec{k} \cdot \vec{\rho}_n \ll 1$).

Podemos considerar los siguientes casos límites:

- (a) proyectiles alineados en la dirección del movimiento: $\theta_0=0$;
- (b) proyectiles completamente desalineados: distribución isotró-

pica de orientaciones angulares.

Para estos casos simples, los correspondientes factores de interferencia se calculan en forma directa. Para el caso de protones alineados tenemos:

$$G_0(\omega) = 2 \{ 1 + \cos(\omega r_0/v) \} \quad (7.1)$$

y para protones completamente desalineados obtenemos, después de hacer un promedio angular,

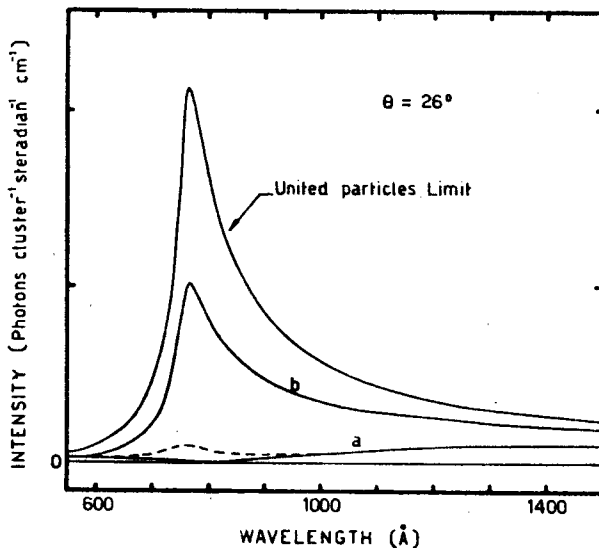
$$G_0(\omega) = 2 \left\{ 1 + \frac{\sin(\omega r_0/v)}{\omega r_0/v} \right\} \quad (7.2)$$

Es claro de (7.1) que efectos de interferencia destructiva son importantes para valores de las fases

$$\frac{\omega r_0}{v} = 2\pi \left(\frac{c}{v} \right) \cdot \left(\frac{r_0}{\lambda} \right) \sim \pi \quad (7.3)$$

Consideremos en particular el caso de una lámina de aluminio, para el cual la intensidad de radiación de transición presenta un pico conocido alrededor de los 800 \AA (es decir, próximo a la longitud de onda correspondiente a la frecuencia de plasma del Al). Para longitudes de onda cercanas a este valor la condición (7.3) se satisface si tomamos por ejemplo $v = 1.5 \times 10^9 \text{ cm/seg}$ y $r_0 = 20 \text{ \AA}$.

Usando estos valores y un modelo de Drude para $\epsilon(\omega)$, de acuerdo con datos de Hunter⁵⁸, se ha calculado



la intensidad de radiación de transición para un ángulo de observación $\theta = 26^\circ$ (esta elección particular del ángulo θ no es importante pues los efectos de interferencia son independientes de ángulo). Los resultados se muestran en la Fig.12; para comparación se incluye en la figura el resultado correspondiente al límite de partículas unidas, que equivale a tomar $G_0(\omega) = 4$.

A partir de la repulsión coulombiana entre los protones podemos estimar el ancho de la lámina requerido para obtener una separación internuclear de 20 \AA , a partir de una separación inicial de $\sim 1.3 \text{ \AA}$ y con $v = 1.5 \times 10^9 \text{ cm/seg}$. Se obtiene así un espesor $d \sim 5000 \text{ \AA}$, lo cual justifica el tratamiento de medio semi infinito.

En la práctica, los valores de r_0 están siempre afectados por una dispersión, lo cual puede incidir sobre los efectos de interferencia en cuestión; para estimar la importancia de este hecho se ha considerado una distribución gaussiana de separaciones r_0 , centrada en 20 \AA y con un ancho total de 5 \AA ⁵⁵. La intensidad de radiación que resulta de promediar $G_0(\omega)$ sobre esta distribución se muestra en Fig.12 con línea de rayas para el caso (a); mientras que para el caso (b) es poco importante ($\sim 2\%$) y no se ha representado. la corrección

El caso (a) podría tener relación con experimentos de canalización (channelling) de iones moleculares en láminas monocristalinas, lo cual da lugar a efectos de alineación importantes²¹.

El caso (b) correspondería, por ejemplo, a experimentos en que los iones moleculares inciden sobre láminas sólidas amorfas. El factor de interferencia $G_0(\omega)$ varía en tal caso entre 4 y 2, según que las fases sean $\omega r_0/v \ll \pi$ ó $\omega r_0/v \gg \pi$ respectivamente. En particular, para separaciones internucleares del orden de la longitud de onda de la radiación emitida: $r_0 \sim \lambda = 2\pi c/\omega$, resulta

$$\frac{\omega r_0}{v} \sim 2\pi \frac{c}{v} \gg \pi \quad (7.4)$$

de modo que la intensidad será la correspondiente a cargas separadas.

Estas consideraciones ilustran la posibilidad de investigar experimentalmente los efectos de interferencia en la radiación de transición producida por iones moleculares rápidos en láminas sólidas. Esta posibilidad ha sido sugerida recientemente⁵⁵, esperándose que estos efectos provean información interesante respecto al comportamiento de grupos de cargas rápidas al atravesar láminas delgadas.

Comentarios finales

El problema de la pérdida de energía de un grupo de cargas rápidas, considerado en la primera parte del trabajo, está vinculado directamente con observaciones experimentales recientes de efectos de agrupamiento en la pérdida de energía de iones moleculares en láminas sólidas delgadas. El origen de dichos efectos resulta atribuible a procesos de excitación correlacionada de los electrones de valencia del material frenante, los cuales pueden describirse convenientemente mediante un modelo de electrones libres.

Para velocidades grandes (respecto a la velocidad de Fermi) los parámetros importantes para describir los efectos de agrupamiento en la pérdida de energía resultan ser la distancia adiabática v/ω_p , correspondiente a excitaciones colectivas, y el parámetro de impacto mínimo $\hbar/2mv$, correspondiente a excitaciones individuales. Para el caso de iones moleculares, las distancias internucleares r_0 son del orden de los \AA , de modo que el parámetro de impacto mínimo $\hbar/2mv$ resulta pequeño respecto de r_0 (para velocidades grandes respecto a la velocidad de Bohr); en consecuencia, las colisiones individuales violentas no contribuyen en forma apreciable a los efectos de agrupamiento. Por el contrario, la distancia adiabática v/ω_p crece con la velocidad, pudiendo ser típicamente del orden de 10\AA . La excitación de modos colectivos (en distancias del orden de v/ω_p) es en consecuencia el aspecto dominante en los efectos de agrupamiento sobre la pérdida de energía de iones moleculares rápidos.

Para velocidades grandes, el término de interferencia I (ver ecuación (10.4)) resulta una función de $r_0\omega_p/v$. En particular, si la separación internuclear r_0 aumenta suficientemente, de modo que $r_0\omega_p/v \sim 1$, las cargas tienden a perder energía en forma independiente.

Se ha indicado en el trabajo que los procesos de excitación correlacionada de electrones de capas internas pueden dar contribuciones adicionales a la pérdida de energía de grupos de cargas rápidas. Tales procesos no son relevantes para el caso del carbono en el rango de velocidades que ha sido estudiado experimentalmente, debido a la considerable energía de unión de la capa K ($E_K=284 \text{ eV}$) pero debieran serlo para $v > 20 \text{ a.u.}$ En el caso del Al, en cambio,

la excitación correlacionada de los electrones de la capa L ($E_L=73$ eV) debiera ser observable para $v > 5$ u.a.

Para velocidades pequeñas (respecto a v_F) la respuesta de los electrones de valencia tiende a ser adiabática, no produciéndose excitación de modos colectivos. Efectos de interferencia en la pérdida de energía son sin embargo posibles debido a la excitación correlacionada de electrones cerca de la superficie de Fermi. El parámetro relevante en este caso es la longitud de onda λ_F , asociada a dichos electrones. La separación internuclear r_0 no debe ser grande respecto de λ_F para que existan efectos de agrupamiento apreciables; la observabilidad de estos efectos está pues condicionada a que las cargas puedan mantenerse próximas durante el tránsito por la lámina. Un hecho favorable en tal sentido es el fuerte apantallamiento de las fuerzas repulsivas, que ocurre cuando las cargas son lentas.

En la segunda parte del trabajo se ha descrito la radiación de transición producida por un grupo de cargas no relativistas al atravesar la superficie de un medio material. Se predicen efectos de interferencia importantes cuando la separación entre las cargas del grupo es del orden de $\lambda v/c$; tales efectos se deben a la existencia de una correlación de fases entre los campos electromagnéticos generados por cada carga, lo que también puede relacionarse con el intervalo temporal que separa el tránsito de cada carga por la superficie.

A los efectos del cálculo, no se requiere que las velocidades de las cargas sean iguales, y en consecuencia la separación entre las mismas puede variar linealmente con el tiempo. La radiación de transición está relacionada únicamente con la separación relativa de las cargas al cruzar la superficie.

Se ha descrito la radiación de transición para iones de H_2^+ al atravesar láminas de Al, en un rango de velocidades en el que la correspondiente radiación producida por protones ha sido experimentalmente observada. Dado que la radiación de transición es un fenómeno observable sobre todo el rango de frecuencias ópticas (el pico cercano a la frecuencia de plasma considerado en el trabajo es sólo un efecto particular dentro del espectro), las interferencias son en principio sensibles a separaciones internucleares en un rango amplio.

La observación de esta radiación en frecuencias ópticas permitiría pues estudiar el comportamiento de iones moleculares rápidos para distancias internucleares (o para espesores de láminas) mayores que aquellas para las cuáles los efectos de agrupamiento en la pérdida de energía son importantes.

APENDICE

Radiación de transición para incidencia oblicua

Vamos a considerar aquí el caso de una carga $Z_n e$ que incide con velocidad \vec{v}_n en el plano (x, z) , atravesando la interfase $z=0$, que separa el medio material del vacío.

La densidad de corriente para esta carga puede expresarse como:

$$\vec{j}(\vec{k}, z, \omega) = \vec{j}_n(\vec{k}, \omega) \exp(i\mu_n z) \quad (A1)$$

donde

$$\mu_n = (\omega - \vec{k} \cdot \vec{v}_n) / v_{nz} \quad (A2)$$

$$\vec{j}_n(\vec{k}, \omega) = \frac{Z_n e}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\vec{v}_n}{v_{nz}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}_n} e^{-i\mu_n z_n} \quad (A3)$$

v_{nz} es la componente z de la velocidad \vec{v}_n . Designando con $r=1,2$ el medio material ($z < 0$) y el vacío ($z > 0$) respectivamente, podemos expresar $\vec{\Pi}$ en cada medio como

$$\vec{\Pi} = \Pi_x^{(r)}(\vec{k}, z, \omega) \hat{x} + \Pi_z^{(r)}(\vec{k}, z, \omega) \hat{z} \quad (A4)$$

y proponemos en cada caso un desarrollo similar al de la sección 4, es decir:

$$\Pi_{x,z}^{(r)} = A_{x,z}^{(r)} e^{\mp i\kappa_r z} + B_{x,z}^{(r)} e^{i\mu_n z} \quad (A5)$$

siendo:

$$B_{x,z}^{(r)} = \frac{4\pi i}{\omega \epsilon_r} \frac{j_{n,x,z}(\vec{k}, \omega)}{(\mu_n^2 - \kappa_r^2)} \quad (A6)$$

con $\epsilon_1 = \epsilon$; $\epsilon_2 = 1$ y $\kappa_r = (\epsilon_r \omega^2 / c^2 - k^2)^{1/2}$.

Los coeficientes $A_{x,z}^{(r)}$ de los términos radiativos se determinan a partir de las condiciones de contorno, que para el presente caso resultan ser las siguientes:

$$\epsilon \Pi_{\mathbf{x}}^{(1)} = \Pi_{\mathbf{x}}^{(2)} \quad (\text{A7})$$

$$\epsilon \frac{\partial}{\partial z} \Pi_{\mathbf{x}}^{(1)} = \frac{\partial}{\partial z} \Pi_{\mathbf{x}}^{(2)} \quad (\text{A8})$$

$$\epsilon \Pi_{\mathbf{z}}^{(1)} = \Pi_{\mathbf{z}}^{(2)} \quad (\text{A9})$$

$$ik_{\mathbf{x}} \Pi_{\mathbf{x}}^{(1)} + \frac{\partial}{\partial z} \Pi_{\mathbf{z}}^{(1)} = ik_{\mathbf{x}} \Pi_{\mathbf{x}}^{(2)} + \frac{\partial}{\partial z} \Pi_{\mathbf{z}}^{(2)} \quad (\text{A10})$$

y nos dan el siguiente sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} \epsilon (A_{\mathbf{x}}^{(1)} + B_{\mathbf{x}}^{(1)}) &= A_{\mathbf{x}}^{(2)} + B_{\mathbf{x}}^{(2)} \\ \epsilon (-\kappa_1 A_{\mathbf{x}}^{(1)} + \mu_n B_{\mathbf{x}}^{(1)}) &= \kappa_2 A_{\mathbf{x}}^{(2)} + \mu_n B_{\mathbf{x}}^{(2)} \\ \epsilon (A_{\mathbf{z}}^{(1)} + B_{\mathbf{z}}^{(1)}) &= A_{\mathbf{z}}^{(2)} + B_{\mathbf{z}}^{(2)} \end{aligned} \quad (\text{A11})$$

$$\begin{aligned} k_{\mathbf{x}} (A_{\mathbf{x}}^{(1)} + B_{\mathbf{x}}^{(1)}) + (-\kappa_1 A_{\mathbf{z}}^{(1)} + \mu_n B_{\mathbf{z}}^{(1)}) &= \\ &= k_{\mathbf{x}} (A_{\mathbf{x}}^{(2)} + B_{\mathbf{x}}^{(2)}) + (\kappa_2 A_{\mathbf{z}}^{(2)} + \mu_n B_{\mathbf{z}}^{(2)}) \end{aligned}$$

Resolviendo estas ecuaciones, para el caso en que $v_n \ll c$, obtenemos

$$A_{\mathbf{z}}^{(2)} = \frac{(1-\epsilon)}{(\kappa_1 + \epsilon \kappa_2)} \left(\frac{4\pi i}{\omega^2} \right) v_{nz} j_{nz}(\vec{k}, \omega) \quad (\text{A12})$$

mientras que $A_{\mathbf{x}}^{(2)}$ puede despreciarse pues resulta ser de orden

$$A_{\mathbf{x}}^{(2)} \sim \left(\frac{v_n}{c} \right)^2 A_{\mathbf{z}}^{(2)} \quad (\text{A13})$$

en este caso la parte radiativa del vector de Hertz tiene la dirección del versor z , como ocurre en el caso de incidencia normal. El cálculo de los campos distantes realizado en la sección 5, a través de la integral de fase estacionaria, puede hacerse aquí en forma análoga, y superponiendo los campos debidos a las distintas cargas se puede expresar la intensidad de radiación emitida por un grupo de cargas en la forma (6.3), con el siguiente resultado:

$$\frac{d^2 S^0}{d\Omega d\omega} = \frac{e^2 v_z^2}{\pi^2 c^3} \sin^2 \theta \cos^2 \theta \left| \frac{\epsilon - 1}{\epsilon \cos \theta + \{\epsilon - \sin^2 \theta\}^{1/2}} \right|^2 \quad (\text{A14})$$

$$G(\vec{k}, \omega) = \left| \sum_n z_n \left(\frac{v_{nz}}{v_z} \right) \exp \left[-i \{ \vec{k} \cdot \vec{\rho}_n + z_n (\omega - \vec{k} \cdot \vec{v}_n) / v_{nz} \} \right] \right|^2 \quad (\text{A15})$$

donde v_z designa la componente z de la velocidad media del grupo de cargas.

Si las velocidades de las diferentes cargas difieren poco entre sí podemos aproximar $v_{nz} \approx v_z$, y si además las distancias entre las cargas del grupo son mucho menores que la longitud de onda de la radiación emitida, es decir: $k\rho_n \sim kz_n \ll 1$, el factor $G(\vec{k}, \omega)$ puede escribirse más simplemente como

$$G(\vec{k}, \omega) \approx G_0(\omega) = \left| \sum_n z_n \exp(i\omega z_n / v_z) \right|^2 \quad (\text{A16})$$

Estos resultados describen la radiación de transición para un grupo de cargas cuyas velocidades pueden tener direcciones y magnitudes distintas, siempre que las mismas sean no relativistas.

Referencias

1. Revisiones del tema de pérdida de energía por excitaciones electrónicas han sido efectuadas por: H.A.Bethe y J.Ashkin, en *Experimental Nuclear Physics* (Ed.E.Segré) vol.1, p.166 (1953); U.Fano, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* 13, 1 (1963); P.Sigmund, *Radiation Damage Processes in Materials*, Ed.C.Dupuy - Leyden - 1975.
2. N.Bohr, *Phil.Mag.*(6)25, 10 (1913); *Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.*18,n°8 (1948).
3. J.D.Jackson, *Classical Electrodynamics*, Wiley (N.Y.), 1962.
4. H.A.Bethe, *Ann.Phys.*(5) 5,325 (1930); M.Inokuti, *Rev.Mod.Phys.*43, 297(1971).
5. H.A.Bethe y R.Jackiw, *Intermediate Quantum Mechanics*, Benjamin (N.Y.) 1968.
6. N.F.Mott, *Proc.Cambridge Phil.Soc.*27, 553 (1931).
7. S.Datz, C.Erginsoy, G.Leibfried y H.Lutz, *Ann.Rev.Nucl.Sci.* 17, 129 (1967).
8. E.Fermi, *Phys.Rev.* 57, 485 (1940).
9. J.Lindhard y A.Winther, *Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.*34, n°4 (1964).
10. J.Lindhard, *Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.* 28, n°8(1954).
11. E.Bonderup, *Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.* 35, n°17 (1967).
12. E.Bonderup y P.Hvelplund, *Phys.Rev.*A4, 562 (1971).
13. R.H.Ritchie, C.J.Tung, V.E.Anderson y J.C. Ashley, *Rad. Research* 64,181(1975)
14. J.F.Ziegler y W.K.Chu, *Atomic and Nuclear Data Tables* 13, 463 (1974).
15. W.Brandt y R.H.Ritchie, *Nucl. Instrum.Methods* 132, 43 (1976).
16. R.Laubert, *Beam-Foil Spectroscopy* vol.2, 505 (1975) - Plenum (N.Y.).
17. A.D.Bacher, E.A.McClatchie, M.S.Zisman,T.A.Weaver y T.A.Tombrello, *Nucl.Phys. A* 181, 453 (1972).
18. D.S.Gemmell, J.Remillieux, J.C.Poizat, M.J.Gaillard, R.E.Holland y Z.Vager, *Phys.Rev.Lett.* 34, 1420 (1975); Z.Vager, D.S.Gemmell y B.J.Zabransky, *Phys. Rev. A* 14, 638 (1976); Z.Vager y D.S.Gemmell, *Phys.Rev.Lett.*37, 1352 (1976).
19. J.Neufeld y R.H.Ritchie, *Phys.Rev.* 98, 1632 (1955).
20. J.C.Poizat y J.Remillieux, *J.Phys.B* 5, L94 (1972).
21. T.A.Tombrello y J.M.Caywood, *Phys.Rev.*B8, 3065 (1973).
22. W.S.Bickel, *Phys.Rev.*A12, 1801 (1975).
23. M.M.Duncan y M.G.Menendez, *Phys.Rev.A* 13, 566 (1976).
24. W. Brandt, R.Ratkowsky y R.H.Ritchie, *Phys.Rev.Lett.* 33, 1325 (1974).
25. N.R.Arista y V.H.Ponce, *J.Phys.C* 8, L188 (1975).
26. J.W.Tape, W.M.Gibson, J.Remillieux, R.Laubert y H.E.Wegner, *Nucl. Instrum. Methods* 132, 75 (1976).
27. D.Pines, *Elementary Excitations in Solids* - Benjamin (N.Y.) 1964.
28. L.D.Landau y E.M.Lifshitz, *Mecánica Cuántica* - Reverté (Barcelona) 1967.

29. D.Pines y D.Bohm, Phys.Rev.85, 338 (1952), Phys.Rev.92, 609 (1953); D.Pines, Phys.Rev.92, 626 (1953).
30. Table of Integrals, Series and Products, I.S.Gradshstein y I.M.Ryzhik - Academic Press, 1965.
31. Ver por ejemplo M.G.Calkin y P.J.Nicholson, Rev.Mod.Phys.39, 361 (1967).
32. P.M.Platzman y P.A.Wolf, Solid State Physics, supplement 13, (1973).
33. J.M.Ziman, Principles of the Theory of Solids - Cambridge 1969.
34. W.A.Harrison, Solid State Theory, Mc Graw-Hill 1970.
35. K.Sawada, K.A.Brueckner, N.Fukuda y R.Brout, Phys.Rev.108, 507 (1957); R.A.Ferrell, Phys.Rev.107, 450 (1957).
36. C.Erginsoy, Brookhaven National Laboratory, Report N°B.N.L.-50083, 30 (1968).
37. C.Kittel, Introduction to Solid State Physics - Wiley 1968.
38. J.M.Elson y R.H.Ritchie, Surf.Sci.30, 178 (1972).
39. J.Daniels, C.Festenberg, H.Raether y K.Zeppenfeld, Springer Tracts in Mod. Phys. 54, 77 (1970).
40. M.C.Walske, Phys.Rev. 88, 1283 (1952); M.S.Livingston y H.A.Bethe, Rev.Mod. Phys. 9, 263 (1937).
41. L.D.Landau y E.M.Lifshitz, Mecánica - Reverté (Barc.) 1965.
42. E.A.Taft y H.R.Philipp, Phys.Rev.A 138, 197 (1965); K.D.Sevier, Low Energy Electron Spectrometry - Wiley 1972.
43. B.M.Hartley, Phys.Stat.Sol.31, 259 (1969); W.Y.Liang y S.L.Cundy, Phil.Mag. 19, 1031 (1969); R.E.Burge y D.L.Misell, Phil.Mag. 18, 251 (1968).
44. H.H.Andersen, A.F.Garfinkel, C.C.Hanke y H.Sorensen, Mat.Fys.Medd.Dan.Vid. Selsk. 35, n°4 (1966).
45. W.L.Walters, D.G.Costello, J.G.Skofronick, D.W.Palmer, W.E.Kane y R.G.Herb, Phys.Rev. 125, 2012 (1961).
46. V.L.Ginzburg y I.M.Frank, J.E.T.P. 16, 1 (1946).
47. G.Beck, Phys.Rev. 74, 795 (1948); G.M.Garibian, Sov.Phys.JETP 6, 1079 (1958); R.H.Ritchie y H.B.Eldridge, Phys.Rev. 126, 1935 (1962).
48. J.C.Ashley y R.H.Ritchie, J.App.Phys.35, 2313 (1964).
49. V.E.Pafomov, Sov.Phys.JETP 6, 829 (1958).
50. I.M.Frank, Sov.Phys.Uspekhi 8, 729 (1966).
51. M.Ter-Mikaelian, High-Energy Electromagnetic Processes, Wiley 1972.
52. J.E.Lilienfeld, Z.Physik 20, 280 (1919).
53. H.Boersch, C.Radeloff y G.Saubrey, Phys.Rev.Lett. 7, 52 (1961).
54. P.Goldsmith y J.V.Jelley, Phil.Mag. 4, 836 (1959).
55. N.R.Arista y T.E.Huber, Phys.Rev.Lett. 36, 200 (1976).
56. J.A.Stratton, Electromagnetic Theory - McGraw-Hill 1941.
57. H.Bremmer, Handbuch der Physik XVI, p. 423 (1958).
58. W.R.Hunter, J.Opt.Soc.Am. 54, 208 (1964).

UNIDADES ATOMICAS

$$1 \text{ u.a. de energía} = m e^4 / \hbar^2 = 27.2 \text{ eV}$$

$$1 \text{ u.a. de longitud} = \hbar^2 / m e^2 = 0.529 \text{ \AA}$$

$$1 \text{ u.a. de velocidad} = e^2 / \hbar = 2.18 \times 10^8 \text{ cm/seg}$$

$$1 \text{ u.a. de tiempo} = \hbar^3 / m e^4 = 2.42 \times 10^{-17} \text{ seg}$$

Este sistema corresponde a tomar $e = \hbar = m = 1$.

La velocidad de la luz vale $c = 137 \text{ u.a.}$

Expresando la velocidad v en unidades atómicas, la energía de un ión de peso atómico M , en unidades de KeV, está dada por:

$$E(\text{KeV}) = 25 M v^2,$$

y la energía de un electrón en eV es:

$$E(\text{eV}) = 13.6 v^2$$

