

EFECTOS DE ENLACES QUIMICOS EN LA SECCION DE FRENAMIENTO
DE IONES PESADOS A BAJAS ENERGIAS.

TESIS QUE PRESENTA:

REMIGIO CABRERA TRUJILLO

PARA LA OBTENCION DEL GRADO DE
MAESTRO EN FISICA

JUNIO, 1994

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA - IZTAPALAPA
DIVISION DE CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA
DEPARTAMENTO DE FISICA

DEDICADA A MI MADRE
Y A LA VENERABLE MEMORIA
DE MI HERMANO MIGUEL CABRERA TRUJILLO
(1976-1993+).

AGRADECIMIENTOS

Agradezco al Dr. Salvador A. Cruz Jiménez el apoyo, disponibilidad y las valiosas enseñanzas que siempre me ha proporcionado en mi desarrollo profesional y en especial en la estructuración de esta tesis.

Quiero agradecer también a los doctores Eleuterio Castaño Tostado y Jacques Soullard Saintrais por sus valiosos comentarios y por haber aceptado gentilmente formar parte del jurado para la presentación de este trabajo.

Deseo agradecer a la Srita. Luz María Díaz Rivera por el apoyo que me brindó durante la realización de este trabajo.

Agradezco al CONACyT el apoyo económico prestado para el desarrollo de esta tesis a través de la beca crédito (Registro 81588).

De manera muy especial agradezco a la Srita. Gabriela Villagrán Valencia por su valiosa asistencia en la edición de este trabajo.

Finalmente agradezco al Departamento de Física de la Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa las facilidades brindadas durante la realización de esta tesis.

INDICE

Introducción.....	1
Capítulo I.- Conceptos Fundamentales.....	5
1.1.- Introducción.....	5
1.2.- Teoría Clásica de la Dispersión.....	6
1.3.- El Concepto de Sección Eficaz.....	19
1.4.- Límite de Aplicabilidad de la Mecánica Clásica.....	23
1.5.- Sección de Frenamiento.....	26
Capítulo II.- Teorías Asociadas al Poder de Frenamiento.....	31
2.1.- Introducción.....	31
2.2.- Modelos Teóricos en la Región de Altas Energías.....	33
2.2.1.- Modelo de Bohr.....	33
2.2.2.- Modelo de Bethe.....	42
2.3.- Región de Energías Intermedias.....	57
2.3.1.- Estado de Carga del Proyectoil.....	58
2.4.- Región de Bajas Energías.....	65
2.4.1.- Modelo de Fermi-Teller.....	66
2.4.2.- Modelo de Lindhard.....	69
2.4.3.- Modelo de Firsov.....	72
2.4.3.a.- Modificación de Cheshire.....	77
2.4.3.b.- Modificación de Brice.....	79
2.4.3.c.- Interpretación Geométrica de la Modificación de Brice.....	81
Capítulo III.- Efectos Moleculares en la Sección de Frenamiento de Iones de Baja Energía.....	83
3.1.- Introducción.....	83
3.2.- Adaptación del Modelo de Firsov a Blancos Moleculares.....	84

3.3.- Representación FSGO de Orbitales Moleculares	
Localizados.....	89
3.4.- Efectos de Enlaces Químicos en la Sección de	
Frenamiento de Protones a Bajas Velocidades....	92
3.5.- Sección de Frenamiento para Iones Pesados	
a Bajas Energías.....	99
3.5.1.- Método de Cálculo.....	100
3.6.- Aplicación a Hidrocarburos.....	107
3.7.- Aplicación a Otras Moléculas.....	112
Capítulo IV.- Conclusiones Generales.....	114
Apéndice A	117
Apéndice B	123
Apéndice C	127
Apéndice D	132
Apéndice E	134
Referencias	136

INTRODUCCION

El problema de la penetración de iones en materia ha sido motivo de estudio durante varias décadas y ha atraído la atención de varios físicos notables. En 1915 N. Bohr propuso el primer modelo para analizar la pérdida de energía de un proyectil conforme penetra en un blanco basándose en ideas puramente clásicas de mecánica y electromagnetismo. En él trata la colisión como una excitación de osciladores armónicamente cargados (electrones del medio) debido al campo eléctrico del proyectil. Posteriormente, en 1930, H. Bethe dió el primer tratamiento cuántico del problema utilizando teoría de perturbaciones en la interacción proyectil-blanco y la primera aproximación de Born, válida para la región de altas energías. La idea fundamental detrás del tratamiento de Bethe es el uso de transferencia de ímpetu del proyectil a los electrones del blanco como el factor dinámico en el proceso de la pérdida de energía. Bloch en 1933, al revisar la teoría de Bethe, agregó un término de corrección debido a la contribución de las capas internas de los átomos del blanco. Posteriormente E. Fermi, E. Teller entre otros dedicaron parte de su esfuerzo al estudio de la pérdida de energía de partículas cargadas en materia moviéndose con menores energías. Desde estos inicios hasta la fecha se ha visto la necesidad de generar modelos que incorporen, a varios niveles de aproximación, tanto las características del proyectil como las del blanco. Esto se debe a que cuando penetra un ion en un medio material, existen una gran variedad de procesos físicos tales como ionización, excitación, producción de rayos X, etc.. Dado que este es un problema de muchos cuerpos, resulta difícil entender completamente los mecanismos que participan en el frenamiento de un proyectil conforme cambia la velocidad de éste. Por lo que se han desarrollado una gran cantidad de esfuerzos de carácter tanto empírico como semi-empírico para generar una ecuación válida para todas las velocidades y combinaciones proyectil-blanco. Generalmente, se han empleado ecuaciones paramétricas con

cantidades ajustables al experimento, e inclusive tabulaciones extensas en donde se presentan las curvas que mejor ajustan los datos experimentales.

Aparte de la inquietud de carácter básico que tiene el estudio de la pérdida de energía de iones al penetrar la materia, existe interés en las aplicaciones tecnológicas, tal como es el caso de la implantación de iones por bombardeo, que resulta ser útil en situaciones de protección por radiación y tratamiento médico por radioterapia, por mencionar tan solo algunos ejemplos. Otra aplicación de importancia para la industria metalúrgica, es la incorporación de materiales en dosis y profundidades apropiadas con el objeto de incrementar la dureza y resistencia a la corrosión de superficies metálicas. Por otra parte, en la industria electrónica, la incorporación de impurezas donadoras y aceptoras puede llevarse a cabo con control absoluto de concentraciones tanto en uniformidad como en profundidad; además, es así posible limpiar una superficie removiendo capas atómicas por bombardeo, o bien alterar la topología superficial para crear patrones útiles en microcircuitos o en catálisis.

En general, existe un gran número de aplicaciones utilizando haces de iones para la modificación de materiales. Esto nos lleva naturalmente a estudiar con precisión los mecanismos mediante los cuales un ion pierde energía al penetrar en un material dado.

El desarrollo reciente de técnicas experimentales altamente sofisticadas y precisas ha puesto de manifiesto la importancia de conocer con detalle los mecanismos a través de los cuales un ion pierde energía al interaccionar con el blanco. En particular, a partir de información experimental se sabe que tanto el estado de agregación como la estructura molecular del blanco juegan un papel muy importante en la manera en que el proyectil deposita su energía en el material bombardeado.

En este trabajo se presentan resultados originales y novedosos que se han desarrollado en relación con los efectos

moleculares en la pérdida de energía de iones cuando estos últimos penetran materiales compuestos. En particular se estudia el efecto de los enlaces químicos en estos procesos, ya que su efecto es predominante en la región de velocidades ligeramente menores que la velocidad de Bohr (ésta velocidad es con la que orbita un electrón en el primer nivel de un átomo de Hidrógeno). Para dar un carácter autocontenido a la tesis, se ha decidido incorporar los aspectos básicos de la teoría de colisiones, así como una revisión de los principales modelos teóricos desarrollados para la pérdida de energía del proyectil.

En el capítulo I se presenta la teoría clásica de colisiones en la cual se darán los conceptos fundamentales de la pérdida de energía, parámetro de impacto, ángulo de dispersión, sección de frenamiento, entre otros, asociados al entendimiento del problema desde un punto de vista clásico. En el capítulo II se discuten las teorías asociadas a la pérdida de energía en dos órdenes: en orden cronológico y de acuerdo a la región de validez. Comenzando con el primer modelo propuesto por Bohr en base a puras ideas clásicas. A continuación se presenta el modelo propuesto por Bethe con el mayor detalle posible, por ser de los primeros tratamientos cuánticos formales que aún posee vigencia actual. Posteriormente se discute brevemente el concepto de carga efectiva del proyectil el cual es útil en el tratamiento de iones pesados. Como el tema principal de este trabajo se centra en la región de velocidades del proyectil menores a la velocidad de Bohr; los modelos existentes para este orden de velocidades se analizan con cierto detalle, principalmente el modelo de Firsov y sus modificaciones debido a que considera la estructura tanto del proyectil como la del blanco, lo cual será útil para el tratamiento posterior que se presenta del caso molecular. El capítulo III constituye la parte central del trabajo, en donde se presentan nuestros avances en el estudio de efectos de enlaces químicos sobre la pérdida de energía del proyectil a bajas velocidades. En este capítulo se incorporan los orbitales gaussianos esféricos flotantes (FSGO) que son la base del tratamiento utilizado en este trabajo para los enlaces químicos. El análisis comienza con una breve descripción de los orbitales

FSGO y su formulación en grupos funcionales característicos de la molécula. Posteriormente se les incorpora en el cálculo de la sección de frenamiento para protones como proyectiles y posteriormente se extiende el tratamiento a iones pesados. Cabe mencionar que los resultados correspondientes a iones pesados son los primeros desarrollados en su tipo en este rango de velocidades. En el capítulo IV se presentan las conclusiones generales y se discuten los aspectos bajo estudio actual y futuro. Finalmente los cálculos complementarios se incorporan en la sección de Apéndices.

CAPITULO I

CONCEPTOS FUNDAMENTALES

1.1 Introducción.

En este capítulo daremos los conceptos necesarios para introducir al lector en el problema de la pérdida de energía de iones penetrando la materia. El capítulo esta dividido en cinco secciones, tratando de mostrar en cada una de ellas los elementos necesarios que intervienen en el proceso de dispersión.

Para analizar el problema de la penetración de iones en la materia, supongamos que se hace incidir un haz monoenergético de iones (proyectiles) sobre un material dado (blanco). Cada proyectil sufrirá una sucesión de colisiones con átomos del blanco conforme penetra en el material, perdiendo energía en cada una de ellas, hasta termalizarse dentro del blanco a una profundidad $\langle x \rangle$ - si el blanco es lo suficientemente grueso.

Dependiendo de la energía del haz incidente y de las características del blanco, habrá electrones secundarios producidos por la ionización directa por impacto, rayos X característicos producidos por promoción electrónica de capas internas, átomos expulsados del material, etc.. Como una primera aproximación podemos considerar las colisiones entre partículas incidentes y átomos del blanco como una secuencia de eventos binarios en base al siguiente argumento heurístico. Los iones al ir penetrando el material tenderán a capturar y perder electrones, llegando a ser neutralizados conforme su velocidad decrece. Por lo tanto, el potencial de interacción entre proyectil y blanco será una función que decrece rápidamente como función de la separación internuclear. Es razonable suponer que en las sucesivas colisiones del proyectil, éste interaccionará más fuertemente con sus vecinos más cercanos. Ahora, si el proyectil tiene velocidades altas, el tiempo de interacción entre proyectil y blanco es muy corto como para tomar en cuenta

cualquier correlación inducida por el movimiento de los átomos del blanco antes y después de la colisión y en consecuencia la interacción solo será con el vecino más cercano, considerandosele a esto como una interacción binaria.

Durante la colisión de 2 partículas, si solo cambia el estado de movimiento de ellas sin alterar su energía interna, hablamos de colisiones elásticas, por el contrario, si cambia la energía interna -como ocurre en las capas electrónicas de los átomos- hablamos de colisiones inelásticas.

Al hablar de un cambio en el estado de movimiento del proyectil, nos referimos a que habrá una dispersión de éste, esta dispersión nos indicará qué tanta energía ha perdido el proyectil.

1.2 Teoría clásica de la dispersión [1-3].

Veamos qué sucede cuantitativamente en una colisión binaria desde el punto de vista de la Mecánica Clásica.

Consideremos un proyectil de masa M_p incidiendo sobre un blanco de masa M_b (figura 1.1):

En el sistema de laboratorio L, la posición del proyectil y del blanco es r_p y r_b respectivamente, como este es un problema de 2 cuerpos podemos simplificar el algebra, si utilizamos el sistema del centro de masa, CM, en el cual:

$$r_p = R^{cm} + r_p^{cm} \quad (1.1)$$

$$r_b = R^{cm} + r_b^{cm}$$

donde r_p^{cm} y r_b^{cm} son los vectores de posición del proyectil y blanco respectivamente pero medidos desde el centro de masa. La posición del centro de masa respecto al sistema del laboratorio es:

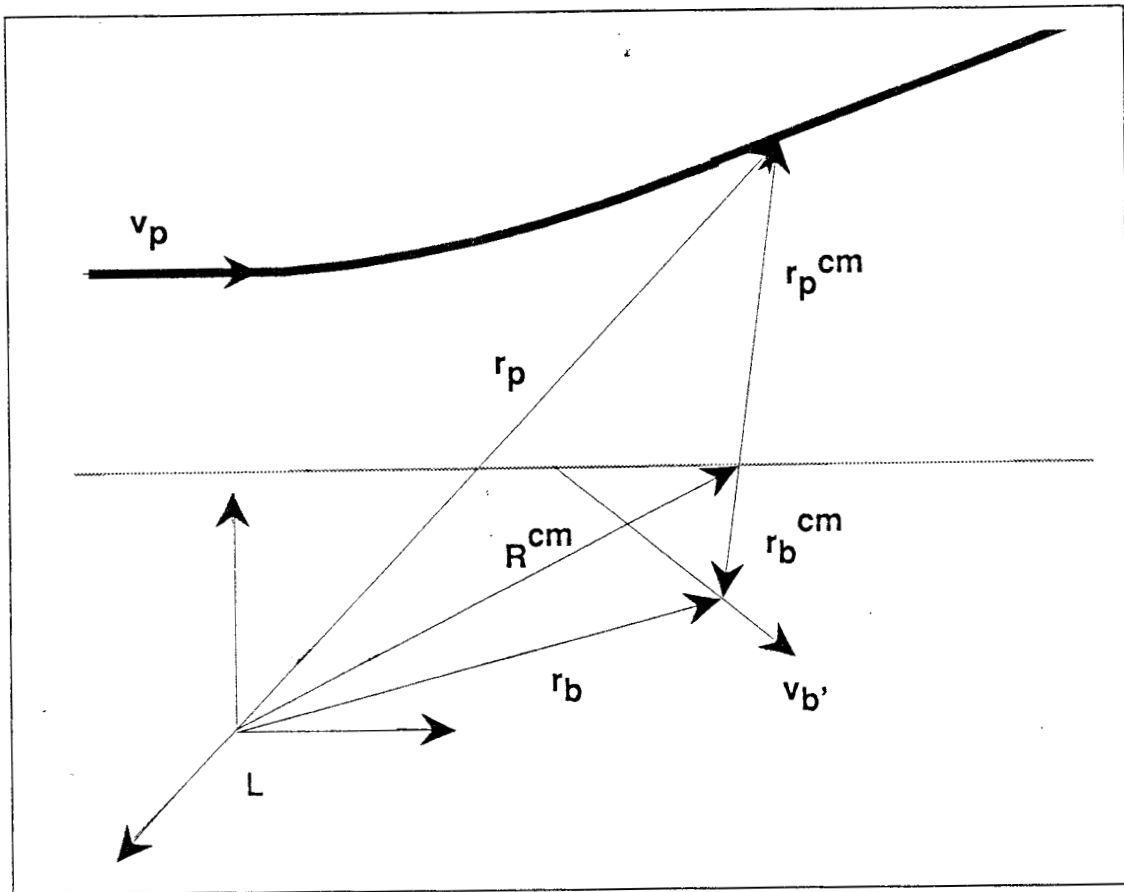


Figura 1.1 Trayectoria del proyectil y blanco en un proceso de dispersión visto desde el sistema del laboratorio L. \mathbf{v}_p representa la velocidad del proyectil, \mathbf{R}^{cm} es el vector posición del centro de masa, \mathbf{r}_p y \mathbf{r}_b representan los vectores de posición del proyectil y blanco respectivamente en el sistema L y los etiquetados con cm representan los correspondientes vectores pero en el centro de masa.

$$\mathbf{R}^{cm} = \frac{M_p \mathbf{r}_p + M_b \mathbf{r}_b}{M_p + M_b} . \quad (1.2)$$

Sustituyendo esta expresión en (1.1) y usando el vector de posición relativo que va del proyectil al blanco

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_b - \mathbf{r}_p \quad (1.3)$$

tenemos:

$$\mathbf{r}_p^{cm} = \frac{-M_b}{M_p + M_b} \mathbf{r} \quad (1.4)$$

$$\mathbf{r}_b^{cm} = \frac{M_p}{M_p + M_b} \mathbf{r}$$

de aquí, las velocidades de proyectil y blanco respecto al centro de masa resultan:

$$\mathbf{v}_p^{cm} = \frac{-M_b}{M_p + M_b} \mathbf{v}_{rel} \quad (1.5)$$

$$\mathbf{v}_b^{cm} = \frac{M_p}{M_p + M_b} \mathbf{v}_{rel}$$

y restando éstas ecuaciones tenemos:

$$\mathbf{v}_{rel} = \mathbf{v}_b^{cm} - \mathbf{v}_p^{cm} ,$$

que es la velocidad relativa medida por un observador en el centro de masa. Notese que derivando la ecuación (1.3) respecto al tiempo tenemos:

$$\mathbf{v}_{rel} = \mathbf{v}_b - \mathbf{v}_p ,$$

de lo cual en ambos sistemas se mide la misma velocidad relativa como era de esperarse.

El momento lineal total en el centro de masa es [usando (1.5)]

$$\mathbf{p}_T = M_p \mathbf{v}_p^{cm} + M_b \mathbf{v}_b^{cm} = 0$$

por lo tanto:

$$M_p \mathbf{v}_p^{cm} = - M_b \mathbf{v}_b^{cm} \quad (1.6)$$

esto se debe cumplir antes y después de la colisión por conservación de momento lineal.

Si inicialmente el blanco M_b está en reposo respecto al sistema L y el proyectil incide con una velocidad \mathbf{v}_0 , entonces, la velocidad del centro de masa antes de la colisión es [de la ecuación (1.2)]:

$$\mathbf{v}^{cm} = \frac{M_p}{M_p + M_b} \mathbf{v}_0 \quad (1.7)$$

y es constante durante toda la colisión por conservación del momento. Así, las velocidades relativas al centro de masa para antes y después de la colisión, resultan ser (ecuación 1.1):

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{p'/0}^{cm} &= \mathbf{v}_0 - \mathbf{v}^{cm} \\ \mathbf{v}_{b'/0}^{cm} &= \mathbf{v}^{cm} \\ \mathbf{v}_{p'}^{cm} &= \mathbf{v}_{p'} - \mathbf{v}^{cm} \\ \mathbf{v}_{b'}^{cm} &= \mathbf{v}_{b'} - \mathbf{v}^{cm} \end{aligned} \quad (1.8)$$

donde $\mathbf{v}_{p'/0}^{cm}$, $\mathbf{v}_{b'/0}^{cm}$, $\mathbf{v}_{p'}^{cm}$, y $\mathbf{v}_{b'}^{cm}$ son las velocidades relativas del proyectil y blanco antes y después de la colisión medidas respecto al centro de masa.

Como no estamos considerando por el momento la estructura interna del proyectil y blanco, podemos suponer que la colisión es elástica. Entonces por conservación de energía y momento lineal se satisface que:

$$\frac{1}{2} M_p \left(\mathbf{v}_{p'/0}^{cm} \right)^2 + \frac{1}{2} M_b \left(\mathbf{v}_{b'/0}^{cm} \right)^2 = \frac{1}{2} M_p \left(\mathbf{v}_{p'}^{cm} \right)^2 + \frac{1}{2} M_b \left(\mathbf{v}_{b'}^{cm} \right)^2$$

y

$$M_p \mathbf{v}_{p',0}^{cm} + M_b \mathbf{v}_{b',0}^{cm} = M_p \mathbf{v}_{p'}^{cm} + M_b \mathbf{v}_{b'}^{cm} .$$

Haciendo uso de estas dos ultimas ecuaciones y de las ecuaciones (1.8) encontramos que despues de la colisión las velocidades del proyectil y del blanco satisfacen:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{p'}^{cm} &= \mathbf{v}_0 - \mathbf{v}^{cm} \\ \mathbf{v}_{b'}^{cm} &= \mathbf{v}^{cm} \end{aligned} \quad (1.9)$$

i.e. los valores absolutos de las velocidades de las 2 partículas antes y después de la colisión permanecen inalterados, por lo tanto en el sistema CM sólo ocurre una rotación de los vectores velocidad.

Con la ayuda de la ecuación (1.8) y la figura (1.2), poniendo el centro de masa en el origen de un sistema cartesiano cuyo eje x esta en la dirección de \mathbf{v}^{cm} las velocidades \mathbf{v}_p y \mathbf{v}_b de las partículas en el sistema de laboratorio se obtienen fácilmente. Las velocidades $\mathbf{v}_0 - \mathbf{v}^{cm}$ y \mathbf{v}^{cm} [ver ecuación (1.8) y (1.9)] representan las velocidades respecto al centro de masa antes de la colisión. Las correspondientes velocidades después de la colisión se obtienen a través de una rotación de los vectores velocidad originales a través de un ángulo de dispersión ϑ_{cm} (en el sistema del centro de masa).

De la ecuación (1.8), para el proyectil, multiplicando escalarmente por el vector unitario $\hat{\mathbf{v}}^{cm}$ tenemos que.

$$\mathbf{v}_{p'}^{cm} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{cm} = \mathbf{v}_{p'} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{cm} - \mathbf{v}^{cm} \cdot \hat{\mathbf{v}}^{cm}$$

lo que en componentes paralela y perpendicular a \mathbf{v}_0 , respectivamente, es equivalente a:

$$v_{p'}^{cm} \cos \vartheta_{cm} = v_{p'} \cos \vartheta_L - v^{cm}$$

y

$$v_{p'}^{cm} \sin \vartheta_{cm} = v_{p'} \sin \vartheta_L$$

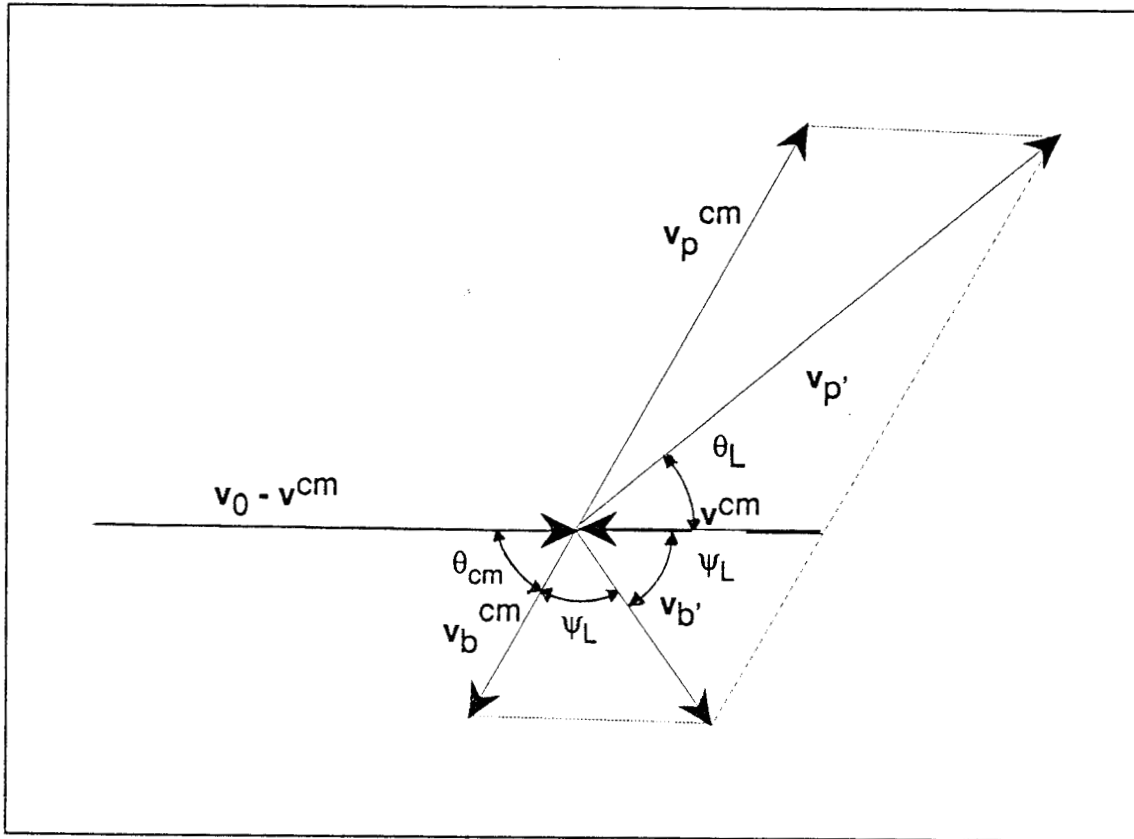


Figura 1.2 Representación esquemática del proceso de la dispersión como es visto en el sistema de laboratorio L y el sistema del centro de masa CM para antes y después de la colisión (ver texto).

en donde ϑ_{cm} es el ángulo de dispersión en el sistema del centro de masa CM y ϑ_L el ángulo de dispersión en el sistema de laboratorio L. Dividiendo ambas ecuaciones obtenemos:

$$\operatorname{tg} \vartheta_L = \frac{v_p^{cm} \operatorname{sen} \vartheta_{cm}}{v^{cm} + v_p^{cm} \cos \vartheta_{cm}}$$

pero usando (1.7) y (1.9)

$$\operatorname{tg} \vartheta_L = \frac{M_b \operatorname{sen} \vartheta_{cm}}{M_p + M_b \cos \vartheta_{cm}} \quad (1.10)$$

que es la regla de transformación entre los ángulos de dispersión del sistema CM al sistema L. De la figura (1.2) vemos que:

$$2 \psi_L + \vartheta_{cm} = \pi ,$$

por lo tanto,

$$\psi_L = \frac{\pi}{2} - \frac{\vartheta_{cm}}{2} \quad (1.11)$$

es la relación entre el ángulo de dispersión ϑ_{cm} del proyectil en el sistema CM con el ángulo de dispersión del blanco en el sistema L. Así, midiendo en el sistema L a la dispersión del proyectil ϑ_L se puede determinar el ángulo de dispersión ϑ_{cm} en el sistema CM [ecuación (1.10)] y de ahí conocer el correspondiente al blanco ψ_L en el sistema L.

De la figura (1.2) se ve que para todos los casos el ángulo de dispersión del proyectil ϑ_L es menor en L que el ángulo de dispersión ϑ_{cm} del proyectil, pero en CM. Así para pequeños ángulos de dispersión del proyectil en CM.

$$\psi_L \approx \frac{\pi}{2}$$

(el blanco se dispersa perpendicular a la trayectoria del

proyector en el sistema L). Haciendo la misma suposición en (1.10) encontramos que

$$\vartheta_L \approx \frac{M_b}{M_p + M_b} \vartheta_{cm}$$

por lo que, para proyectiles ligeros, $M_p \ll M_b$, es claro que

$$\vartheta_L \approx \vartheta_{cm} .$$

Esto es de esperarse ya que si el blanco está inicialmente en reposo, y después de la dispersión permanece en reposo, entonces coinciden el tratamiento en el sistema del centro de masa con el tratamiento en el sistema del laboratorio.

En una colisión del tipo descrito hasta ahora, estamos interesados en calcular la transferencia de energía al blanco, i.e, la pérdida de energía del proyectil. Si inicialmente el blanco está en reposo y después de la colisión adquiere la velocidad v_b , en el sistema de laboratorio, entonces, la energía ganada por el blanco es:

$$T = \frac{1}{2} M_b v_b^2 . \quad (1.12)$$

Ahora, de la ecuación (1.8) tenemos que

$$\begin{aligned} (v_{b'})^2 &= \left(v_{b'}^{cm} + v^{cm} \right)^2 \\ &= (v_{b'}^{cm})^2 + (v^{cm})^2 + 2 v_{b'}^{cm} v^{cm} \cos(2\psi_L) \end{aligned}$$

Utilizando (1.9) y (1.11) con ayuda de las relaciones trigonométricas $(1 + \cos 2\psi) = 2 \cos^2 \psi$ y $\cos(\pi/2 - \vartheta_{cm}/2) = \sin(\vartheta_{cm}/2)$ obtenemos:

$$v_{b'}^2 = 4 (v^{cm})^2 \sin^2 \left(\frac{\vartheta_{cm}}{2} \right)$$

con lo cual la energía perdida por el proyectil es [de (1.12)]:

$$T = \frac{1}{2} M_b 4 (v^{cm})^2 \text{sen}^2 \left(\frac{\vartheta^{cm}}{2} \right);$$

que con la ayuda de la ecuación, (1.7) podemos escribir en términos de la velocidad inicial del proyectil en el sistema L:

$$T = \frac{1}{2} M_b 4 \left(\frac{M_p}{M_b + M_p} \right)^2 v_0^2 \text{sen}^2 \left(\frac{\vartheta^{cm}}{2} \right)$$

o

$$T = 4 \frac{M_b M_p}{(M_b + M_p)^2} E_0 \text{sen}^2 \frac{\vartheta^{cm}}{2} \quad (1.13)$$

donde E_0 es la energía cinética inicial del proyectil en el sistema L. Como vemos, la energía toma una forma muy simple en términos del ángulo de dispersión en el sistema del centro de masa y la velocidad inicial del proyectil en L. Este resultado es completamente general pues sólo involucra conservación de energía y momento lineal y es independiente del tipo de interacción. El tipo de interacción es lo que nos va a determinar el ángulo de dispersión ϑ_{cm} en el sistema del centro de masa. Esto nos lo dará la dinámica de la colisión.

El ángulo de dispersión ϑ_{cm} puede evaluarse suponiendo que la interacción entre el proyectil y el blanco es de carácter central. Para esto, construyamos la Lagrangiana de nuestro sistema desde el sistema del centro de masa. En este caso, la energía cinética en el sistema del centro de masa es:

$$T = \frac{1}{2} M_p (v_p^{cm})^2 + \frac{1}{2} M_b (v_b^{cm})^2, \quad (1.14)$$

pero de la ecuación (1.5) esta expresión en términos de la velocidad relativa resulta :

$$T = \frac{1}{2} \mu v_{rel}^2 \quad (1.15)$$

donde $\mu = \frac{M_p M_b}{M_p + M_b}$ es la masa reducida del sistema. Por lo tanto, la Lagrangiana para el movimiento relativo es:

$$L = \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 - V(r)$$

donde r es el vector de posición relativo y \dot{r} es el cambio de r respecto al tiempo; $V(r)$ es el potencial de interacción. El momento angular asociado al movimiento relativo de las partículas que coliden es:

$$L_r = r \times \mu \dot{r}$$

El haber tratado el problema en el sistema del centro de masa lo reduce al problema equivalente de una partícula de masa μ que se mueve en el campo de fuerza $F = -\nabla V(r)$ de otra partícula, pero ahora fija en el origen. Dado que la fuerza de interacción se considera de carácter central, el momento angular se conserva *i.e.*

$$\frac{d}{dt} L_r = 0$$

y el proyectil describe una trayectoria en un plano perpendicular a L_r . Como L_r se conserva, este plano es invariable.

De acuerdo a lo anterior como el movimiento es en 2 dimensiones es conveniente introducir coordenadas polares ρ y ϕ ; con ϕ el ángulo que forma el vector relativo ρ con la dirección original del proyectil. Así, la Lagrangiana correspondiente resulta:

$$L = \frac{1}{2} \mu (\dot{\rho}^2 + \rho^2 \dot{\phi}^2) - V(\rho). \quad (1.16)$$

Sustituyendo en las ecuaciones de Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\rho}} - \frac{\partial L}{\partial \rho} = 0$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}} - \frac{\partial L}{\partial \phi} = 0$$

encontramos las ecuaciones de movimiento, para ρ y ϕ

$$\mu \ddot{\rho} - \mu \rho \dot{\phi}^2 = - \frac{\partial V(\rho)}{\partial \rho} \quad (1.17)$$

$$\frac{d}{dt} (\mu \rho^2 \dot{\phi}) = 0 \quad (1.18)$$

La primera ecuación (1.17) es la que contiene la información dinámica de la interacción, mientras que la segunda corresponde a la conservación del momento angular. En el caso que nos ocupa, consideraremos la interacción vía un potencial repulsivo debido a que en general el proyectil se aproximará lo suficiente al átomo blanco, de tal suerte que siente una fuerte barrera repulsiva debido a las cargas nucleares apantalladas. Para un potencial puramente repulsivo la figura (1.3) muestra una posible trayectoria de dispersión, en donde una de las partículas, el blanco, esta colocada inicialmente en el origen. El proyectil incide con una velocidad inicial $|\dot{\rho}|=v_0$ paralela al eje x y un *parámetro de impacto* b, donde b es la distancia entre la línea inicial de movimiento del proyectil y la línea paralela a esta, pero que pasa por el dispersor (blanco). Debido a la interacción con el blanco, el proyectil se dispersará un ángulo ϑ_{cm} como se muestra en la figura (1.3).

El momento angular inicial es $L_{r,0} = |\vec{\rho}_0 \times \mu \mathbf{v}_0|$ donde ρ_0 es la distancia entre proyectil y blanco antes de la colisión. Por lo tanto, por conservación del momento angular (ecuación 1.18) tenemos que:

$$L_{r,0} = L_r$$

$$|\vec{\rho}_0 \times \mu \mathbf{v}_0| = \mu \rho^2 \dot{\phi}$$

o

$$\rho_0 v_0 \sin \alpha = \rho^2 \dot{\phi}$$

donde α es el ángulo entre \mathbf{v}_0 y $\vec{\rho}_0$. De la definición de *parámetro de impacto*,

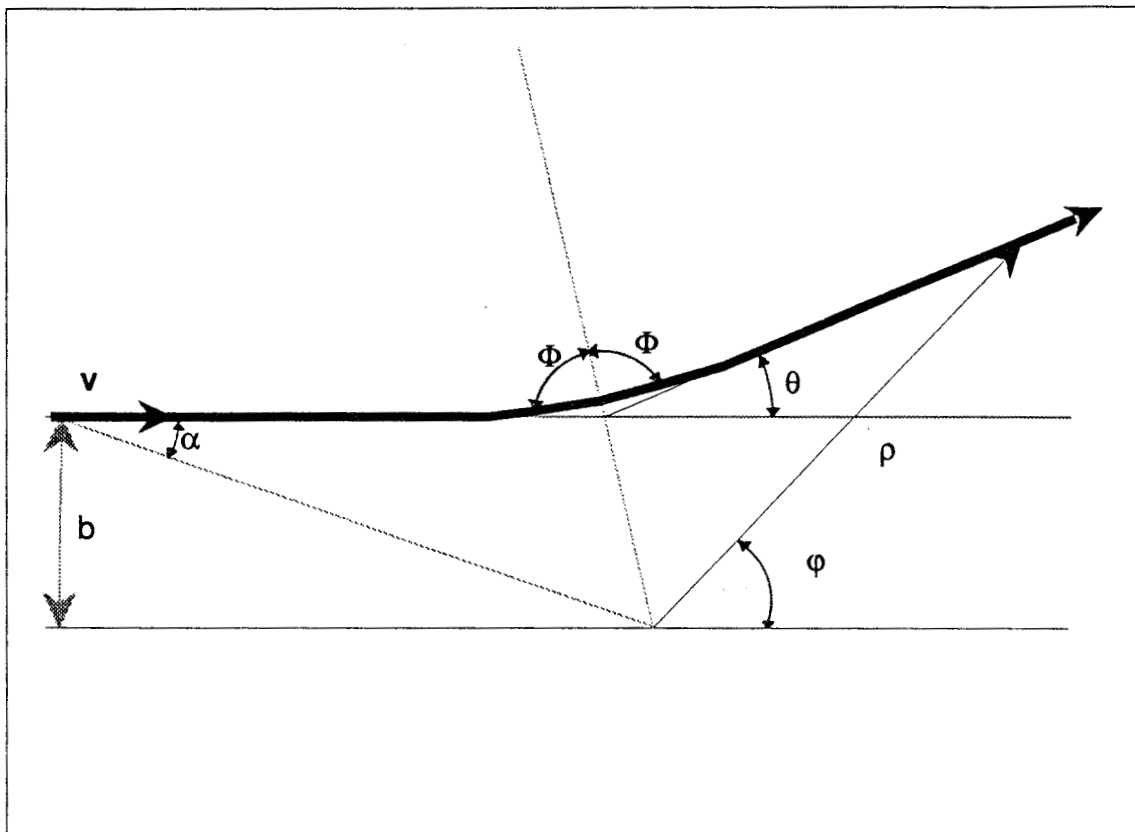


Figura 1.3 Representación esquemática del proceso de la dispersión como es visto en el sistema del centro de masa CM (sistema relativo) para determinar el ángulo de dispersión ϑ_{cm} para un proyectil que incide con un parámetro de impacto b y una velocidad v . ρ y φ son las coordenadas polares de la posición del proyectil (ver texto).

$$\rho_0 \text{ sen } \alpha = b ,$$

por lo que

$$\dot{\phi} = \frac{b v_0}{\rho^2} \quad (1.19)$$

y al sustituir en la ecuación (1.17) llegamos a que

$$\mu \ddot{\rho} - \mu \frac{b^2 v_0^2}{\rho^3} = - \frac{\partial V(r)}{\partial \rho}$$

que es equivalente a:

$$\mu \ddot{\rho} = - \frac{d}{d\rho} \left[V(\rho) + \frac{1}{2} \mu v_0^2 \left(\frac{b^2}{\rho^2} \right) \right] , \quad (1.20)$$

la cual es la ecuación de movimiento para ρ . Para resolverla multiplicamos por $\dot{\rho} = d\rho/dt$ ambos lados de la ecuación, para obtener finalmente que

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{1}{2} \mu \dot{\rho}^2 + \frac{1}{2} \mu v_0^2 \left(\frac{b^2}{\rho^2} \right) + V(\rho) \right] = 0 , \quad (1.21)$$

ecuación que equivale a decir que la energía total en el sistema relativo se conserva. Esto es de esperarse, puesto que estamos considerando una colisión elástica. Antes de la colisión la

energía es $E_{or} = \frac{1}{2} \mu v_0^2$, de donde

$$\frac{1}{2} \mu v_0^2 = \frac{1}{2} \mu \dot{\rho}^2 + E_{or} \left(\frac{b}{\rho} \right)^2 + V(\rho) = E_{or}$$

y

$$\dot{\rho} = \pm \left[\frac{2E_{or}}{\mu} \left(1 - \frac{b^2}{\rho^2} - \frac{V(\rho)}{E_{or}} \right) \right]^{1/2}$$

$$\dot{\rho} = \pm v_0 \left(1 - \frac{b^2}{\rho^2} - \frac{V(\rho)}{E_{or}} \right)^{1/2} \quad (1.22)$$

Dado que

$$\dot{\rho} = \frac{d\rho}{dt} = \frac{d\rho}{d\phi} \frac{d\phi}{dt}$$

y usando (1.19) obtenemos la ecuación de la órbita :

$$\frac{d\rho}{d\phi} = \pm \frac{\rho^2}{b} \left[1 - \frac{b^2}{\rho^2} - \frac{V(\rho)}{E_{or}} \right]^{1/2} \quad (1.23)$$

Ahora, de la figura (1.3), se observa que a partir de la distancia de máximo acercamiento ρ_m el problema es simétrico. Si ρ aumenta ϕ disminuye y debemos tomar el signo negativo para obtener que

$$d\phi = - \frac{b}{\rho^2} \left[f(\rho) \right]^{-1} d\rho \quad ,$$

donde

$$f(\rho) = \left(1 - \frac{b^2}{\rho^2} - \frac{V(\rho)}{E_{or}} \right)^{1/2} \quad (1.24)$$

Lo único que resta es integrar la expresión (1.23) o (1.24). Para esto utilizamos la simetría del problema; con la ayuda de la figura (1.3) tenemos que cuando $\rho = \rho_m$ entonces $\phi = \vartheta_{cm} + \Phi$ y para $\rho = \infty$, $\phi = \vartheta_{cm}$, por lo que:

$$\Phi = \int_{\vartheta_{cm} + \Phi}^{\vartheta_{cm}} d\phi = - b \int_{\rho_m}^{\infty} \frac{1}{\rho^2 f(\rho)} d\rho \quad .$$

Pero [ver figura (1.3)]:

$$2 \Phi + \vartheta_{cm} = \pi$$

$$\Phi = \frac{\pi}{2} - \frac{\vartheta_{cm}}{2}$$

y el ángulo de dispersión en el CM resulta:

$$\vartheta_{c.m.} = \pi - 2b \int_{\rho_m}^{\infty} \frac{1}{\rho^2 \mathcal{E}(\rho)} d\rho \quad (1.25)$$

con $f(\rho)$ dado por (1.24). En esta expresión la distancia apsidal, ρ_m , de máximo acercamiento se obtiene cuando la componente radial de la velocidad $\dot{\rho}$ desaparece i. e., de (1.22):

$$1 - \frac{b^2}{\rho_m^2} - \frac{V(\rho_m)}{E_{o.r}} = 0 \quad (1.26)$$

Como vemos, el ángulo de dispersión [ecuación (1.25) y (1.26)] depende del parámetro de impacto b , de la energía inicial del proyectil y del tipo de interacción.

Una vez conocido el potencial de interacción, las ecuaciones (1.24), (1.25) y (1.26) nos permiten determinar el ángulo de dispersión en el sistema del centro de masa; con lo cual, de acuerdo a la ecuación (1.13), se puede calcular la energía transferida por el proyectil al blanco.

Para el caso de interacción Coulombiana, la ecuación (1.25) es integrable en forma analítica. Esta situación es de interés para el cálculo de la sección de dispersión de Rutherford, como se verá posteriormente en la sección (1.3)

Prosiguiendo con el análisis, calculemos la transferencia de energía del proyectil al blanco. Entonces suponiendo que el tipo de interacción es Coulombiana tenemos:

$$V(\rho) = \frac{Z_p Z_b e^2}{\rho} \quad (1.27)$$

por lo que el ángulo de dispersión será:

$$\vartheta_{cm} = \pi - 2b \int_{\rho_m}^{\infty} \frac{1}{\rho^2} \left[1 - \frac{b^2}{\rho^2} - \frac{Z_p Z_b e^2}{\rho E_{or}} \right]^{-1/2} d\rho$$

con:

$$1 - \frac{b^2}{\rho_m^2} - \frac{Z_p Z_b e^2}{\rho_m E_{or}} = 0$$

y llevando a cabo la integral obtenemos que

$$\text{sen } \frac{\vartheta_{cm}}{2} = \frac{Z_p Z_b e^2}{E_{or} \sqrt{\left(\frac{Z_p Z_b e^2}{E_{or}} \right)^2 + 4 b^2}} \quad (1.28)$$

La transferencia de energía del proyectil al blanco se obtiene a partir de las ecuaciones (1.13) y éste último resultado, encontrándose que:

$$T = \frac{2 Z_p^2 Z_b^2 e^4}{M_b v_0^2} \frac{1}{b^2 + \left(\frac{\gamma}{2} \right)^2} \quad (1.29)$$

donde la cantidad γ es conocida como diámetro de colisión y está dada por

$$\gamma = \frac{Z_p Z_b e^2}{\frac{1}{2} \mu v_0^2} \quad (1.30)$$

Físicamente, el diámetro de colisión es la distancia para la cual la energía cinética del proyectil relativa al blanco es igual a la energía potencial y corresponde a la mínima distancia a la cual se puede acercar el proyectil al blanco en una colisión frontal ($b=0$) i. e. $\gamma = \rho_m(b=0)$ como podemos ver de la ecuación (1.26).

1.3 El concepto de Sección eficaz [1,4]

En la sección anterior describimos en detalle el proceso de dispersión de un solo proyectil por una sola partícula blanco. Hemos encontrado que el comportamiento del proyectil, vía su ángulo de dispersión esta completamente determinado por su velocidad inicial y su parámetro de impacto. Sin embargo, en experimentos de dispersión, existe una gran cantidad de proyectiles y blancos. Correspondientemente, habrá una gran variedad de parámetros de impacto y por lo tanto habrá una gran variedad de ángulos de dispersión. Como es imposible rastrear la dispersión individual de cada proyectil, es necesario derivar una relación entre la distribución de los parámetros de impacto y la distribución de los ángulos de dispersión a partir de la ley que gobierna la dispersión de una partícula [ecuación (1.25)].

Supongamos que se hace incidir un haz monoenergético de iones (proyectiles) sobre un centro dispersor (blanco) en reposo, consideremos la situación de la figura (1.4) Como el campo de fuerza es esféricamente simétrico entonces tenemos simetría alrededor del eje definido por el haz incidente.

Para un flujo de partículas incidentes Φ el número de proyectiles por segundo atravesando un área que esta entre los parámetros de impacto b y $b + db$ es $\Phi (2 b db)$. Este número de partículas por segundo, reaparecen después de la colisión (el número de partículas se conserva) dentro de un ángulo sólido $d\Omega$ subtendido por $\vartheta(b)$ y $\vartheta(b + db) = \vartheta(b) + d\vartheta$. Por lo tanto por conservación de partículas:

$$\Phi 2 \pi b |db| = \Phi \sigma(\vartheta) |d\Omega|$$

donde $\sigma(\vartheta) d\Omega$ es el número de partículas dispersadas dentro de un ángulo sólido $d\Omega$ por segundo y por flujo incidente. Así:

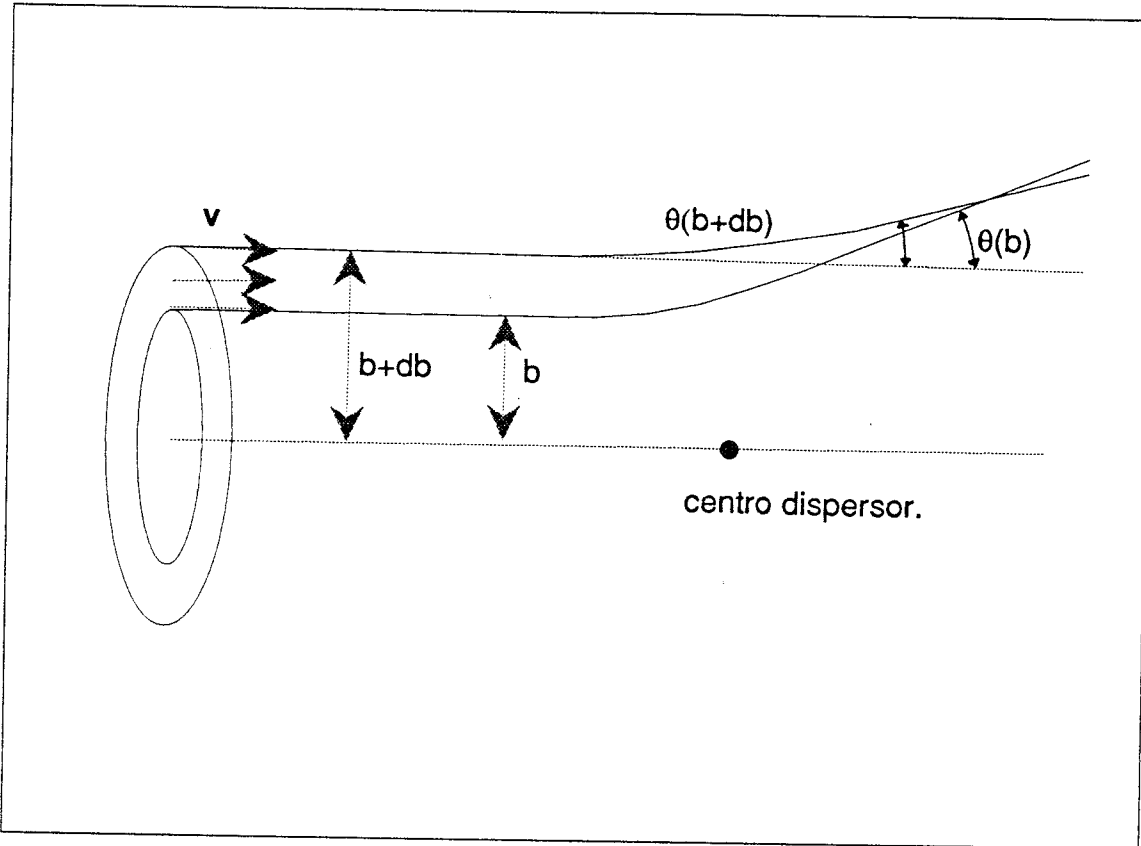


Figura 1.4 Proceso de dispersión para un haz incidente de partículas sobre un blanco fijo (sistema relativo). b es el parámetro de impacto, ϑ es el ángulo de deflección (ver texto).

$$\sigma(\vartheta) = \frac{b}{\sin \vartheta} \left| \frac{db}{d\vartheta} \right| \quad (1.31)$$

donde se ha usado que $d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta$. Podemos interpretar a $\sigma(\vartheta)$ como la medida de la densidad de probabilidad de dispersión en la dirección de ϑ . Como vemos $\sigma(\vartheta)$ tiene unidades de área por ángulo sólido, y es llamada la sección eficaz para dispersión en un ángulo ϑ o comunmente sección eficaz diferencial. De la deducción también vemos que $\sigma(\vartheta)$ contiene información acerca del evento de dispersión.

Sin embargo, cuando tenemos un haz y muchos centros dispersores es necesario utilizar otra definición de la sección eficaz que además nos ayudará a interpretarla como la probabilidad de colisión.

Llamemos un evento al proceso a través del cual un proyectil es dispersado en un ángulo ϑ , la cual causará en el proyectil una pérdida de energía dada; así si definimos [5].

$$\text{Sección eficaz} \equiv \frac{\begin{array}{l} \# \text{ de eventos de un tipo que ocurren por unidad} \\ \text{de tiempo y dispersor en un ángulo } d\Omega. \end{array}}{\text{flujo total de partículas incidentes por ángulo } d\Omega.} \quad (1.32)$$

se ve evidentemente que este concepto para sección eficaz es equivalente al de probabilidad a priori [6]:

$$\text{Probabilidad de un evento.} = \frac{\begin{array}{l} \text{No. de ocurrencia del evento} \\ \text{en un muestreo.} \end{array}}{\text{No. total de muestreos.}}$$

Podemos por lo tanto interpretar la sección eficaz como una medida de la probabilidad de la ocurrencia de un cierto tipo de evento. Veamos la conexión entre probabilidad y sección eficaz como sigue.

Sea ϕ_p el flujo de proyectiles incidentes por unidad de tiempo atravesando una superficie S . (figura 1.5). Si N_p es el número total de iones, el flujo es:

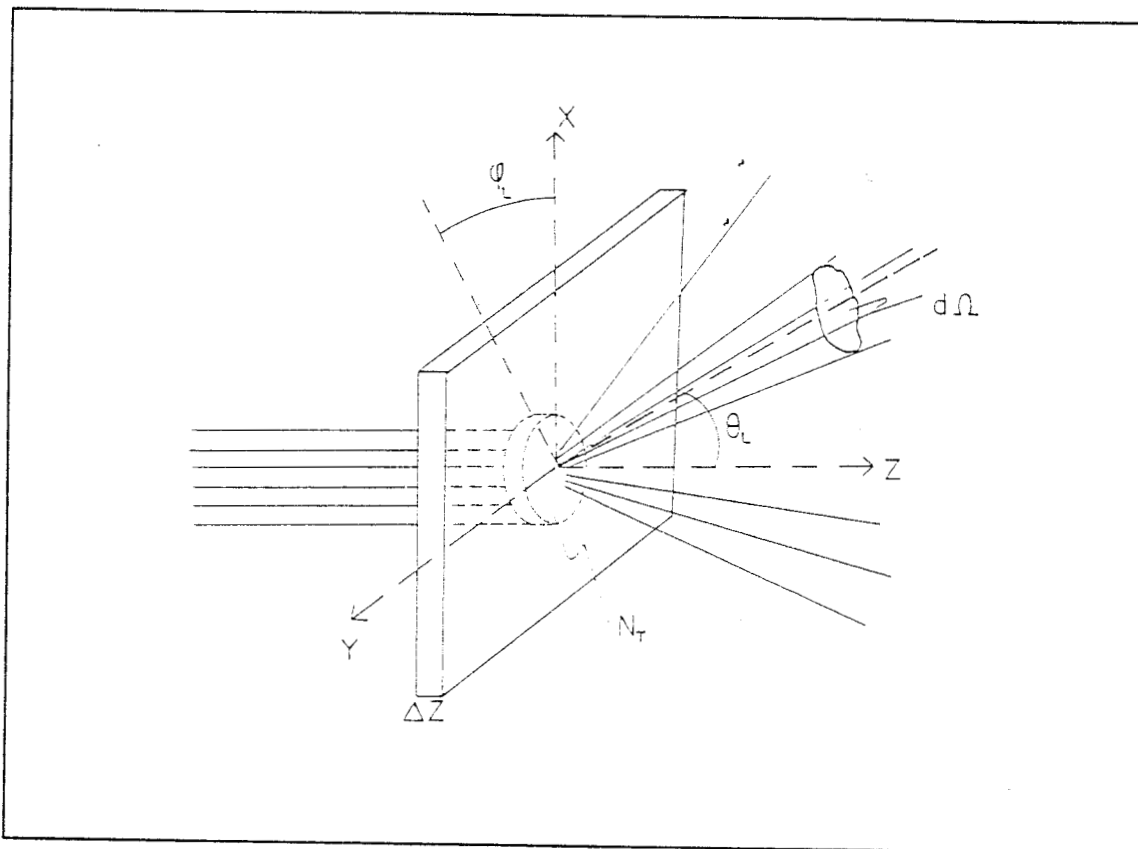


Figura 1.5 Proceso de dispersión para un haz incidente de partículas sobre un blanco de grosor Δz . Parte de las partículas incidentes son dispersadas dentro de un ángulo sólido $d\Omega$. (ver texto).

$$\sigma_p = \frac{N}{S} \quad (1.33)$$

Sea ρ_b al número de dispersores en el blanco por unidad de volúmen; el número total de dispersores en el volúmen $S \Delta z$ que interaccionará con el haz es:

$$n_b = \rho_b S \Delta z$$

donde Δz es el grosor del blanco.

Así, si nuestro evento es el número de partículas dispersadas por unidad de tiempo y centro dispersor: N_{sc}/n_b donde N_{sc} son las partículas dispersadas y utilizando el flujo total de partículas, a partir de (1.32) en (1.33), encontramos que la sección eficaz es:

$$\sigma = \frac{N_{sc}/n_b}{\sigma_p}$$

ó

$$N_{sc} = \sigma \sigma_p n_b \quad (1.34)$$

i.e. el número de partículas dispersadas es proporcional al flujo incidente y al número de dispersores. La "constante" de proporcionalidad σ es la sección eficaz.

Considerando que los eventos son estadísticamente independientes, la probabilidad de dispersión (o de colisión) es por definición de probabilidad a priori:

$$P = N_{sc}/N_p$$

de donde, con ayuda de la ecuación (1.33) y (1.34) obtenemos:

$$P = \frac{\sigma \sigma_p n_b}{\sigma_p S} = \sigma \rho_b \Delta z \quad (1.35)$$

Aún cuando la derivación anterior ha sido heurística el resultado es completamente general [4].

En el argumento anterior, hablamos de la dispersión total de partículas; consideremos ahora una fracción, dN_p , de partículas incidentes por unidad de tiempo que son dispersadas en un ángulo sólido $d\Omega_L$ en el sistema L. De la ecuación (1.34), encontramos que la relación entre el ángulo de dispersión y el número de partículas dispersadas es:

$$dN_{sc} = \sigma_p n_b \sigma(\vartheta_L, \varphi_L) d\Omega_L,$$

donde (ϑ_L, φ_L) son las coordenadas angulares alrededor de la cual la dispersión de las dN_{sc} partículas se efectúa. El número de partículas dispersadas dentro del ángulo sólido $d\Omega_L$ por centro dispersor es

$$\frac{dN_{sc}}{n_b} = \sigma_p \sigma(\vartheta_L, \varphi_L) d\Omega_L$$

por lo tanto, a la cantidad $\sigma(\vartheta_L, \varphi_L)$ se conoce como la sección eficaz diferencial de dispersión puesto que tiene que ver con la probabilidad de dispersión de una fracción (dN) del haz incidente en un diferencial de ángulo sólido $d\Omega$. Generalmente se escribe como:

$$\sigma(\vartheta_L, \varphi_L) \rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega}.$$

Como el flujo de partículas es el mismo en ambos sistemas (CM y L) entonces

$$\frac{d\sigma_{cm}}{d\Omega_{cm}} d\Omega_{cm} = \frac{d\sigma_L}{d\Omega_L} d\Omega_L$$

lo cual nos permite hacer uso del tratamiento analítico más simple en el sistema del centro de masa.

De acuerdo con la ecuación (1.28) para el caso de dispersión Coulombiana existe una relación entre el ángulo de dispersión y el parametro de impacto

$$\text{sen } \frac{\vartheta_{cm}}{2} = \frac{\gamma}{\sqrt{\gamma^2 + 4b^2}}$$

con γ definido por (1.30), por lo tanto, de la ecuación (1.31)

$$\begin{aligned} \frac{db}{d\vartheta_{cm}} &= \frac{-(\gamma^2 + 4b^2)^{3/2}}{8\gamma b} \cos \frac{\vartheta_{cm}}{2} \\ &= \frac{-\gamma^2 \cos \frac{\vartheta_{cm}}{2}}{8 \text{sen}^3 \frac{\vartheta_{cm}}{2}} \end{aligned}$$

con lo cual se muestra fácilmente que:

$$\sigma(\vartheta_{cm}) = \left(\frac{\gamma}{4} \right)^2 \text{csc}^4 \left(\frac{\vartheta_{cm}}{2} \right) \quad , \quad (1.36)$$

que es la sección eficaz de Rutherford para un potencial Coulombiano y vale tanto para un potencial atractivo como uno repulsivo puesto que no depende del signo de las cargas. Esta ecuación diverge para ángulos pequeños (transferencia de energía pequeña, ecuación (1.13)) lo cual es una característica de los potenciales $1/r$, válido aún en el tratamiento cuántico [1,2]. Para r grande el potencial tiene que ser modificado (por el apantallamiento de las cargas electrónicas) para obtener la contribución finita a ángulos pequeños de dispersión observada experimentalmente.

1.4 Límite de aplicabilidad de la Mecánica Clásica [1,2,4,7].

Todo lo que hemos hecho hasta ahora ha sido en base a la mecánica clásica *i.e.* hemos hecho uso de trayectorias bien definidas así como de velocidades. Aunque el concepto de sección eficaz tiene validez tanto clásica como cuánticamente debemos estudiar bajo qué condiciones es aplicable la mecánica clásica.

Supongamos que una partícula de masa M_p y velocidad v es dispersada por un potencial $V(\rho)$. De acuerdo a la mecánica cuántica, en particular, al principio de incertidumbre de Heisenberg, tanto la posición como la velocidad de la partícula tienen una incertidumbre que debe satisfacer las relaciones:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar \qquad \Delta y \Delta p_y \geq \hbar \qquad (1.37)$$

si la partícula se mueve en la dirección z .

De acuerdo a esto, el parámetro de impacto b estará definido dentro de un intervalo $\pm \Delta y$, de aquí, la incertidumbre en el ángulo de dispersión es [figura (1.6)]:

$$\delta \vartheta = \left| \frac{\delta \vartheta}{db} \right| \delta b = \left| \frac{\delta \vartheta}{db} \right| \Delta y$$

Además como existe una incertidumbre en la velocidad inicial, también la habrá en el momento. La incertidumbre en la dirección del movimiento del proyectil es:

$$d\varphi = \frac{\Delta p_y}{p_z} = \frac{\Delta p_y}{M_p v} \geq \frac{\hbar}{M_p v \Delta y}$$

que al utilizar la relación de De Broglie,

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad ,$$

se puede escribir como:

$$d\varphi \geq \frac{\lambda}{\Delta y}$$

El efecto total producido por la incertidumbre sobre la dispersión es:

$$\begin{aligned} \Delta \vartheta^2 &= \delta \vartheta^2 + \delta \varphi^2 \\ &\geq \left| \frac{d\vartheta}{db} \right|^2 \Delta y^2 + \frac{\lambda^2}{\Delta y^2} \end{aligned}$$

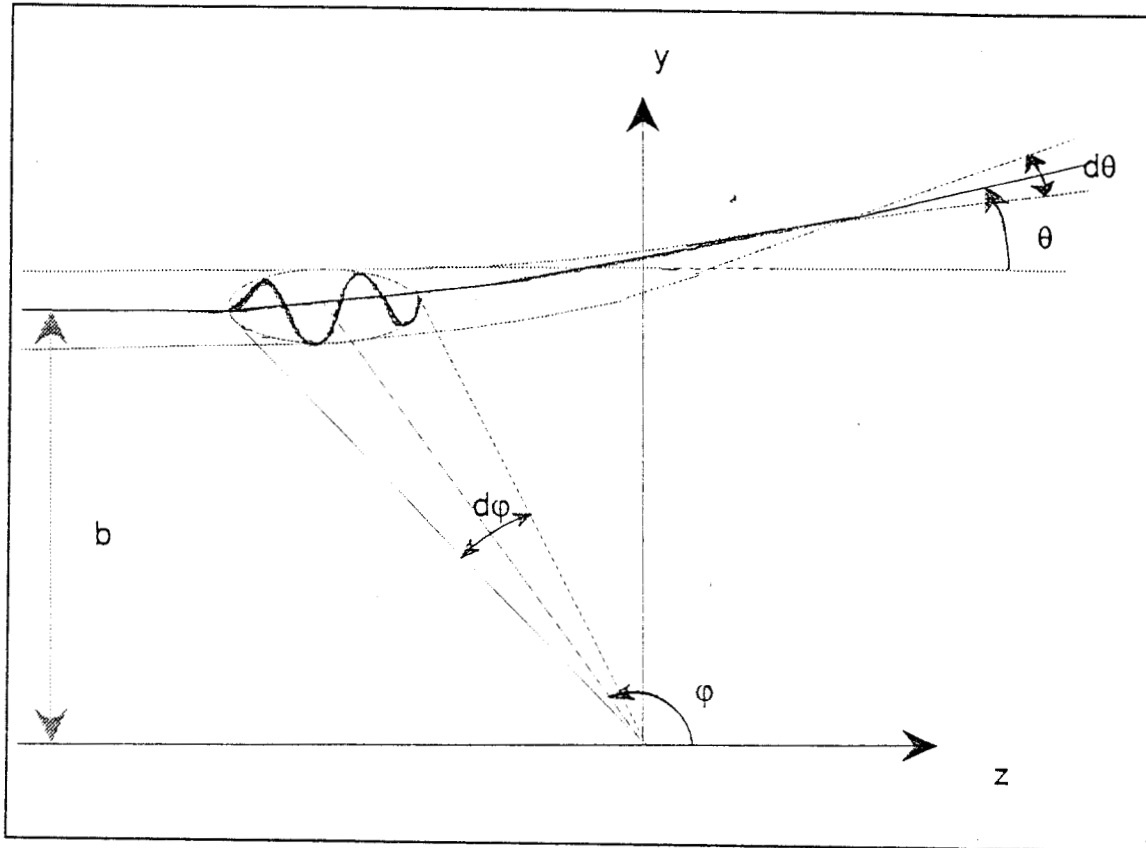


Figura 1.6 Dispersión de un paquete de onda por un blanco en reposo para analizar el proceso de dispersión mediante un tratamiento clásico si éste incide con un parámetro de impacto b (ver texto).

Ahora, para que el tratamiento clásico sea adecuado, la incertidumbre debe ser mínima en el ángulo de dispersión, que equivale a que $\Delta\vartheta$ sea mínima para algún valor de Δy .

Derivando esta ecuación con respecto a Δy e igualando a cero encontramos el valor de Δy que hace mínimo a $\Delta\vartheta$, con lo cual:

$$(\Delta\vartheta)_{\min}^2 = \lambda \left| \frac{d\vartheta}{db} \right|$$

Para el caso de dispersión Coulombiana la ecuación (1.28) incluye la relación entre ángulo de dispersión en el sistema CM y el diámetro de colisión:

$$\text{sen } \frac{\vartheta_{\text{cm}}}{2} = \frac{\gamma}{\sqrt{\gamma^2 + 4b^2}}$$

donde γ (diámetro de colisión) está dado por (1.30) y en consecuencia:

$$\text{tg } \frac{\vartheta_{\text{cm}}}{2} = \frac{\gamma}{2b} \quad (1.38)$$

Para ángulos pequeños:

$$\vartheta_{\text{cm}} \approx \frac{\gamma}{b} ,$$

por lo que:

$$\frac{d\vartheta_{\text{cm}}}{db} = - \frac{\gamma}{b^2} ,$$

$$(\Delta\vartheta_{\min})^2 \approx \frac{\lambda\gamma}{b^2} = \frac{\lambda}{\gamma} \vartheta_{\text{cm}}^2 ,$$

ó

$$\frac{\Delta\vartheta_{\text{cm}}}{\vartheta_{\text{cm}}} \approx \left(\frac{\lambda}{\gamma} \right)^{1/2} .$$

Como deseamos un ángulo de deflexión bien definido $\Delta\vartheta / \vartheta \ll 1$ y entonces es necesario que

$$\frac{\lambda}{\gamma} \ll 1 , \quad (1.39)$$

para poder aplicar un tratamiento clásico, i.e, la longitud de onda de Broglie del proyectil debe ser mucho menor que el diámetro de colisión.

1.5 Sección de frenamiento [1,2,4,8].

De lo expuesto anteriormente se puede apreciar que el conocimiento de la sección eficaz diferencial nos permite calcular la probabilidad de que una fracción de partículas incidentes sea dispersada en un ángulo ϑ y $\vartheta + d\vartheta$ en el sistema del centro de masa. Durante la colisión el proyectil perderá energía cinética de acuerdo con las ecuaciones (1.13) y (1.29); de estas ecuaciones y la del concepto de sección eficaz podemos ver que hay una relación entre el ángulo de dispersión y la energía transferida, lo cual nos permite escribir la sección eficaz diferencial de pérdida de energía como:

$$\sigma(\vartheta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega$$

y

$$\sigma(E,T) = \frac{d\sigma}{dT} dT$$

donde E es la energía inicial del proyectil y T es la energía transferida en la colisión.

Como el tema central de este trabajo es calcular la pérdida de energía por unidad de longitud que penetra el proyectil nos enfocamos en lo que sigue a este propósito.

Consideremos de nuevo la figura (1.4). Conforme el proyectil penetra, sufrirá una serie de colisiones con sus correspondientes transferencias de energía $T_1, T_2 \dots T_n$. Sea P_i la probabilidad de que ocurra una de estas colisiones [ver ecuación (1.35)]. Así, la pérdida de energía promedio es, utilizando la ecuación (1.35)

$$- \langle \Delta E \rangle = \sum_i P_i T_i = \rho_b \Delta x \sum_i \sigma_i T_i$$

donde Δx es el grosor del blanco y que para un número grande de colisiones podemos escribir:

$$S \equiv - \frac{1}{\rho_b} \langle \frac{\Delta E}{\Delta x} \rangle = \int T d\sigma = \int T \frac{d\sigma}{dT} dT \quad (1.40)$$

esta ecuación se define como la sección de frenamiento S y nos indica la cantidad de energía perdida por el proyectil por unidad de longitud y por centro dispersor. El poder de frenamiento del medio simplemente se define como dE/dx .

Otra manera útil de escribir la sección de frenamiento es:

$$S = \int T \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \quad (1.41)$$

ó haciendo uso de (1.31):

$$\begin{aligned} S &= 2\pi \int T \frac{b}{\text{sen}\vartheta} \left| \frac{db}{d\vartheta} \right| \text{sen}\vartheta d\vartheta \\ &= 2\pi \int T b db . \end{aligned} \quad (1.42)$$

Esta última definición nos será particularmente útil en el tratamiento de proyectiles de baja energía.

Hasta ahora el tratamiento que hemos seguido ha sido para una colisión elástica i.e. cuando la energía interna del proyectil y del blanco no cambia; en este caso la energía perdida por el proyectil será utilizada para cambiar el estado de movimiento tanto del proyectil como del blanco. En este caso hablamos de sección de frenamiento nuclear S_n . Por el contrario para colisiones donde la estructura electrónica juega un papel importante, la pérdida de energía será inelástica, entonces

hablamos de sección de frenamiento electrónico S_e .

Para darnos una idea de la magnitud relativa entre sección de frenamiento electrónico y nuclear podemos utilizar los resultados obtenidos en las secciones anteriores.

Consideremos la pérdida de energía elástica e inelástica del proyectil como debida a la interacción binaria proyectil-núcleo y proyectil-electrones respectivamente. En el último caso asumimos que la energía elástica transferida a los electrones es la causa de la pérdida de energía inelástica por el proyectil. Así, dentro de esta primera aproximación la contribución a la sección de frenamiento proveniente de la interacción proyectil-núcleo (sección de frenamiento nuclear), se obtiene, haciendo uso de las ecuaciones (1.29) y (1.42) para el caso en que el blanco es un núcleo de masa M_n y resulta:

$$S_n = \frac{2 \pi Z_p^2 Z_b^2 e^4}{M_n v_o^2} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \frac{dT}{T} \quad (1.43)$$

Ahora, para el caso de la sección de frenamiento electrónico el blanco tiene Z_b electrones cuya masa total es $Z_b m_e$, así:

$$S_e = \frac{2 \pi Z_p^2 Z_b e^4}{m_e v_o^2} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \frac{dT}{T} \quad (1.44)$$

donde T_{\min} y T_{\max} son las transferencias mínima y máxima de energía respectivamente y han sido introducidas arbitrariamente; más adelante veremos que estas integrales son finitas. Para la misma velocidad del proyectil, encontramos que:

$$\frac{S_n}{S_e} \approx \frac{Z_b m_e}{M_n} = \frac{Z_b m_e}{Z_b m_p} \ll 1 \quad (1.45)$$

donde m_p es la masa del protón, por lo tanto, vemos que la pérdida de energía elástica es en general mucho menor (≈ 2000 veces) que la pérdida de energía inelástica. Este es el caso en

muchas de las situaciones donde el proyectil tiene suficiente energía para excitar a los electrones del blanco. Sin embargo, para bajas velocidades, el proyectil captura electrones y tiende a neutralizarse, haciendo que la contribución a la sección de frenamiento nuclear pueda llegar a ser dominante.

Para darnos una idea de la cantidad de energía que debe tener un proyectil para excitar un electrón, analicemos la función de transferencia elástica dada por la ecuación (1.13). La máxima energía transferida a un electron es en este caso:

$$T_{\max} = \frac{4m_e E_0}{M_p} .$$

Si la energía de excitación del electrón es E_{exc} , la energía transferida deberá ser mayor que la de excitación i.e. $T_{\max} \geq E_{exc}$ para que exista una excitación y la energía del proyectil debe ser entonces:

$$E_0 \geq \frac{M_p E_{ex}}{4m_e} .$$

Para protones como proyectiles e incidiendo en Hidrógeno atómico tenemos que la energía de excitación de este ultimo es $E_{ex} \approx 10$ eV por lo que la energía del proyectil debe ser:

$$E_0 \geq 5 \text{ keV} \quad (1.46)$$

De este análisis podemos concluir que habrá un amplio rango de energías del proyectil para el cual la sección de frenamiento esté determinada básicamente por la participación de los electrones en la colisión.

Por último, para explicar cualitativamente la diferencia entre S_e y S_n tomemos el siguiente ejemplo. Consideremos un gas de Hidrógeno, donde la fuerza de interacción entre el proyectil y el núcleo es la misma que entre el proyectil y el electrón, excepto por el signo. Como la distribución electrónica en el

espacio es aleatoria la única diferencia entre electrón y núcleo en el presente esquema es su masa . Integrando -para un parámetro de impacto dado- la fuerza de interacción sobre el tiempo obtenemos el momento lineal transferido el cual es aproximadamente el mismo para electrones y núcleo, en este ejemplo, excepto por el signo. Sin embargo, para obtener la energía transferida dividimos el cuadrado del momento por 2 veces la masa y esto causa la gran diferencia en la transferencia de energía entre electrones y nucleos tratados como partículas blanco.

Las unidades de la sección de frenamiento como podemos ver de la ecuación (1.39) está dada por [energía] [longitud]²/dispersos. En este trabajo utilizamos para la energía electrón-Volts y la longitud en centímetros i.e. la sección de frenamiento estará dada en:

$$[Se] = eV \text{ cm}^2/\text{dispersos} .$$

En el siguiente capítulo discutiremos algunos de los trabajos más relevantes en el tratamiento y modelaje de la sección de frenamiento electrónico con el fin de presentar las ventajas y desventajas de cada modelo en su región de validez y con esto señalar los problemas abiertos a la investigación.

CAPITULO II

TEORIAS ASOCIADAS AL PODER DE FRENAMIENTO

2.1 Introducción.

En éste capítulo presentaremos en forma resumida los modelos teóricos desarrollados para explicar y cuantificar la sección de frenamiento con el propósito de mostrar el estado actual de las teorías y señalar los problemas abiertos que son motivo de investigación actual. El capítulo esta dividido en tres secciones en donde se exponen los modelos teóricos en orden cronológico, además de que cada sección corresponde a una región de validez de los modelos en función de la velocidad del proyectil. Empezando con los modelos válidos para la región de altas velocidades, continuando con la región de velocidades intermedias y por último la región de bajas velocidades.

Experimentalmente se observa un comportamiento característico de la pérdida de energía como se puede observar de la figura (2.1) donde se aprecia claramente la distinción de tres regiones. Dado el carácter de muchos cuerpos del problema (interacción núcleo-núcleo, electron-electron, núcleo-electron entre proyectil y blanco) existe una gran cantidad de procesos durante la colisión como son captura y pérdida de carga, excitación, ionización, etc., con un grado de participación dependiente de la velocidad del proyectil, por lo que no ha sido posible generar un modelo que considere todo el espectro de velocidades. Debido a esto se han generado modelos complementarios que incorporen los procesos dominantes en cada región, dividiéndose en tratamientos teóricos formales, fenomenológicos, semi-empíricos y empíricos. De esto, la primera pregunta que nos surge es: ¿ Que tipo de procesos ocurren fundamentalmente en cada región ?

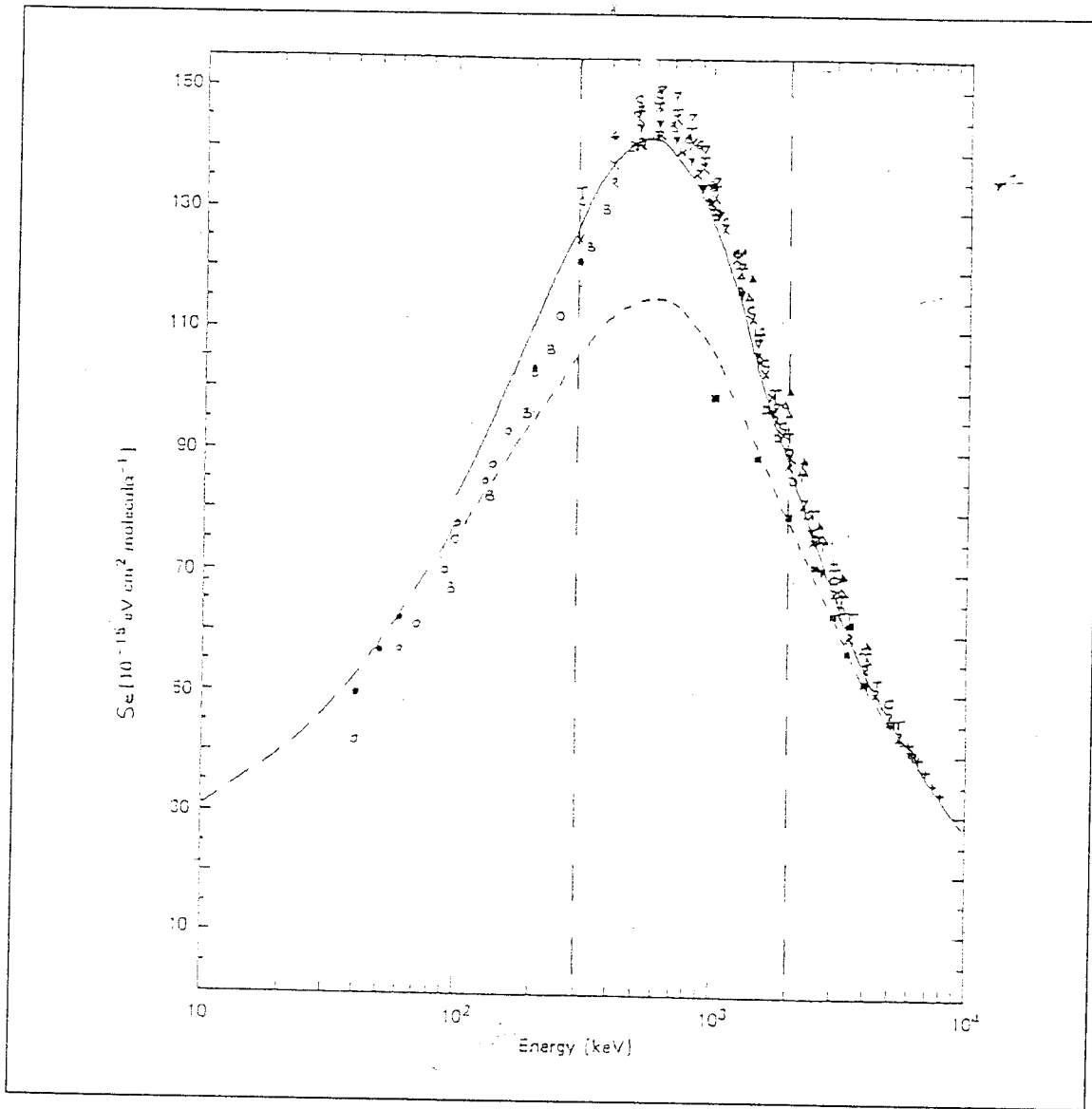


Figura 2.1 Comportamiento experimental de la sección de frenamiento para Helio incidente en Etileno. Como se puede observar, cualitativamente se divide en 3 regiones claramente distinguibles. La línea continúa es el ajuste experimental y los símbolos son los datos experimentales (Figura tomada de la referencia [9]).

Región de baja energía:

Cuando la velocidad del proyectil es menor que la velocidad orbital de los electrones del blanco, la energía de interacción induce básicamente promoción electrónica no radiativa y el reajuste de las nubes electrónicas, traduciéndose la pérdida de energía en un proceso de transferencia de momento, haciendo que la pérdida de energía del proyectil sea lineal con la velocidad. El proceso de fricción se puede considerar como una fuerza de arrastre entre el proyectil y blanco debida al intercambio de momento.

Región de energías intermedias:

Sin embargo, cuando la velocidad del proyectil es del orden de la velocidad orbital de los electrones del blanco, ésta es suficiente para excitar a éstos, permitiendo así, emisión de radiación por promoción electrónica e intercambio de carga entre proyectil y blanco. Con lo cual, el tratamiento del problema se torna difícil de modelar teóricamente, puesto que aun no se conoce muy bien el mecanismo de intercambio de carga, siendo esto aun un tema abierto a la investigación.

Región de altas energías:

En esta región la velocidad del proyectil es mucho mayor que la velocidad orbital de los electrones del blanco. El proyectil puede perder un buen número de electrones e inclusive quedar como una carga desnuda, produciendo esto fundamentalmente procesos de excitación e ionización en las capas electrónicas del blanco, producción de rayos X característicos por promoción electrónica de capas internas. Esta región fué la primera en tratarse teóricamente, primero por N. Bohr desde un enfoque clásico y después por H. Bethe cuánticamente.

A continuación se tratará de dar una visión general del tratamiento teórico asociado a las diferentes regiones en que se ha dividido a la pérdida de energía en base a los procesos dominantes en ellas, para esto empezaremos por la región de altas energías.

2.2 Modelos teóricos en la región de altas energías

2.2.1 Modelo de Bohr [2,7,10,11,12].

En la última sección del capítulo anterior calculamos la pérdida de energía bajo la suposición simplista de que los electrones del blanco son partículas libres *i.e.* no consideramos el hecho de que están ligados a un núcleo en el átomo. Fue N. Bohr [2,10,11] quien primero propuso un modelo que considera a los electrones ligados al átomo. De acuerdo a Bohr, la pérdida de energía del proyectil se puede considerar como:

- La transferencia de electrones libres (localmente) si el tiempo de interacción es mucho más pequeño que el periodo orbital, lo cual se cumple para parámetros de impacto pequeños, puesto que el tiempo de interacción es del orden de

$$\tau \approx b/v$$

donde v es la velocidad del proyectil y b es el parámetro de impacto con el que incide. Por lo tanto la condición anterior implica:

$$b \ll b_0 = v/w_0 \quad (2.1)$$

donde w_0 es la frecuencia de revolución del electron en el blanco, a b_0 se le conoce como el máximo parámetro de impacto para el cual los electrones se pueden considerar como libres.

- Si el tiempo de interacción es mayor que el periodo orbital de los electrones del blanco, lo cual se cumple para parámetros

de impacto grandes ($b \gg b_0$) los electrones son capaces de reajustar su movimiento orbital debido a que están ligados al átomo. Bajo la suposición de que los electrones están armónicamente ligados al núcleo Bohr calculó la pérdida de energía de una manera clásica como lo veremos a continuación.

Consideremos una partícula de carga $Z_p e$ y velocidad v que pasa frente a una carga ligada armónicamente al núcleo (figura 2.2). Tomando en cuenta el campo eléctrico que produce el proyectil sobre el electrón como la fuerza perturbadora de su movimiento orbital, encontramos que la ecuación de movimiento para el electrón es:

$$\ddot{\mathbf{x}} + \Gamma \dot{\mathbf{x}} + \omega_0^2 \mathbf{x} = \frac{e}{m} \mathbf{E}(t) \quad (2.2)$$

en donde el campo eléctrico es el producido en el origen O , puesto que las variaciones sobre la posición de la partícula ligada pueden ser despreciadas, \mathbf{x} es el vector de posición del electrón respecto al núcleo del blanco, ω_0 es la frecuencia característica del electrón y Γ es una pequeña constante de amortiguamiento, éste factor no es esencial pero permite eliminar divergencias en el cálculo matemático.

Para resolver la ecuación (2.2) utilizamos el método de Fourier, entonces las transformadas de la posición y campo eléctrico son:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{x}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega, \\ \mathbf{E}(t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega, \end{aligned} \quad (2.3)$$

sustituyendo en (2.2) encontramos que el movimiento del electrón en el blanco es:

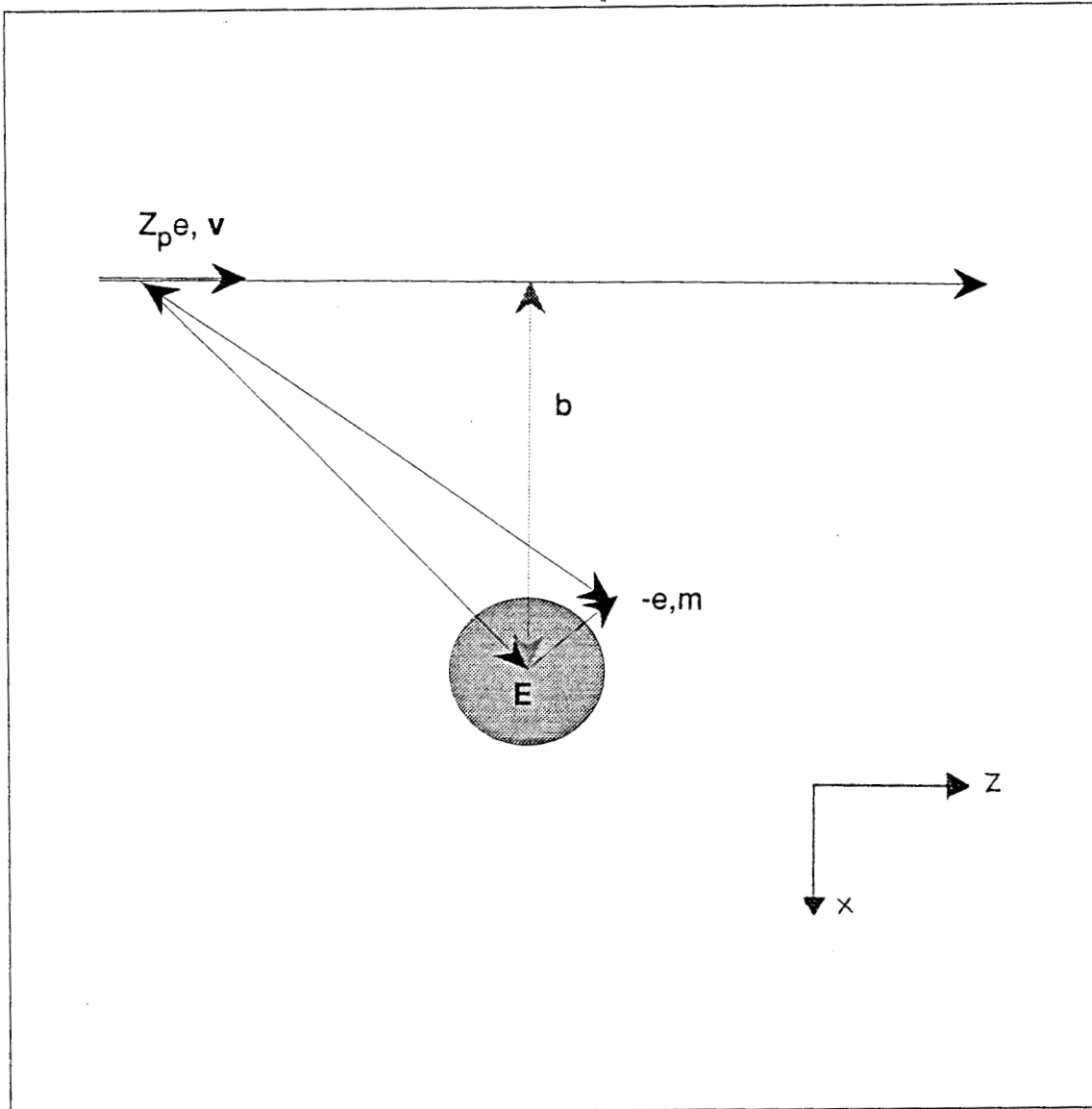


Figura 2.2 Carga $-e$ ligada armónicamente en presencia de un proyectil que incide con velocidad v y un parámetro de impacto b . La región sombreada representa la vecindad de la carga $-e$ en la que el campo eléctrico E producido por el proyectil $Z_p e$ se puede considerar uniforme.

$$\mathbf{x}(w) = \frac{e}{m} \frac{E(w)}{w_0^2 - iw\Gamma - w^2} ; \quad (2.4)$$

por lo tanto, conociendo el campo eléctrico $E(t)$ como función del tiempo podemos determinar de esta ecuación a $\mathbf{x}(t)$.

Pero lo que realmente nos interesa no es el movimiento detallado del electrón, sino la energía transferida en la colisión. Para encontrar esto consideramos el trabajo hecho por la partícula incidente sobre la partícula ligada. Así, la velocidad con que efectúa trabajo el proyectil sobre el blanco es:

$$\frac{dT}{dt} = \int \mathbf{E} \cdot \mathbf{J} d\tau'$$

donde \mathbf{J} es la densidad de corriente asociada al movimiento del electrón. El trabajo total hecho por el proyectil es:

$$\Delta T = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\tau' \mathbf{E} \cdot \mathbf{J}$$

así, para el electrón ligado

$$\mathbf{J} = e \dot{\mathbf{x}} \delta[\mathbf{x}' - \mathbf{x}(t)]$$

y consecuentemente:

$$\Delta T = \int_{-\infty}^{\infty} dt e \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{E} \quad (2.5)$$

Sustituyendo la ecuaciones (2.3) en (2.5), utilizando la condición de realidad de \mathbf{E} y \mathbf{x} la cual nos dice que:

$$E(-w) = E^*(w)$$

$$\mathbf{x}(-w) = \mathbf{x}^*(w)$$

y las propiedades de la función Delta de Dirac, ΔT resulta:

$$\Delta T = 2e \operatorname{Im} \left\{ \int_0^{\infty} \omega \mathbf{x}(\omega) \mathbf{E}^*(\omega) d\omega \right\}. \quad (2.6)$$

Finalmente, de la ecuación (2.4), la expresión anterior se escribe como:

$$\Delta T = \frac{2e^2}{m} \int_0^{\infty} \frac{\Gamma \omega^2 |\mathbf{E}(\omega)|^2 d\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \Gamma^2}. \quad (2.7)$$

Para valores pequeños de Γ el integrando es una función de pico agudo alrededor de $\omega = \omega_0$ muy parecida a una Lorentziana. Por lo tanto, podemos aproximar el factor que involucra al campo eléctrico por su valor en $\omega = \omega_0$, de donde:

$$\Delta T = \frac{2e^2}{m} |\mathbf{E}(\omega_0)|^2 \int_0^{\infty} \frac{x^2 dx}{\left[\frac{\omega_0^2}{\Gamma^2} - x^2 \right]^2 + x^2}$$

esta integral tiene el valor de $\frac{\pi}{2}$ [12], independiente de $\frac{\omega_0}{\Gamma}$, así:

$$\Delta T = \frac{\pi e^2}{m} |\mathbf{E}(\omega_0)|^2. \quad (2.8)$$

Este es un resultado general para la transferencia de energía a un oscilador no-relativista por un campo electrostático externo, el cual es producido por una partícula cargada que incide como proyectil.

De la figura (2.2) vemos que el campo eléctrico producido en el origen por la partícula de carga Ze que incide con una velocidad v y un parámetro de impacto b y bajo la suposición de que la trayectoria del proyectil es casi una línea recta i.e. para pequeños ángulos de dispersión, este está dado por:

$$E_x(t) = \frac{Z_p e b}{(v^2 t^2 + b^2)^{3/2}} \quad (2.9)$$

$$E_z(t) = \frac{Z_p e v t}{(v^2 t^2 + b^2)^{3/2}}$$

Las transformadas de Fourier correspondientes a través de las ecuaciones (2.3) resultan :

$$E_x(w_0) = \frac{2Z_p e w_0}{v^2 \sqrt{2\pi}} K_1 \left(\frac{w_0 b}{v} \right) , \quad (2.10)$$

$$E_z(w_0) = \frac{-2 i Z_p e w_0}{v^2 \sqrt{2\pi}} K_0 \left(\frac{w_0 b}{v} \right) ,$$

donde K_0 y K_1 son las funciones de Bessel modificadas de orden cero y uno respectivamente. Sustituyendo en (2.8) la transferencia de energía en esta aproximación resulta ser:

$$\Delta T = \frac{2 Z_p^2 e^4}{m v^2 b^2} \left(\frac{w_0 b}{v} \right)^2 \left[K_1^2 \left(\frac{w_0 b}{v} \right) + K_0^2 \left(\frac{w_0 b}{v} \right) \right] \quad (2.11)$$

Notemos que para $b \ll b_0$ (ecuación 2.1) la ecuación (2.11) se comporta como si el electrón estuviera libre, puesto que recuperamos la ecuación (1.29) con $Z_b=1$ y $M_b=m$ para pequeños parámetros de impacto. Por lo tanto, podemos utilizar (2.11) para evaluar la sección de frenamiento electrónico para pequeños y grandes parámetros de impacto. Sin embargo, notemos que (2.11) diverge cuando el parámetro de impacto tiende a cero ($b \rightarrow 0$) y debemos por lo tanto seleccionar un mínimo parámetro de impacto que sea consistente con (1.29). Seleccionando b_{\min} tal que $w_0 b_{\min}/v \ll 1$ podemos utilizar, para pequeños parámetros de impacto, desarrollos asintóticos para las funciones de Bessel modificadas [13]:

$$K_\nu(x) \rightarrow \begin{cases} -\ln\left(\frac{x}{2}\right) - 0.5772 & \nu = 0 \\ \frac{\Gamma(\nu)}{2} \left(\frac{2}{x}\right)^\nu & \nu \neq 0 \end{cases} \quad (2.12)$$

con lo cual, la máxima transferencia de energía [para el mínimo parámetro de impacto] es:

$$T(b_{\min}) \cong \frac{2 Z_p^2 e^4}{m v^2} \frac{1}{b_{\min}^2}$$

Por otro lado, la máxima transferencia de energía dada por la ecuación (1.29) es cuando $b=0$:

$$T(b=0) = \frac{2 Z_p^2 e^4}{m v^2} \left(\frac{Z_p e^2}{m v^2} \right)^{-2}$$

Igualando ambas ecuaciones obtenemos el valor para b_{\min} que sea consistente con la suposición de Bohr de electrones libres para pequeños parámetros de impacto, encontramos que:

$$b_{\min} = \frac{Z_p e^2}{m v^2} \quad (2.13)$$

Ahora, para calcular la sección de frenamiento utilizamos la ecuación (1.42):

$$S_e = 2 \pi \int \Delta T b db \quad ,$$

y suponiendo que el blanco tiene Z_b electrones, éstos pueden ser divididos en grupos especificados por el índice j , con f_j el número de electrones que tienen la misma frecuencia armónica w_0 . El número f_j es llamado tensión de oscilador del j -ésimo oscilador. Obviamente las f_j satisfacen la regla de suma:

$$\sum f_j = Z_b \quad (2.14)$$

por lo tanto, la sección de frenamiento electrónico total es:

$$S_e = 2\pi \sum_i f_i \int \Delta T_i \, b db \quad (2.15)$$

por lo que sustituyendo la ecuación (2.11):

$$S_e = \frac{4\pi Z_p^2 e^4}{m_e v^2} \sum_j^b f_j \int_{\xi_{\min}}^{\infty} \xi_j \left[K_1^2(\xi_j) + K_0^2(\xi_j) \right] d\xi_j \quad (2.16)$$

donde:

$$\xi_j = \frac{bw_{j0}}{v} ,$$

que es la relación entre la velocidad orbital del electron w_j a una distancia b del núcleo y v es la velocidad del proyectil.

Llevando a cabo la integración (la cual se efectua en forma cerrada [13,14]) obtenemos:

$$S_e = \frac{4\pi Z_p^2 e^4}{m_e v^2} \sum_i f_i \left[\xi_{\min} K_1(\xi_{\min}) K_0(\xi_{\min}) \right]$$

donde $\xi_{\min} = \frac{b_{\min} w_j}{v}$. Como $\xi_{\min} \ll 1$, puesto que el parámetro de impacto es pequeño y utilizando el desarrollo asintótico para las funciones de Bessel modificadas [ecuación (2.12)] obtenemos:

$$S_e = - \frac{4\pi Z_p^2 e^4}{m_e v^2} \left[\sum_j f_j \ln w_{j0} + Z_b \ln \left[\frac{1.781 b_{\min}}{2v} \right] \right] \quad (2.17)$$

Si definimos la frecuencia promedio como:

$$Z_b \ln \langle w_0 \rangle = \sum f_i \ln w_i \quad (2.18)$$

y empleando la ecuación (2.13), encontramos que:

$$S_e = \frac{4\pi Z_p^2 Z_b e^4}{m_e v^2} \ln \left[\frac{1.123 m_e v^3}{\langle w_0 \rangle Z_p e^2} \right] \quad (2.19)$$

que es el resultado que obtuvo Bohr en 1915 [11] empleando argumentos completamente clásicos.

Necesitamos conocer el valor promedio de la frecuencia angular del átomo blanco, para esto, hagámoslo de una manera semi-cuántica, es decir, partamos del postulado del propio Bohr. "El momento angular del electrón en su órbita sea igual a un múltiplo entero de la acción":

$$\oint p \, dq = n \hbar \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

donde n es el número cuántico principal, así, para nuestro caso:

$$m v_n r_n = n \hbar$$

y como el electrón se encuentra en primera aproximación en una órbita estable entonces la fuerza centripeta es igual a la fuerza Coulombiana, por lo que,

$$\frac{m v_n^2}{r_n} = \frac{Z_b e^2}{r_n^2}$$

eliminando v_n entre ambas ecuaciones, obtenemos:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m e^2 Z_b} ,$$

que son los radios permitidos para el electrón en el átomo. En términos del radio de Bohr, a_0 , encontramos que:

$$r_n = n^2 a_0 / Z_b$$

Por lo tanto, la velocidad radial del electrón está dada por:

$$v_n = \frac{Z_b e^2}{n\hbar} = Z_b \frac{v_0}{n}$$

donde $v_0 = e^2/\hbar$ es la velocidad de Bohr para $n = 1$. Por lo tanto la frecuencia de oscilación del electrón en el orbital n está dada por:

$$\omega_n = \frac{v_n}{r_n} = \frac{v_0}{n^3 a_0} Z_b^2$$

entonces, de la ecuación (2.19), la frecuencia angular promedio es:

$$Z_b \ln \langle \omega_0 \rangle = \sum f_n \ln \left[\frac{v_0}{n^3 a_0} Z_b^2 \right]$$

y donde f_n es el número de electrones en el orbital n . Así:

$$\langle \omega_0 \rangle = Z_b^2 \frac{v_0}{a_0} \prod_{n=1} \left[\frac{1}{n} \right]^{3f_n/Z_b} \quad (2.20)$$

sustituyendo esto en la ecuación (2.19) se puede calcular la sección de frenamiento.

Escribamos la ecuación (2.19) en terminos de $\hbar v_0 a_0$, así:

$$S_e = \frac{4\pi Z_p^2 Z_b \hbar v_0 a_0}{u^2} \ln \left[\frac{1.1229 u^3 v_0}{\langle \omega_0 \rangle Z_p a_0} \right]$$

donde $u = v/v_0$ es la velocidad adimensional. Numéricamente:

$$\hbar v_0 a_0 = 0.761743 \times 10^{-15} \text{ eV cm}^2 .$$

Como un ejemplo, calculemos S_e para protones incidiendo sobre Aluminio, para el cual, $Z_b = 13 \Rightarrow f_1 = 2, f_2 = 8, f_3 = 3$, así, la frecuencia angular promedio es:

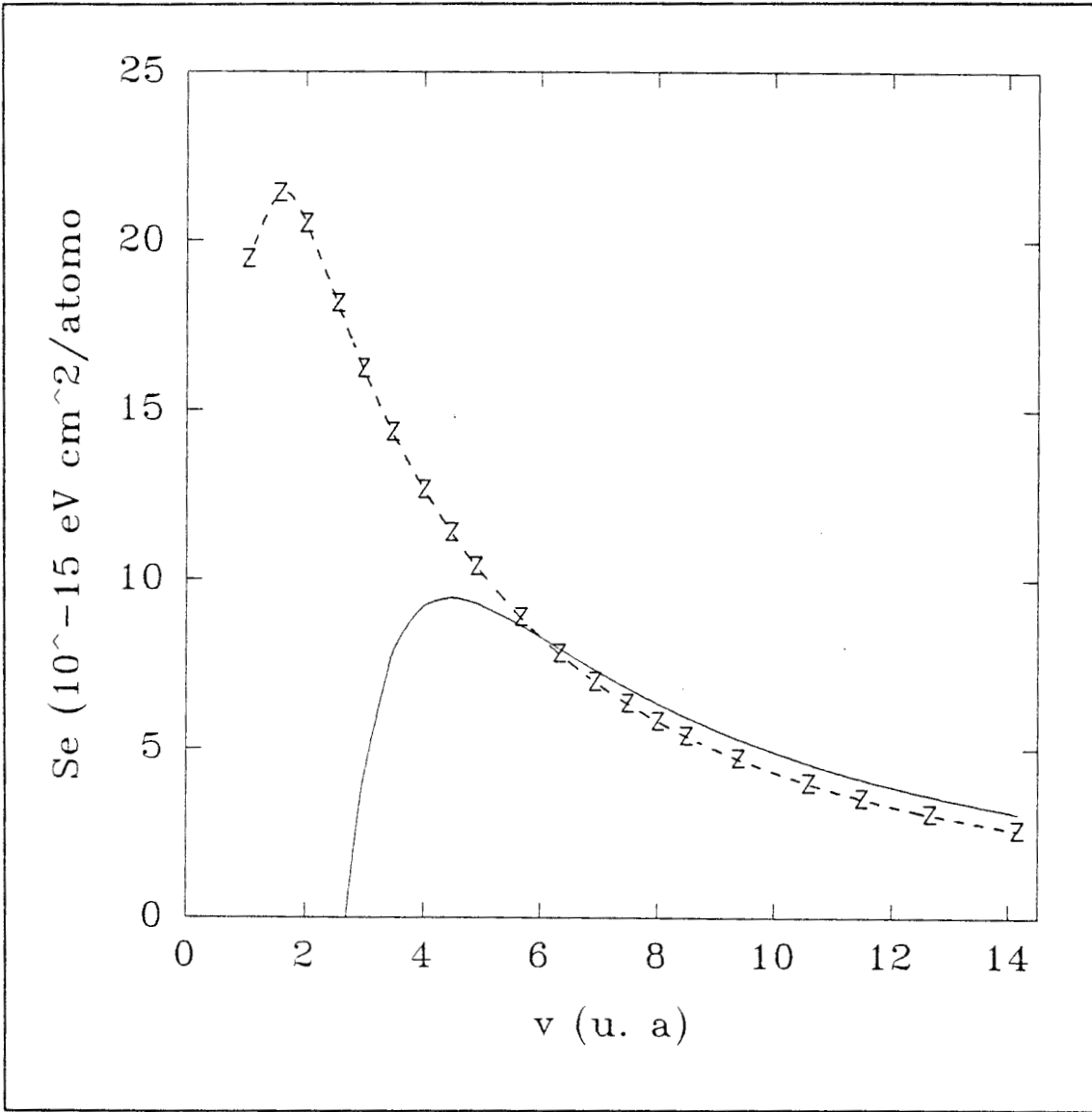


Figura 2.3 Comparación de la predicción del modelo de Bohr con los resultados experimentales para protones incidentes en Aluminio (Al). -z- representa los valores semi-empíricos del programa TRIM-91 [15] y la línea continua el modelo de Bohr.

$$\langle w_0 \rangle = 21.9697 \frac{v_0}{a_0}$$

por lo tanto

$$S_e (H^+ \rightarrow Al) = \frac{124.44}{u^2} \ln \left[\frac{u^3}{19.565} \right]$$

En la figura (2.3) se compara la predicción de este modelo con los valores dados por el programa TRIM91 [15] el cuál se basa en un ajuste a valores experimentales. En ésta figura, se observa que para blancos multielectrónicos la sección de frenamiento se sobre-estima en comparación con el experimento. Para blancos ligeros el modelo de Bohr da una descripción razonable de la pérdida de energía, aunque se han utilizado ideas clásicas.

Sin embargo, dada la naturaleza ondulatoria del proyectil y del principio de incertidumbre, los efectos cuánticos son importantes en esta región, por lo que es necesario tomarlos en cuenta en la transferencia de energía para evitar sobre-estimar la sección de frenamiento. Este análisis lo llevo a cabo por primera vez H. Bethe como lo veremos a continuación.

2.2.2 Modelo de Bethe [2,4,16,17]

Con el surgimiento de las primeras ideas cuánticas sobre el principio de incertidumbre de Heisenberg, la dualidad onda-partícula de De Broglie, así como las ideas de cuantización de la energía, se hizo necesario modificar los conceptos clásicos de trayectoria y parámetro de impacto como cantidades bien definidas tal y como se utilizaron en el capítulo I.

Fue en 1930 cuando Hans Bethe [16] proporcionó la primera solución cuántica al problema. La idea fundamental es el uso de

transferencia de ímpetu del proyectil a los electrones del blanco como el factor dinámico que interviene en la pérdida de energía, en contraste con el tratamiento de Bohr.

En éste modelo, se supone la interacción del proyectil con el núcleo y los electrones del blanco como una perturbación al sistema aislado. Se supone que el proyectil es lo suficientemente rápido de modo que su ímpetu no cambia apreciablemente en la dirección transversal de movimiento. Así, el Hamiltoniano que describe al sistema es:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_p + \hat{H}_b + V \\ &= \hat{H}_0 + V\end{aligned}\quad (2.21)$$

donde H_p es el hamiltoniano del proyectil, H_b el del blanco y V es el potencial de interacción y está dado por [ver figura (2.4)]:

$$V = \frac{Z_p Z_b e^2}{R} - Z_p e^2 \sum_{j=1}^{Z_b} \frac{1}{|R - r_j|} \quad , \quad (2.22)$$

\hat{H}_0 es el Hamiltoniano del sistema sin perturbar.

El problema consiste en resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo durante la colisión i.e.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\hat{H}_p + \hat{H}_b + V \right) \psi \quad ; \quad (2.23)$$

para resolver esta ecuación se utilizará teoría de perturbaciones dependiente del tiempo considerando a V como una perturbación al sistema libre \hat{H}_p y \hat{H}_b [18-20]. La función de onda de el sistema, $\psi(t)$, se supone bien conocida en el tiempo t_0 antes de la colisión. La función $\psi(t_0)$ es el producto de una función de onda atómica para \hat{H}_b y un paquete de onda para H_p el cual representa la partícula incidente (proyectil). Antes de la colisión el sistema está descrito por la siguiente ecuación:

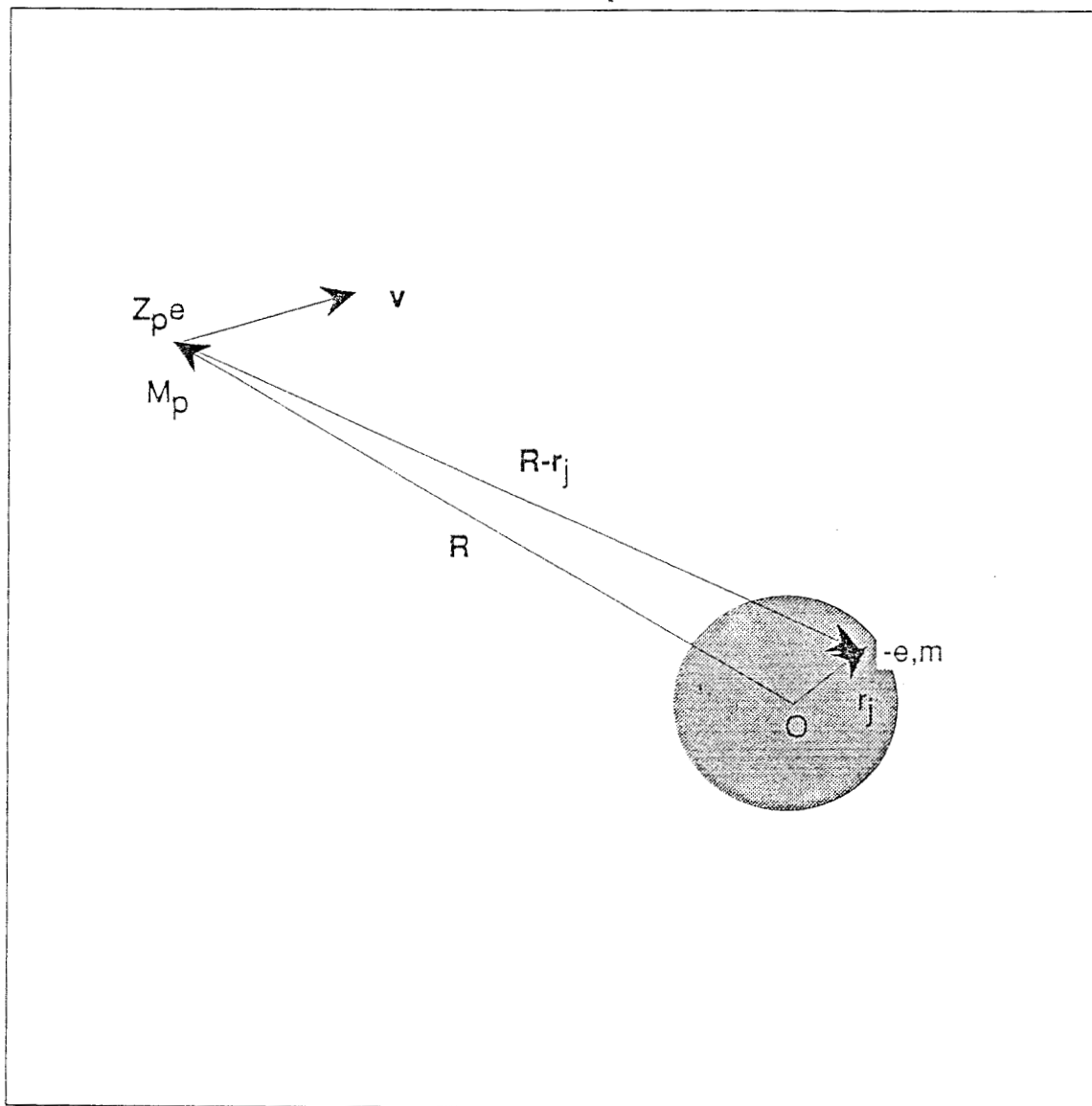


Figura 2.4 Interacción entre proyectil y blanco. $-e$ es un electrón de masa m ligado al núcleo O a una distancia r_j de éste, $Z_p e$ la carga del proyectil de masa M_p incidiendo con velocidad \mathbf{v} y que se encuentra a una distancia R del núcleo O del blanco. $R - r_j$ es el vector relativo entre el electrón del blanco y el proyectil.

$$\hat{H}_0 \psi_n = E_n u_n \quad (2.24)$$

con \hat{H}_0 dado por (2.21) y donde:

$$\psi(t_0) = u_{n_0} = |n_0\rangle$$

y

$$|n\rangle = |\text{proyectil}\rangle |\text{blanco}\rangle$$

donde n representa el estado en que se encuentra todo el sistema. Al resolver la ecuación (2.24) se encuentra que para un proyectil incidiendo libremente con un vector de propagación \mathbf{k}_0 su función de onda es:

$$|\text{proyectil}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} \quad (2.25)$$

y para el blanco encontramos que en la aproximación de electrones independientes:

$$|\text{blanco}\rangle = \phi_n(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{Z_b}) = \phi_1(\mathbf{r}_1) \dots \phi_{Z_b}(\mathbf{r}_{Z_b}) \quad (2.26)$$

con \mathbf{r}_i los vectores de posición de los Z_b electrones del blanco y ϕ_n la función de onda electrónica del blanco para el estado del sistema n y ϕ_i la función de onda del i -ésimo electrón. Además, por conservación de la energía se cumple que:

$$E_n = \epsilon_{n_p} + \epsilon_{n_b} \quad (2.27)$$

donde ϵ_{n_p} y ϵ_{n_b} son las energías del blanco y proyectil respectivamente. Así, expandiendo $\psi(t)$ como una combinación lineal de eigenfunciones de \hat{H}_0 encontramos que:

$$\psi(t) = \sum_n a_n(t) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |n\rangle \quad (2.28)$$

sustituyendo en (2.23) y utilizando propiedades de ortogonalidad, encontramos que los coeficientes a_k están dados por:

$$i\hbar \frac{\partial a_k}{\partial t} = \sum_n \langle k | V | n \rangle e^{iW_{kn}(t-t_0)} a_n(t) \quad (2.29)$$

donde:

$$W_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar}$$

en la cual n denota al estado inicial y k el estado final del sistema en la colisión. Suponiendo que antes de la colisión el sistema no estaba perturbado y estaba en el estado n_0 entonces

$$a_{n_0}(t) \approx 1 \quad \text{y} \quad |a_n(t)| \ll 1 \quad \text{para} \quad n \neq n_0 \quad ; \quad (2.30)$$

así, incluyendo el termino $n = n_0$ en el lado derecho de (2.29) obtenemos que para un potencial independiente del tiempo :

$$a_n(t) = \frac{-\langle k | V | n_0 \rangle}{\hbar W_{kn_0}} \left[e^{iW_{kn_0}(t-t_0)} - 1 \right] \quad (2.31)$$

para $k \neq n_0$ de acuerdo a la ecuación (2.28) la cantidad $|a_k(t)|^2$ representa la probabilidad de encontrar al sistema en el estado k al tiempo t si inicialmente se encontraba en el estado n_0 . Así, la probabilidad de transición por unidad de tiempo al estado k esta dada por:

$$W_k(t) = \frac{d}{dt} |a_k(t)|^2 = \frac{2}{\hbar^2} |\langle k | V | n_0 \rangle|^2 \frac{\text{sen } W_{kn_0}(t-t_0)}{W_{kn_0}} \quad (2.32)$$

como vemos esta razón de transición depende del potencial perturbativo del sistema. Si el tiempo en el cual vamos a analizar la transferencia de energía, es muy grande, podemos utilizar la definición de la función delta [20]. Así, en el límite para $t \rightarrow \infty$ obtenemos:

$$W_k = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k | V | n_0 \rangle|^2 \delta(E_k - E_{n_0}) \quad (2.33)$$

que es la Regla de Oro de Fermi [18-20]. La función delta garantiza que la energía total del sistema sea la misma antes y

después de la colisión. Así, de la ecuación (2.27) y cambiando el estado final por n para el blanco y utilizando el vector \mathbf{k} del proyectil a partir de la relación de De Broglie, expresamos la conservación de la energía como:

$$\varepsilon_{n_0} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2M_p} = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2M_p} \quad (2.34)$$

y los estados $|n_0\rangle$ y $|n\rangle$ son producto de funciones de la forma [ver ecuación (2.25) y (2.26)]

$$|n_0\rangle = \phi_{n_0}(\mathbf{r}_i) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{R}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} |n_0 \mathbf{k}_0\rangle$$

$$|n\rangle = \phi_n(\mathbf{r}_i) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} |n \mathbf{k}\rangle \quad (2.35)$$

Si el proyectil no es capturado por el átomo, su energía está en el continuo y emergerá después de la colisión dentro de un ángulo sólido $d\Omega$ alrededor de \mathbf{k} . Así, la energía total del sistema está en el continuo y es:

$$E_n = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2M_p} \quad , \quad (2.36)$$

por lo tanto, relacionando el volumen del espacio momental con el cambio de energía en el sistema tenemos que:

$$k^2 dk d\Omega = d^3 k = d\Omega \frac{k M_p}{\hbar^2} dE_n \quad .$$

Integrando (2.33) sobre d^3k y con la notación de la ecuación (2.35) obtenemos la probabilidad de transición por unidad de tiempo y ángulo sólido del estado $n_0 \mathbf{k}_0$ al estado $n \mathbf{k}$ del sistema con momento entre p y $p+dp$

$$dW_{n, \mathbf{k}} = \frac{k M_p}{\hbar^3 (2\pi)^5} | \langle n \mathbf{k} | V | n_0 \mathbf{k}_0 \rangle |^2 d\Omega \quad . \quad (2.37)$$

La sección eficaz diferencial por unidad de ángulo sólido $d\sigma_n(\vartheta, \varphi)$ para excitar al átomo al estado n con el proyectil saliendo de la colisión en la dirección (ϑ, φ) definida por el vector \mathbf{k} , está dado por (2.37) dividida por el flujo incidente de partículas, [ver ecuación (1.32)] el cual está dado por:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{\hbar k_0}{M_p} ;$$

por lo que en terminos de las velocidades inicial y final [$\hbar k_0/M_p = v_i$ y $\hbar k/M_p = v_f$] finalmente encontramos:

$$d\sigma_n(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{M_p^2 v_f}{\hbar^4 v_i} |\langle n\mathbf{k} | V | n_0 k_0 \rangle|^2 d\Omega . \quad (2.38)$$

De la ecuación (2.34) la energía transferida por el proyectil, es la energía ganada por el blanco; así, la sección de frenamiento nos queda de las ecuaciones (1.41) y (2.38) como:

$$S_e = \sum_n \int (\epsilon_n - \epsilon_{n_0}) \frac{d\sigma_n}{d\Omega} d\Omega \quad (2.39)$$

donde la suma es sobre todos los posibles estados del blanco.

Analicemos el elemento de matriz que aparece en la ecuación (2.38). Usando (2.22) y (2.35) tenemos que:

$$\langle n\mathbf{k} | V | n_0 k_0 \rangle = \int d^3 r_1, \dots \int d^3 r_{z_b} \int d^3 R \phi_n^*(r_1 \dots r_{z_b}) \phi_{n_0}(r_1 \dots r_{z_b}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} \left[\frac{Z_p Z_b e^2}{R} - \sum_{j=1}^{Z_b} \frac{Z_p e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_j|} \right] \quad (2.40)$$

donde $\mathbf{q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$ es el momento transferido por el proyectil. Como las funciones de onda ϕ_n están ortonormalizadas y no dependen de R , entonces:

$$\langle nk | V | n_0 k_0 \rangle = Z_p e^2 \int d^3 r, \dots \int d^3 r_{z_b} \phi_n^* \phi_{n_0} \sum_i \int \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|} d^3 R ,$$

esto nos dice que el núcleo no contribuye en la sección eficaz por lo tanto, tampoco a la sección de frenamiento en esta aproximación, lo cual es de esperarse puesto que las funciones de onda ϕ 's solo representan estados electronicos del blanco y no nucleares. La última integral se puede resolver usando la identidad [19]:

$$e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} = - \frac{1}{q^2} \nabla^2 \exp (i \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) \quad (2.41)$$

que sustituyendo, haciendo integraciones por partes y considerando el hecho de que:

$$\nabla^2 \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|} = - 4\pi \delta(\mathbf{R} - \mathbf{r}_i)$$

obtenemos:

$$\langle n | V | n_0 \rangle = -4\pi Z_p e^2 q^{-2} \int d^3 r_i \dots \int d^3 r_{z_b} \phi_n^* \phi_{n_0} \left(\sum_j e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} \right)$$

así, la sección de frenamiento electrónico es:

$$S_e = \frac{4 Z_p^2 e^4 M_p^2}{h^4 v_i} \sum_n \int d\Omega (\epsilon_n - \epsilon_{n_0}) \frac{v_f}{q^4} \quad (2.42)$$

$$\left| \langle n | \sum_{j=1}^{Z_b} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} | n_0 \rangle \right|^2 .$$

Como vemos, la sección de frenamiento depende de los estados n y n_0 que sólo contienen los grados de libertad de los electrones del blanco, i.e. depende de la estructura electrónica del blanco.

El valor de q no ha sido expresado explícitamente en términos de las variables de suma e integración, para hacer esto, notemos que q está únicamente determinada por la energía final del átomo blanco ϵ_n y por la diferencial de ángulo sólido $d\Omega$, por lo tanto, q es función de k al igual que de ϵ_n . La dirección de k está determinada por (ϑ, ϕ) , y su magnitud se obtiene de la conservación de la energía [ecuación (2.34)]. De la figura (2.5) encontramos que para un estado final ϵ_n , k tiene una magnitud fija y por lo tanto la podemos relacionar con el ángulo de dispersión ϑ puesto que:

$$q^2 = k^2 + k_0^2 - 2kk_0 \cos \vartheta \quad (2.43)$$

así, para k fijas, podemos relacionar a q con el ángulo sólido $d\Omega$ obteniendo:

$$d\Omega = \frac{2\pi q dq}{k k_0} \quad (2.44)$$

por lo que la sección de frenamiento resulta:

$$S_e = \frac{8\pi Z_p^2 e^4}{\hbar^2 v_i^2} \sum_n \int \frac{dq}{q^3} (\epsilon_n - \epsilon_{n_0}) \left| \langle n | \sum_{j=1}^{Z_b} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} | n_0 \rangle \right| \quad (2.45)$$

Ahora lo único que nos resta es determinar los límites de integración para q . Tomando k fijo obtenemos directamente de la figura (2.5):

$$q_{\min} = k_0 - k$$

Como inicialmente el átomo estaba en el estado base, k_0 debe ser mucho más grande que k , de tal manera que la mínima energía cinética perdida por el proyectil debe ser suficiente para producir una excitación en el electrón desde el estado inicial ϵ_{n_0} al estado final ϵ_n , así, usando $|k_0 - k| \ll |k_0|$ y la conservación de energía (2.34):

$$\frac{\hbar^2}{2M_p} (k_0^2 - k^2) = \epsilon_n - \epsilon_{n_0}$$

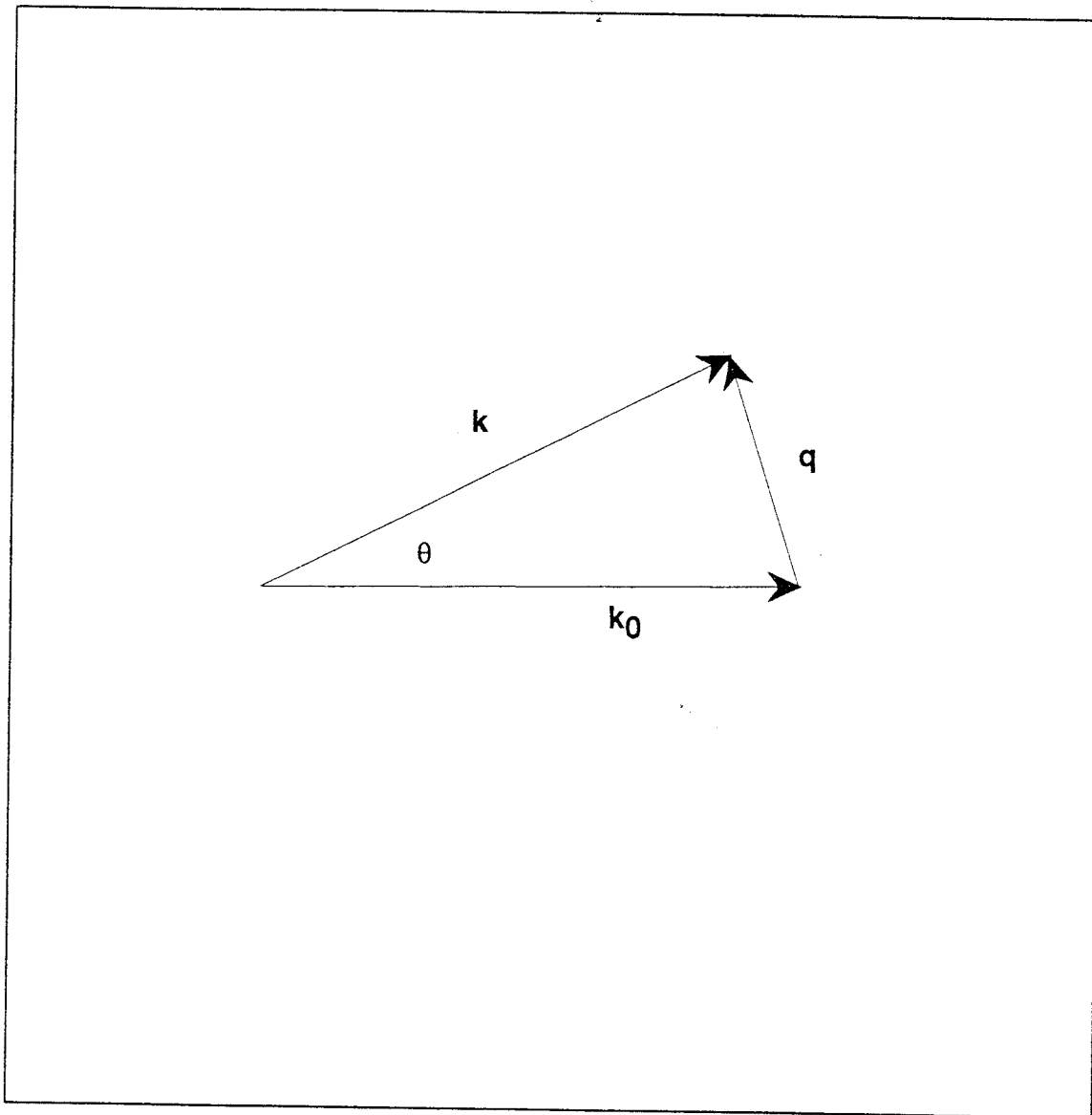


Figura 2.5 Transferencia de momento q del proyectil al blanco. k_0 es el momento inicial del proyectil, k es el momento final del proyectil y q es el momento transferido por éste al blanco.

tenemos:

$$\frac{\hbar^2 k_0 q_{\min}}{M_p} \approx \varepsilon_n - \varepsilon_{n_0}$$

o

$$q_{\min} = \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_{n_0}}{\hbar v_i} = \frac{w_{nn_0}}{v_i} \quad (2.46)$$

El siguiente paso es calcular el límite de integración superior (q_{\max}); si lo hacemos de la misma manera obtendríamos $q_{\max} = k_0 + k$. Sin embargo, como veremos ahora, el elemento de matriz de la ecuación (2.42) tiende a cero para valores grandes de q , y consecuentemente la integración sobre q se corta en un valor el cual es mucho más pequeño que $k_0 + k$.

Denotando por B a una distancia atómica típica (por ejemplo, el tamaño del átomo) entonces \hbar/B corresponderá al momento promedio Q . La condición $q > Q$ corresponde a la situación en la cual el momento transferido es grande comparado con el momento electrónico, así el elemento de matriz es:

$$\begin{aligned} \langle n | \sum_{j=1}^{Z_b} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} | n_0 \rangle &= \sum_{j=1}^{Z_b} \int d^3 \mathbf{r}_1 \varphi_1^*(\mathbf{r}_1) \varphi_1^*(\mathbf{r}_1) \dots \\ &\dots \int d^3 \mathbf{r}_j \varphi_j^*(\mathbf{r}_j) \varphi_j^*(\mathbf{r}_j) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} \dots \\ &\dots \int d^3 \mathbf{r}_{z_b} \varphi_{z_b}^*(\mathbf{r}_{z_b}) \varphi_{z_b}^*(\mathbf{r}_{z_b}) \end{aligned}$$

como vemos, el elemento de matriz es nulo al menos que el estado final e inicial del blanco difieran por un sólo orbital. Esto es para todos los valores de q . Si el estado final e inicial difieren en el k -ésimo orbital tenemos:

$$\langle n | \sum_{I=1}^{Z_b} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_I} | n_0 \rangle = \int d^3 \mathbf{r}_k \varphi_k^*(\mathbf{r}_k) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_k} \varphi_k^*(\mathbf{r}_k) \quad (2.47)$$

si consideramos la situación en la cual $q \gg Q$, la exponencial oscila rápidamente sobre la región en la cual φ_k° es grande. El elemento de matriz es muy pequeño, al menos que el estado final cancele ésta oscilación i.e.:

$$\varphi_k(\mathbf{r}_k) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_k} \quad (2.48)$$

en otras palabras, un solo electrón es expulsado con el momento total $\hbar q$ tomado del proyectil. Así, hemos encontrado que el intercambio de momento y energía toma lugar entre el proyectil y un sólo electrón del blanco.

Para un valor fijo de q sólo un ángulo de dispersión es posible y satisface la relación (2.43) y la conservación de energía del electrón expulsado:

$$\frac{\hbar^2 k_0^2}{2M_p} = \frac{\hbar^2 k^2}{2M_p} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e} \quad (2.49)$$

donde el último termino es la energía ganada por el electrón del blanco en la ionización. El valor máximo de q ocurre para la situación de una colisión frontal ($\vartheta = \pi$):

$$q_{\max} = k_0 + k$$

por lo tanto, eliminando k entre estas dos ecuaciones tenemos:

$$\hbar q_{\max} = \frac{2 \hbar m_e k_0}{M_p + m_e}$$

Si el proyectil es muy pesado en comparación con el electrón entonces

$$q_{\max} = \frac{2 m_e}{M_p} k_0 \quad (2.50)$$

que es un valor mucho más pequeño que el valor $\approx 2k_0$ (colisión elástica $k \approx k_0$).

pero sólo un electrón es ionizado a la vez, por lo que sólo el término $i=j$, que es el que cancela la oscilación, contribuye, así:

$$\sum_n (\varepsilon_n - \varepsilon_{n_0}) \left| \langle n | \sum_{i=1}^{Z_b} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} | n_0 \rangle \right|^2 = \frac{Z_b \hbar^2 q^2}{2m_e}; \quad (2.54)$$

esta ecuación se puede escribir como una regla de suma:

$$\sum_n F_{nn_0}(\mathbf{q}) = 1$$

donde:

$$F_{nn_0} = \frac{1}{Z_b} \frac{2m_e}{\hbar^2 q^2} (\varepsilon_n - \varepsilon_{n_0}) \left| \langle n | \sum_{i=1}^{Z_b} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} | n_0 \rangle \right|^2. \quad (2.55)$$

A la cantidad F_{nn_0} se le conoce como tensión de oscilador generalizado [16,21]. Sustituyendo la ecuación (2.54) en (2.53) e integrando encontramos que para transferencias grandes de momento:

$$I_{q>Q} = Z_b \frac{\hbar^2}{2m_e} \ln \frac{2m_e k_0}{M_p Q} \quad (2.56)$$

Ahora necesitamos calcular la integral para transferencias de momentos pequeños ($q < Q$) i.e. la integral (2.52). No podemos utilizar el resultado (2.54) puesto que el índice de integración depende de n , con lo cual no podemos intercambiar la sumatoria con la integral. Así, en vez de utilizar este resultado, hacemos uso del hecho de que el momento transferido es muy pequeño i.e. que el argumento de la exponencial es pequeño. Así:

$$\left| \langle n | \sum_{i=1}^{Z_b} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} | n_0 \rangle \right|^2 \cong \left| q \langle n | \sum_{i=1}^{Z_b} \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{r}_i | n_0 \rangle \right|^2$$

donde $\hat{\mathbf{e}}$ es un vector unitario paralelo a \mathbf{q} . Sustituyendo este resultado en (2.55), tenemos:

$$\lim_{q \rightarrow 0} F_{nn_0} = \frac{1}{Z_b} \frac{2m_e}{\hbar^2} (\epsilon_n - \epsilon_{n_0}) \left| \langle n | \sum_{i=1}^{Z_b} \hat{e} \cdot \mathbf{r}_i | n_0 \rangle \right|^2 \quad (2.57)$$

como vemos, éste valor es independiente de la transferencia de momento y sólo depende de la excitación del átomo (para $q < Q$). Empleando (2.52) e integrando obtenemos para transferencias de momento pequeñas:

$$I_{q < Q} = \frac{Z_b \hbar^2}{2m} \sum_n \lim_{q \rightarrow 0} F_{nn_0} \ln \frac{Qv}{w_{nn_0}} \quad (2.58)$$

El término $|\langle n | \sum \mathbf{e} \cdot \mathbf{r}_i | n_0 \rangle|^2$ en (2.57) es la magnitud al cuadrado del elemento de matriz asociado al momento dipolar i.e. es el término asociado a transiciones dipolares. Dado que $\langle \mathbf{r} \rangle / 3 = \langle x \rangle = \langle y \rangle = \langle z \rangle$ entonces:

$$|\langle n | \sum \mathbf{e} \cdot \mathbf{r}_i | n_0 \rangle|^2 = \frac{1}{3} |\langle n | \sum_{i=1}^{Z_b} \mathbf{r}_i | n_0 \rangle|^2$$

Así, la ecuación (2.58) se lee:

$$\begin{aligned} I_{q < Q} &= \sum_n \frac{1}{3} (\epsilon_n - \epsilon_{n_0}) \left| \langle n | \sum_{i=1}^{Z_b} \mathbf{r}_i | n_0 \rangle \right|^2 \ln \frac{Qv}{w_{nn_0}} \\ &= \frac{Z_b \hbar^2}{2m_e} \sum_n f_{nn_0} \ln \frac{Qv}{w_{nn_0}} \end{aligned} \quad (2.59)$$

donde los coeficientes f_{nn_0} corresponden a la Tensión de Oscilador Dipolar que están definidos como:

$$f_{nn_0} = \frac{1}{Z} \frac{2}{3} \frac{m}{\hbar^2} (\epsilon_n - \epsilon_{n_0}) \left| \langle n | \sum \mathbf{r}_i | n_0 \rangle \right|^2 \quad (2.60)$$

y como vemos, es un caso particular de la Tensión de Oscilador generalizado i.e.:

$$f_{nn_0} = \lim_{q \rightarrow 0} F_{nn_0}(q)$$

La expresión (2.59) usualmente se representa en la forma:

$$I_{q < 0} = Z_b \frac{\hbar^2}{2m} \ln \frac{\hbar Qv}{\langle I \rangle} \quad (2.61)$$

donde $\langle I \rangle$ es la energía media de ionización definida como:

$$\ln \langle I \rangle = \sum_n f_{nn_0} \ln \hbar w_{nn_0} .$$

Sustituyendo (2.56) y (2.61) en (2.51) finalmente obtenemos la sección de frenamiento electrónico en el tratamiento cuántico como:

$$S_e = \frac{4\pi Z_p^2 Z_b e^4}{m_e v^2} \ln \left(\frac{2m_e v^2}{\langle I \rangle} \right) \quad (2.62)$$

que es la fórmula de Bethe.

La diferencia principal en la derivación de la sección de frenamiento debido a Bohr y Bethe está en el uso de ideas clásicas en el primero y la teoría cuántica de la dispersión en el segundo. Ambos esquemas tienen una gran semejanza en el uso, de máximo y mínimo parámetro de impacto en el primero, y máximo y mínimo momento transferido en el segundo. Hay que tener en cuenta que Bethe obtuvo éste resultado en base a la primera aproximación de Born [19] *i.e.* habrá que hacer correcciones para aquellas capas en las que la velocidad orbital v_0 es mayor o comparable a la velocidad del proyectil.

Haciendo como ejemplo protones sobre Aluminio encontramos que $\langle I \rangle = 163$ e.V. [8] como energía media de ionización para el Al. En la figura (2.6) se compara las predicciones de la teoría de Bethe y el ajuste experimental de Ziegler [15], de esto se ve que existe mayor acuerdo de Bethe con el experimento con un error $\approx 2\%$ en la región de altas energías.

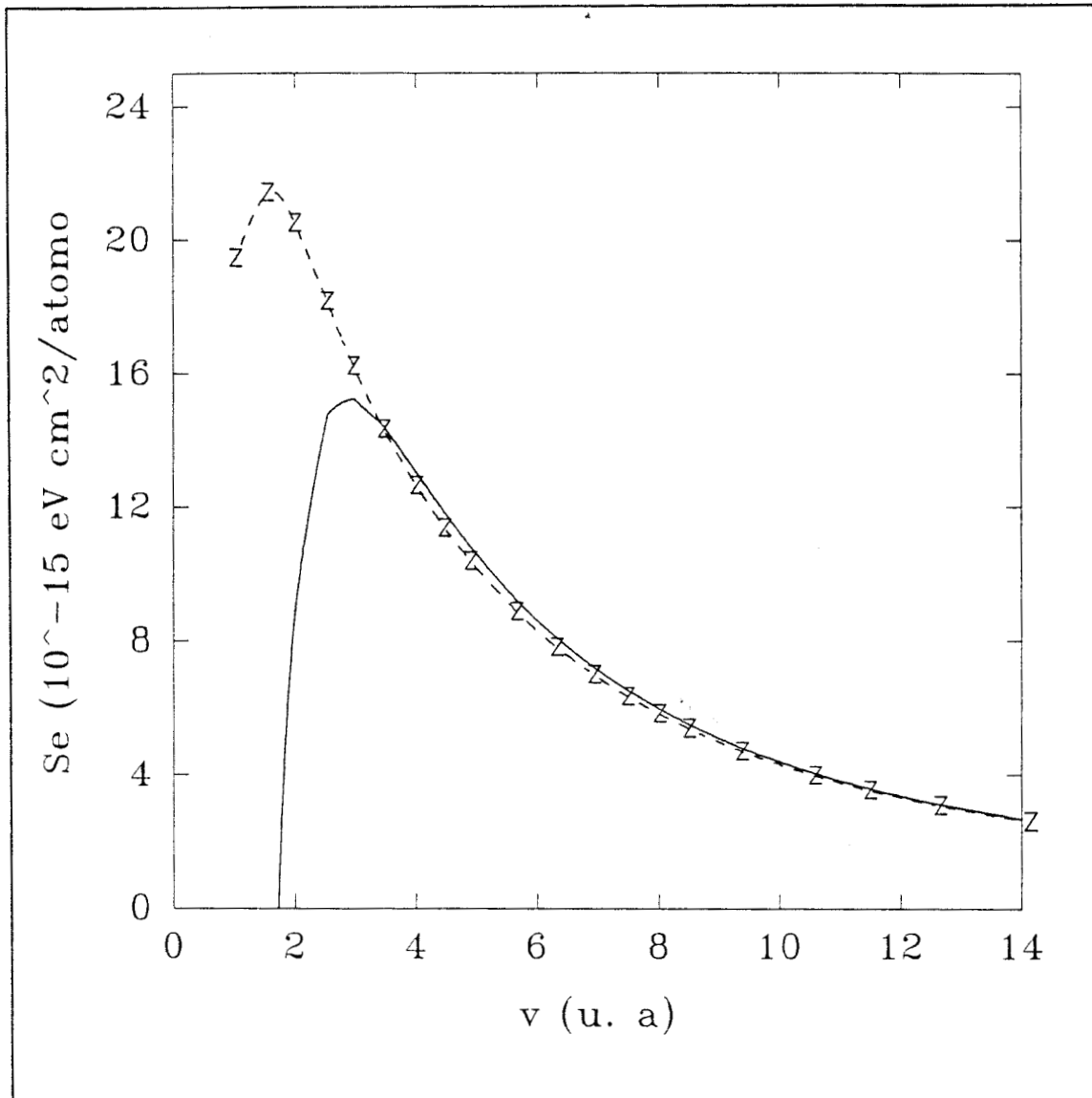


Figura 2.6 Predicciones del modelo de Bethe para protones incidentes en Aluminio comparado con los resultados del programa TRIM-91 [15]. Observese la región de validez del modelo de Bethe y el mejor acuerdo que existe con el experimento en comparación al modelo de Bohr (vease figura (2.3)).

A bajas energías la pérdida de energía cae rápidamente. Esto se debe a que la velocidad de los electrones de las capas internas del blanco es comparable a la del proyectil y no vale ya la primera aproximación de Born, conforme crece Z_b , por lo tanto, se deben incluir correcciones a capas internas en el tratamiento de Bethe. Esto lo llevo a cabo el propio Bethe [17] y posteriormente Livingston y Bethe [22]. Así, definiendo a L como el número de frenamiento, la ecuación (2.62) se puede escribir como:

$$S_e = \frac{4\pi Z_p^2 e^4}{m_e v^2} L(v)$$

en general considerando las correcciones por capas, el número de frenamiento se escribe como [23]:

$$L(v) = Z_b \ln \left(\frac{2m_e v^2}{\langle I \rangle} \right) - \sum C_i \quad i=K, L, M, \dots$$

donde C_i denota la correspondiente corrección de las capas internas del blanco. Sin embargo, la expresión analítica para las C_i es difícil de obtener. En particular Fano [23] encuentra que dicha corrección está dada por:

$$C = \sum C_i \approx Z_b^{1.4} \left(\frac{v_0}{v} \right)^2 + Z_b^4 \left(\frac{v_0}{v} \right)^4$$

donde v_0 es la velocidad de Bohr.

En los análisis llevados a cabo hasta aquí, hemos considerado que el proyectil se mantiene con la misma carga Z_p . Sin embargo, conforme este penetra, esta va cambiando hasta adquirir un valor promedio. En la siguiente sección analizaremos qué sucede para la región de energías intermedias.

2.3 REGION DE ENERGIAS INTERMEDIAS

En las secciones anteriores hemos discutido los procesos que conducen a excitación e ionización de los átomos del blanco en colisiones con partículas cargadas de alta energía (no-relativista). Además el proyectil se ha considerado como una partícula sin estructura, de carga $Z_p e$ durante toda la secuencia de las colisiones. Aunque este es el caso para velocidades del proyectil mucho más grandes que las velocidades orbitales de los electrones del blanco, durante la secuencia de colisiones que sufre este, va disminuyendo su velocidad, con lo cual aumenta la probabilidad de captura de electrones. Es claro que el tratamiento teórico para la transición de altas velocidades a bajas velocidades debe considerar el conocimiento de las probabilidades de captura y pérdida de electrones por el proyectil y el blanco, mas el mecanismo de promoción electrónica concerniente a la estructura cuasi-molecular del sistema proyectil-blanco a bajas velocidades debido a que el proyectil puede llegar a termalizarse en el medio y combinarse químicamente con los átomos del material. En esta sección revisaremos brevemente algunos de los modelos desarrollados para entender el estado de carga del proyectil conforme penetra.

2.3.1 ESTADO DE CARGA DEL PROYECTIL

Los protones penetrando a través de materia se pueden considerar como cargas puntuales, suponiendo que su velocidad es más grande que la velocidad orbital v_e de los electrones del blanco. Sin embargo, para iones pesados debemos distinguir entre carga nuclear de el ion, $Z_p e$, y la carga electrónica q , donde q es el número de electrones que tendría el proyectil, incluyendo aquellos debido al intercambio de carga con el medio en el que penetra. La carga del proyectil es una cantidad fluctuante y su distribución está determinada por el proceso de pérdida y captura de electrones. Por lo general se establece un equilibrio dinámico entre pérdida y captura de electrones, esto hace posible la introducción de un estado de carga característico del proyectil $Z^* e$ para el cual $Z^* e = Z_p e - q$.

En general q depende principalmente de Z_p y Z_b , la velocidad del proyectil y la densidad del medio; lo cual requiere un cálculo detallado de la sección eficaz (i.e. la probabilidad) para pérdida y captura de electrones [4].

Sin embargo, el estado de carga promedio del proyectil se puede estimar con razonable certeza, suponiendo que aquellos electrones del proyectil con velocidad orbital v_e menor que la velocidad del proyectil v son arrancados despues de una colisión, mientras que los electrones con velocidad orbital v_e mayor que la del proyectil, se mantienen durante la colisión. Este es el argumento de adiabaticidad de Bohr [7] el cual nos permite estimar el estado de carga promedio del proyectil. En este modelo el estado de carga promedio Z^* es igual al número de electrones con velocidad orbital $v_e < v$. Para calcular Z^* haremos uso del modelo del átomo de Thomas-Fermi [24] el cual se describe en el apéndice A, de acuerdo al trabajo realizado por Bohr.

El estado de carga promedio está dado por:

$$- Z^* e = \int_{r_0}^{\infty} d^3r \rho(r) \quad (2.63)$$

donde $\rho(r)$ es la densidad de carga en el modelo de Tomas-Fermi y r_0 es la mínima distancia para la cual $v_e \leq v$. Además:

$$\frac{1}{2} \frac{Z^* e^2}{r_0} \cong \frac{1}{2} m_e v^2 \quad (2.64)$$

las dos últimas ecuaciones se pueden resolver para r_0 y Z^* si se conoce $\rho(r)$. El potencial de Thomas-Fermi para el átomo se puede escribir como [acuación (A.10)]:

$$V(r) = \frac{Z_p e}{r} \phi_z \left(\frac{r}{a} \right) \quad (2.65)$$

donde $\phi_z(x)$ es la función de apantallamiento y a es el radio de apantallamiento. Usando la ecuación de Poisson para la densidad de carga:

$$\nabla^2 V = -4\pi \rho(r)$$

se puede encontrar $\rho(r)$ para el átomo. Así, suponiendo simetría esférica tenemos que:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial V}{\partial r} \right) = -4\pi \rho(r)$$

sustituyendo (2.65):

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{Z_p e}{r} \phi_z \right) \right) = -4\pi \rho(r)$$

de donde:

$$\rho(r) = - \frac{Z_p e d^2}{4\pi r dr^2} \phi_z \left(\frac{r}{a} \right)$$

usando este resultado en la ecuación (2.63) obtenemos:

$$\frac{Z^*}{Z_p} = \int_{r_0/a}^{\infty} x \frac{d^2}{dx^2} \phi_z(x) dx \quad (2.66)$$

donde se ha hecho el cambio de variable $x=r/a$.

Para valores no tan grandes de Z_p podemos usar series de potencias para desarrollar el potencial de apantallamiento, así [8]:

$$\phi_z \left(\frac{r}{a} \right) = \phi_z(x) \cong \frac{k_s}{s} x^{1-s} \quad s = 1, 2, 3, \dots$$

y sustituyendo en (2.66):

$$\int_{r_0/a}^{\infty} x (1-s)(1-s-1) \frac{k_s}{s} x^{1-s-2} dx = \frac{Z^*}{Z_p} = k_s \left(\frac{r_0}{a} \right)^{1-s}$$

ó

$$\frac{r_0}{a} = \left(\frac{Z^*}{k_s Z_p} \right)^{\frac{1}{1-s}}$$

Eliminando r_0 con ayuda de (2.64) obtenemos:

$$\frac{Z^* e^2}{a \left(\frac{Z^*}{k Z} \right)^{1/(1-s)}} = m_e v^2$$

por lo tanto

$$Z^* = \left(\frac{a m_e v^2}{e^2} \right)^{\frac{s-1}{s}} \left(k_s Z_p \right)^{1/s}$$

Por otra parte, $a \cong a_0 Z^{-1/3}$ (ver apéndice A) por lo que:

$$Z^* \cong \left(\frac{v}{v_0} \right)^{\frac{2(S-1)}{S}} Z_p^{(4-s)/3s}$$

Para $1 \ll Z^* \leq \frac{Z_p}{2}$ tenemos que $s \approx 2$ i.e. el potencial de apantallamiento de Thomas-Fermi va como $1/x$, así:

$$Z^* \approx \frac{v}{v_0} Z_p^{1/3} \quad (2.67)$$

que es la fórmula que obtuvo Bohr [7] para la carga efectiva del proyectil en la región de bajas velocidades y donde v_0 es la velocidad de Bohr.

Aunque la expresión (2.67) es simple, muestra un acuerdo razonable con los resultados experimentales sobre todo en el estado de carga de fragmentos de fisión en gases [7].

Por otro lado, podemos continuar con la idea original de Bohr para el cálculo de la carga efectiva, tratando de resolver el problema analíticamente y de forma autoconsistente con el principio de adiabaticidad de Bohr. Para esto, de la ecuación (2.66) podemos integrar por partes obteniendo:

$$Z^* = Z_p \left\{ x \frac{d\phi_z}{dx} - \phi_z(x) \right\} \Big|_{r_0/a}^{\infty} \quad (2.68)$$

lo unico que necesitamos para evaluar la carga efectiva es una expresión para el potencial de apantallamiento de Thomas-Fermi. Utilizando la solución aproximada [apéndice A] dada por Kerner [25]:

$$\phi_z(x) = \frac{1}{1 + B x} \quad (2.69)$$

con $B=1.3679$. Usando (2.69) en la ecuación (2.68) obtenemos:

$$Z^* = Z_p \frac{\left(1 + 2B \frac{r_0}{a}\right)}{\left(1 + B \frac{r_0}{a}\right)^2} .$$

Necesitamos conocer el radio r_0 a partir del cual los electrones tienen menor o igual velocidad que el proyectil (criterio adiabático de Bohr). La velocidad de los electrones a una distancia r está dada por [Apéndice A]:

$$v_e(x) = \left(\frac{2e^2 Z_p}{m_e a} \frac{\phi_Z(x)}{x} \right)^{1/2}$$

con $x=r/a$. Utilizando de nuevo la solución de Kerner y el hecho que $v=v_e(r_0/a)$ donde v es la velocidad del proyectil, despejamos a r_0/a obteniendo:

$$\frac{r_0}{a} = \frac{\left(1 + 8Z_p e^2 / (a m_e v^2)\right)^{1/2} - 1}{2 B}$$

ahora, el resultado de Bohr se puede escribir como

$$\frac{Z^*}{Z_p} = \frac{v}{v_0} Z_p^{-2/3}$$

con ayuda de esto obtenemos que la carga efectiva en el modelo de Thomas-Fermi está dada por:

$$\frac{Z^*}{Z_p} = \frac{\left(1 + y\right)}{\left(1 + 0.5 y\right)^2} \quad (2.70)$$

con

$$y = \left(1 + \frac{12.36}{x^2}\right)^{1/2} - 1 \quad (2.71)$$

y $x = \frac{v}{v_0} Z_p^{-2/3}$. Para valores pequeños de x , i.e. velocidades

pequeñas del proyectil, la expresión (2.70) se reduce al resultado que obtuvo Bohr. Aunque se está utilizando una solución aproximada al potencial de apantallamiento, ésta permite obtener una solución analítica para la carga efectiva del proyectil. Este es un resultado nuevo que nos permite calcular de manera consistente la carga efectiva del proyectil para velocidades no relativistas.

Por otro lado, hay varias expresiones semi-empíricas para Z^* derivadas de medidas experimentales, una de las más comúnmente usadas es la de Betz [26]:

$$Z^* = Z_p \left(1 - C \exp\left(\frac{-v}{v_0 Z_p^\gamma}\right) \right) \quad (2.72)$$

con los parámetros ajustables C y γ . Estos parámetros son aproximadamente $C=1$ $\gamma=2/3$ para muchos de los materiales. Nótese que para baja velocidad con estos valores de los parámetros, Z^* se reduce al resultado de Bohr.

Por otro lado, medidas experimentales llevadas a cabo en laminas delgadas por Anthony y Landford [27] sugieren una expresión alternativa para la ecuación (2.72) como:

$$Z^* = Z_p \left[1 - A \exp[-\lambda Z_p^{-2/3} v/v_0] \right] \quad (2.73)$$

con

$$A = 1.16 - 1.91 \times 10^{-3} Z_b + 1.26 \times 10^{-5} Z_b^2 \quad (2.74)$$

$$\lambda = 1.18 - 7.5 \times 10^{-3} Z_b + 4.53 \times 10^{-5} Z_b^2$$

mostrándose una dependencia en el número atómico del blanco. Posteriormente Shima et. al. [28] propusieron una fórmula empírica para Z^* como:

$$Z^* = Z_p \left[1 - \exp \left(-1.25y + 0.32y^2 - 0.11y^3 \right) \right] \quad (2.75)$$

$$\left[1 - 0.0019 (Z_b - 6) y^{1/2} + 10^{-5} (Z_b - 6)^2 y \right]$$

donde $y = (v/v') Z_p^{-0.45}$ con $v' = 3.6 \times 10^8$ cm/sec. que también muestra una dependencia con el número atómico del blanco.

Teóricamente Brandt y Kitagawa [29] han utilizado la densidad electrónica asociada al proyectil obtenida a través de una solución autoconsistente basada en el tratamiento de Thomas-Fermi para calcular la carga efectiva dentro de la aproximación de la teoría dieléctrica [12,30,31].

El contenido de esta tesis no se basa en la discusión sólo del tema de carga efectiva por lo cual no se intenta hacer toda una revisión sobre el trabajo hecho en este tema, para esto se pueden ver los excelentes trabajos realizados por Brandt y colaboradores [32] y Cruz [4].

En la figura (2.7) se compara la predicción de la ecuación (2.70) con los valores semi-empíricos de Betz y con los datos teóricos y experimentales dados por Yarlagadda et. al. [32] para protones. Como podemos observar de la figura (2.7), se ve que existe un buen acuerdo con el experimento. Aunque el modelo es simplista, nos permite determinar de manera razonable el estado de carga del proyectil conforme este penetra en el material.

El análisis de la carga efectiva de un ion moviéndose a través de materia es un campo abierto a la investigación y varios grupos teóricos y experimentales están activamente trabajando en esa dirección.

De acuerdo a las ecuaciones (2.67)-(2.71) y (2.74) para velocidades del proyectil mucho más altas que la velocidad orbital de los electrones del proyectil, este permanece "pelon" ($Z^* = Z_p$) de aquí, la pérdida de energía será descrita por la ecuación de Bethe. Por lo tanto, es razonable asumir que para

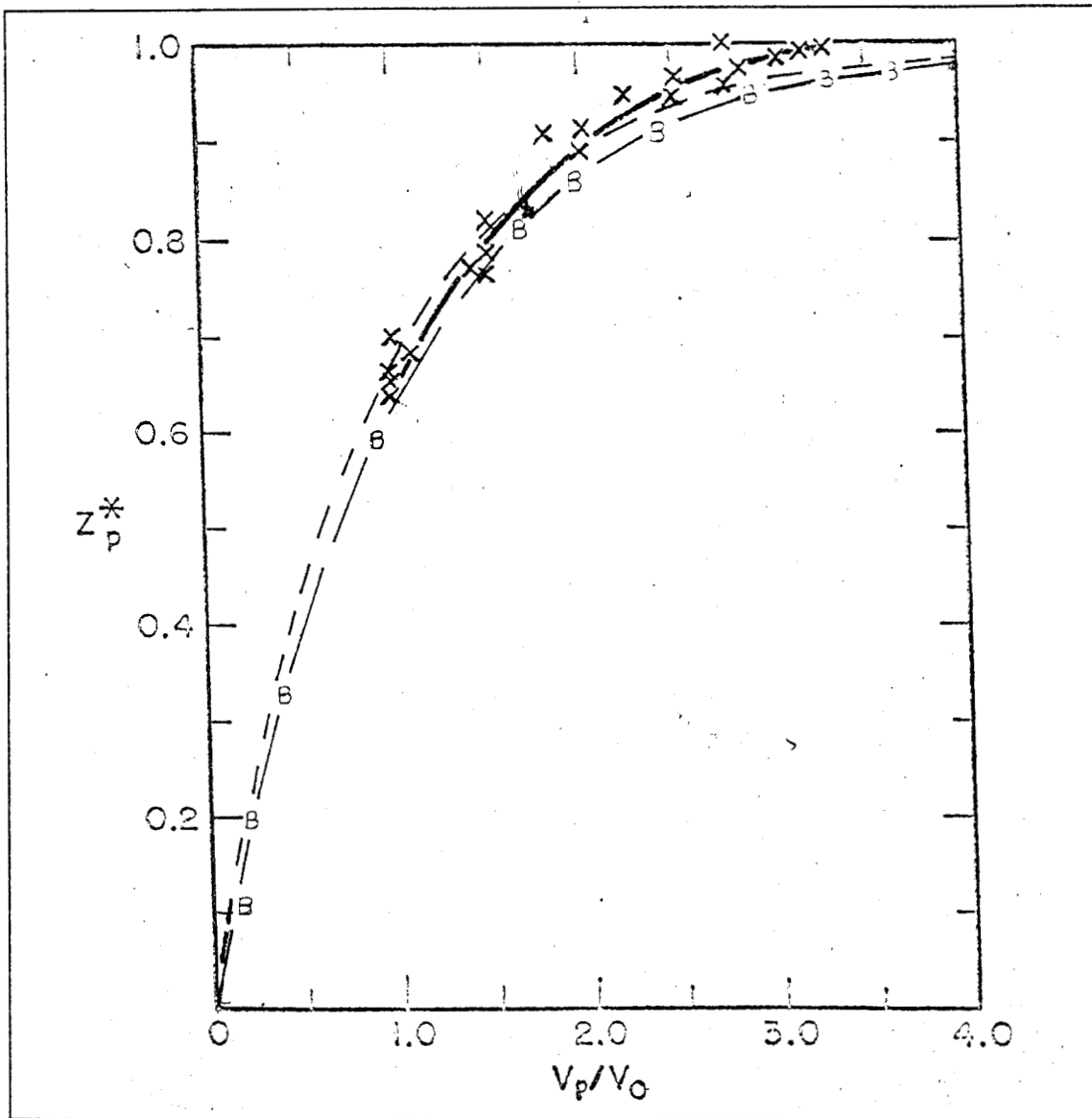


Figura 2.7 Carga efectiva para protones. La línea -B- representa los valores de Betz (ecuación (2.72) y la línea discontinua las predicciones de la ecuación (2.70). Los valores experimentales y la línea continua que representa el mejor ajuste de Brandt son tomados de la referencia [30].

diferentes iones moviéndose a la misma velocidad en el mismo medio, la pérdida de energía se puede escalar como una función de la carga efectiva, así:

$$\frac{S_e(\text{ion pesado})}{S_e(\text{protones})} = \left(\frac{Z^*(\text{ion pesado})}{Z^*(\text{protones})} \right)^2 \quad (2.76)$$

conociendo la pérdida de energía para cualquier velocidad para protones, se puede conocer la pérdida de energía para iones pesados. Aunque el empleo de la carga efectiva es aun un tema en discusión [31] existe un fuerte soporte experimental que justifica el empleo del escalamiento en la sección de frenamiento electrónico

En la siguiente sección discutiremos la pérdida de energía para la región de bajas velocidades desde otros enfoques teóricos.

2.4 REGION DE BAJAS ENERGIAS

Conforme el ion va penetrando en el medio material su velocidad decrece. Cuando ésta es del orden de la velocidad orbital de los electrones del blanco, el tratamiento de Bethe resulta inadecuado. La interacción entre proyectil y blanco se considera mediante un intercambio friccional de momento entre los electrones de estos *i.e.* el frenamiento se lleva a cabo mediante un proceso de transporte de momento entre los sistemas que coliden. La fuerza causante de la pérdida de energía es proporcional a la velocidad por lo que uno esperaría que la sección de frenamiento electrónico fuese proporcional a la velocidad del proyectil. Experimentalmente esto es lo que se observa y es lo que predicen los modelos teóricos existentes, como lo veremos a continuación.

2.4.1 MODELO DE FERMI-TELLER [2,34]

En 1947 Fermi y Teller [34] analizaron el frenamiento y captura de muones en materia sólida para velocidades $v \ll v_F$ (v_F velocidad de Fermi) en un gas de Fermi. Ellos llegaron al resultado de que la sección de frenamiento es proporcional a la velocidad del proyectil.

Siguiendo a Fermi-Teller analicemos la pérdida de energía promedio para un ión arbitrario de momento p a través de un gas de electrones de densidad n . La pérdida de energía ($-dE$) al viajar el ion una distancia dx esta dada por:

$$(-dE) = -d \left(\frac{p^2}{2M_p} \right) = -v \cdot dp = v (-dp_{\parallel})$$

donde dp_{\parallel} es el momento perdido por el proyectil en la dirección de v , así:

$$-\frac{dE}{dx} = v \left(-\frac{dp_{\parallel}}{dx} \right) = \frac{dx}{dt} \left(-\frac{dp_{\parallel}}{dx} \right) = -\frac{dp_{\parallel}}{dt} \quad (2.77)$$

Ahora, desde un sistema en reposo sobre el proyectil, un electrón con velocidad v_i respecto al sistema de laboratorio, se aproxima al proyectil con una velocidad relativa:

$$w_i = v_i - v \quad (2.78)$$

Después de la dispersión a través de un ángulo ϑ , el electrón se mueve con una velocidad w_i' donde $|w_i'| = |w_i|$. Si tenemos una densidad n_i de partículas con velocidad w_i en el proceso de dispersión en un intervalo de tiempo dt y dentro de un ángulo sólido $d\Omega$, habrá un flujo de partículas con velocidad w_i incidiendo sobre el proyectil: $n_i w_i dt$. Multiplicando por la

probabilidad de que exista una dispersión para la velocidad w_i en el ángulo sólido $d\Omega$ i.e. $\sigma(\vartheta, w_i) d\Omega$, y el momento transferido por partícula proyectado sobre la dirección de la velocidad, obtenemos el momento transferido, dp_{\parallel} , para el flujo de electrones incidente:

$$- dp_{\parallel} = (n_i w_i dt) \sigma(\vartheta, w_i) d\Omega (w_i' - w_i) \cdot \frac{\mathbf{v}}{v} m \quad (2.79)$$

De la figura (2.8) vemos que el vector \mathbf{v} se descompone en sus componentes paralelo y perpendicular a la dirección w_i como:

$$\mathbf{v} = \alpha w_i + \mathbf{v}_1$$

donde

$$\alpha = \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}_i}{w_i^2} .$$

El promedio azimutal de contribuciones alrededor de la dirección de w_i es cero. Consecuentemente, en la ecuación (2.79) solo incluimos el término

$$\begin{aligned} (w_i' - w_i) \cdot \frac{\alpha w_i}{v} &= \frac{\alpha w_i' \cdot w_i}{v} - \frac{\alpha w_i^2}{v} \\ &= (\cos \vartheta - 1) \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}_i}{v} ; \end{aligned}$$

así, el momento transferido por unidad de tiempo esta dado por

$$- \frac{dp_{\parallel}}{dt} = -n_i w_i \sigma(\vartheta, w_i) m (1 - \cos \vartheta) \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}_i}{v} d\Omega \quad (2.80)$$

Integrando sobre todos los ángulos de dispersión e introduciendo la sección transversal de transporte definida por:

$$\sigma_{tr}(w_i) \equiv \int_0^{\pi} (1 - \cos \vartheta) \sigma(\vartheta, w_i) 2 \pi \sin \vartheta d\vartheta ,$$

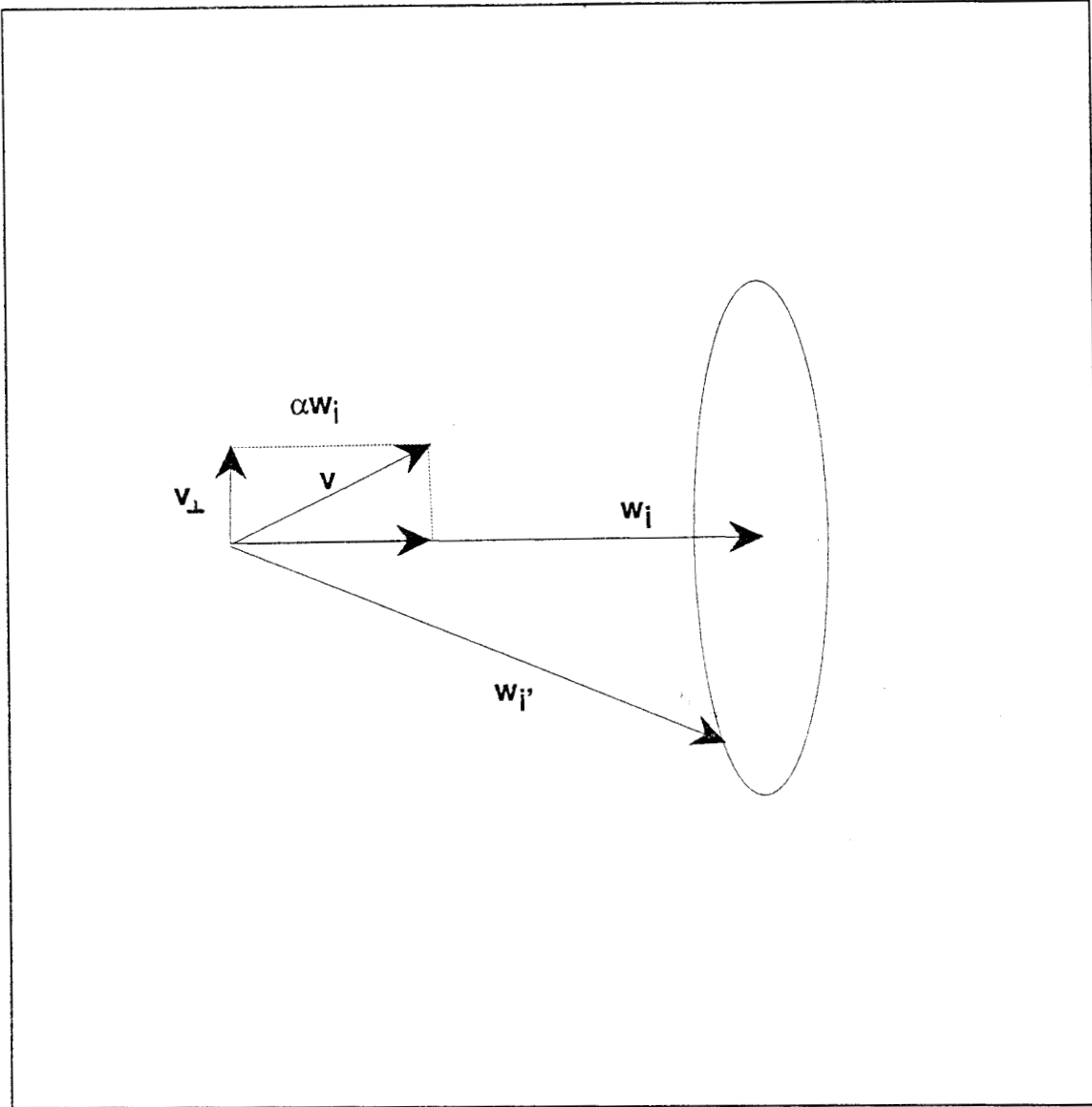


Figura 2.8 Descomposición vectorial de la velocidad del proyectil v en términos de la velocidad relativa en el gas de Fermi w_i . Obsérvese como se cancela la componente perpendicular de v en el promedio azimutal.

podemos escribir de la ecuación (2.80) como:

$$-\frac{dp'_{\parallel}}{dt} = n_i w_i \frac{\mathbf{w}_i \cdot \mathbf{v}}{v} m \sigma_{tr}(w_i) \quad (2.81)$$

pero de (2.78)

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_i \cdot \mathbf{v} &= (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}) \cdot \mathbf{v} \\ &= v (v_i \xi_i - v) \end{aligned}$$

donde ξ_i es el coseno del ángulo que forman \mathbf{v}_i y \mathbf{v} , entonces:

$$-\frac{dp'_{\parallel}}{dt} = n_i w_i m \sigma_{tr}(w_i) (v - v_i \xi_i) \quad (2.82)$$

ahora, la densidad de electrones que se encuentran con velocidades entre v_i y $v_i + dv_i$ esta dada por

$$n_i = \left(\frac{4}{3} \pi v_F^3 \right)^{-1} v_i^2 dv_i 2 \pi d\xi_i$$

donde v_F es la velocidad de Fermi y es la máxima velocidad que adquieren los electrones en el gas de Fermi. Entonces de (2.78) y (2.82) se obtiene sustituyendo en (2.77) que:

$$\begin{aligned} -\frac{dE}{dx} &= -\frac{dp'_{\parallel}}{dt} = m \frac{3n}{4\pi v_F^3} 2\pi \int_0^{v_F} dv_i v_i^2 \int_{-1}^1 d\xi_i (v^2 + v_i^2 - 2v v_i \xi_i) \\ &\quad (v - \xi_i v_i) \sigma_{tr} \left(\sqrt{v^2 + v_i^2 - 2v v_i \xi_i} \right) \end{aligned} \quad (2.83)$$

Expandiendo el lado derecho a primer orden para v pequeñas, tenemos

$$-\frac{dE}{dt} = \frac{3n}{v_F^3} m \int_0^{v_F} dv_i v_i^2 \frac{1}{2} \int_{-1}^1 d\xi_i (v_i - v \xi_i) (v - v_i \xi_i) \left\{ \sigma_{tr}(v_i) - \frac{d\sigma_{tr}(v_i)}{dv_i} v \xi_i \right\} + \dots$$

integrando en ξ_i , los términos con potencias impares en ξ_i se anulan ; así a primer orden en v encontramos que:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{n}{v_F^3} m v \left[\int_0^v \left(4 \sigma_{tr}(v_i) + v_i \frac{d\sigma_{tr}(v_i)}{dv_i} \right) v_i^3 dv_i \right]$$

integrando el último término por partes, vemos que el poder de frenamiento esta dado por

$$-\frac{dE}{dx} = n m v_F \sigma_{tr}(v_F) v \quad (2.84)$$

por lo tanto, la seccion de frenamiento electrónico para bajas velocidades en el modelo de Fermi-Teller es

$$S_e = m v_F \sigma_{tr}(v_F) v \quad (2.85)$$

de lo cual, vemos que a bajas velocidades el comportamiento en la seccion de frenamiento es líneal.

2.4.2 TEORIA DIELECTRICA DE LINDHARD [8,30,31,35]

La evaluación de la pérdida de energía de un proyectil penetrando en un medio material se puede tratar desde un punto de vista completamente diferente, como lo llevó a cabo Lindhard en 1953. En ésta sección solamente presentaremos las suposiciones principales en su descripción. Lindhard consideró que el

proyector al penetrar en el medio era frenado por un campo eléctrico generado por la polarización inducida por el proyectil en el material.

Consideremos un proyectil cuya carga es $Z_p e$ penetrando en el material moviéndose uniformemente *i.e.* $r=vt$ donde v es su vector de velocidad y r su vector de posición. La nube electrónica de los átomos del blanco es ligeramente polarizada por la presencia del proyectil. Este efecto es más fuerte atrás del proyectil que enfrente de él conforme penetra porque ya perturbó al material penetrado y consecuentemente el proyectil siente una fuerza retardada F (figura 2.9). Con lo cual la pérdida de energía por unidad de longitud esta dada por [ver ecuación (2.77)]:

$$-\frac{dE}{dx} = -F \cdot \frac{v}{v} \quad (2.86)$$

Para calcular la fuerza que siente el proyectil tenemos que el campo electrostático debido a la carga $Z_p e$ en el vacío esta determinado por la ecuación de Poisson

$$\nabla^2 \phi(r, t) = -4 \pi Z_p e \delta(r - vt)$$

donde ϕ es el potencial eléctrico. La solución de esta ecuación por el metodo de Fourier es:

$$\phi(r, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{4 \pi Z_p e}{k^2} e^{ik(r - vt)}$$

donde k es el vector de onda del campo eléctrico y esta relacionado con la frecuencia ω de este por $\omega=k.v$. El campo eléctrico en el medio material cuya constante dielectrica ϵ es función de la frecuencia, es:

$$E(r, t) = -\nabla\phi(r, t)$$

con lo cual

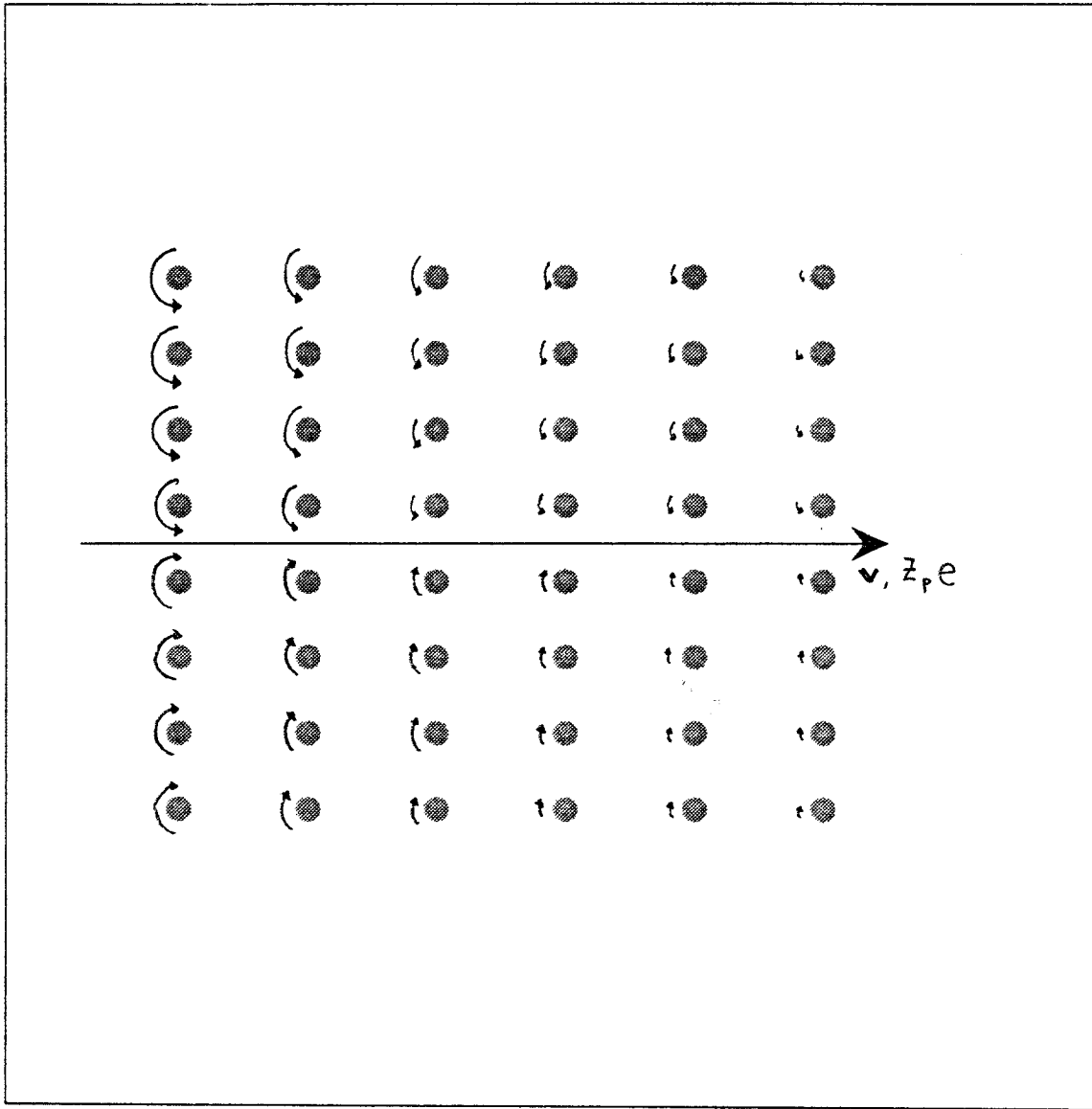


Figura 2.9 Polarización del medio al penetrar un proyectil $Z_p e$ con velocidad v . Nótese el efecto más intenso en la parte ya penetrada por el proyectil.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = - \frac{i}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} \frac{4\pi Z_p e \mathbf{k}}{k^2 \epsilon(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v})} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)}$$

por lo tanto, la fuerza actuando sobre el proyectil es:

$$\mathbf{F} = Z_p e \left[\mathbf{E}(\mathbf{v}t, t) - \mathbf{E}_{\text{vacío}}(\mathbf{v}t, t) \right]$$

i.e. el campo eléctrico es tomado en la posición del proyectil $\mathbf{r}=\mathbf{v}t$ y $\mathbf{E}_{\text{vacío}}$ es el campo eléctrico en el vacío para el cual $\epsilon=1$. Por lo tanto:

$$\mathbf{F} = - \frac{i Z_p^2 e^2}{2\pi^2} \int d^3\mathbf{k} \frac{\mathbf{k}}{k^2} \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v})} - 1 \right]$$

sustituyendo en la ecuación (2.86) y transformando a coordenadas esféricas con la sustitución $\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} = \omega$ encontramos que:

$$\frac{dE}{dx} = - \frac{Z_p^2 e^2}{\pi v^2} \text{Im} \left\{ \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_{-kv}^{kv} \omega \left(\frac{1}{\epsilon(\omega)} - 1 \right) d\omega \right\} \quad (2.87)$$

Aplicando la ecuación (2.87) a un gas de electrones que en buena aproximación se pueden considerar como osciladores armónicos, Lindhard [8,35] recupera la ecuación de Bethe.

Para bajas velocidades Lindhard encuentra que [8]:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4}{3\pi} \left(\frac{e}{a_0} \right)^2 \left(\frac{v}{v_0} \right) C_1(\chi)$$

donde $\chi = \sqrt{v_0 / (\pi v_F)}$ y C_1 es una función bien definida, v_0 y v_F son la velocidad de Bohr y Fermi respectivamente. Como vemos el comportamiento es lineal al igual que el modelo de Fermi-Teller.

Posteriormente, Lindhard publico sin derivación [36] la famosa formula:

$$\frac{dE}{dx} = \xi_e \ 8\pi \ e^2 \ a_0 \ \frac{Z_p \ Z_b}{Z} \ \left(\frac{v}{v_0} \right) \quad (2.88)$$

donde $Z^{2/3} = Z_p^{2/3} + Z_b^{2/3}$ y $\xi_e \approx Z_p^{1/6}$, la cual se comporta razonablemente al compararse con el experimento con un error de orden de 10 ~ 20% en promedio en la región de bajas velocidades.

2.4.3.- MODELO DE FIRSOV [37]

Una manera alternativa de calcular la sección de frenamiento en la región de bajas velocidades es como la propuso Firsov [37] en 1959. El consideró al proyectil y blanco como dos átomos de Thomas-Fermi cuyos electrones intercambian momento produciendo así una fuerza de arrastre en el proyectil.

Debido a la indistinguibilidad de los electrones debemos considerar el intercambio de momento como el intercambio de electrones i.e. como la nube electrónica del proyectil y blanco se traslapan durante el proceso de la colisión, un electrón el cual originalmente pertenece a un átomo, deja éste y pasa al otro átomo portando un momento $m\mathbf{v}$, \mathbf{v} siendo la velocidad relativa del sistema. Se puede considerar que existirá un flujo equivalente de electrones entre proyectil y blanco. Para evaluar el flujo de electrones Firsov considera un plano hipotético perpendicular a la línea que une los núcleos [figura (2.10)].

Sea Φ_{BA} el flujo de electrones del proyectil B al blanco A, evaluado en el plano de Firsov, el cuál se coloca en el mínimo del potencial. La fuerza sobre el átomo blanco A es

$$\mathbf{F}_A = \Phi_{BA} \ m \ \mathbf{v}$$

donde m es la masa del electrón . De la misma manera, sí Φ_{AB} es

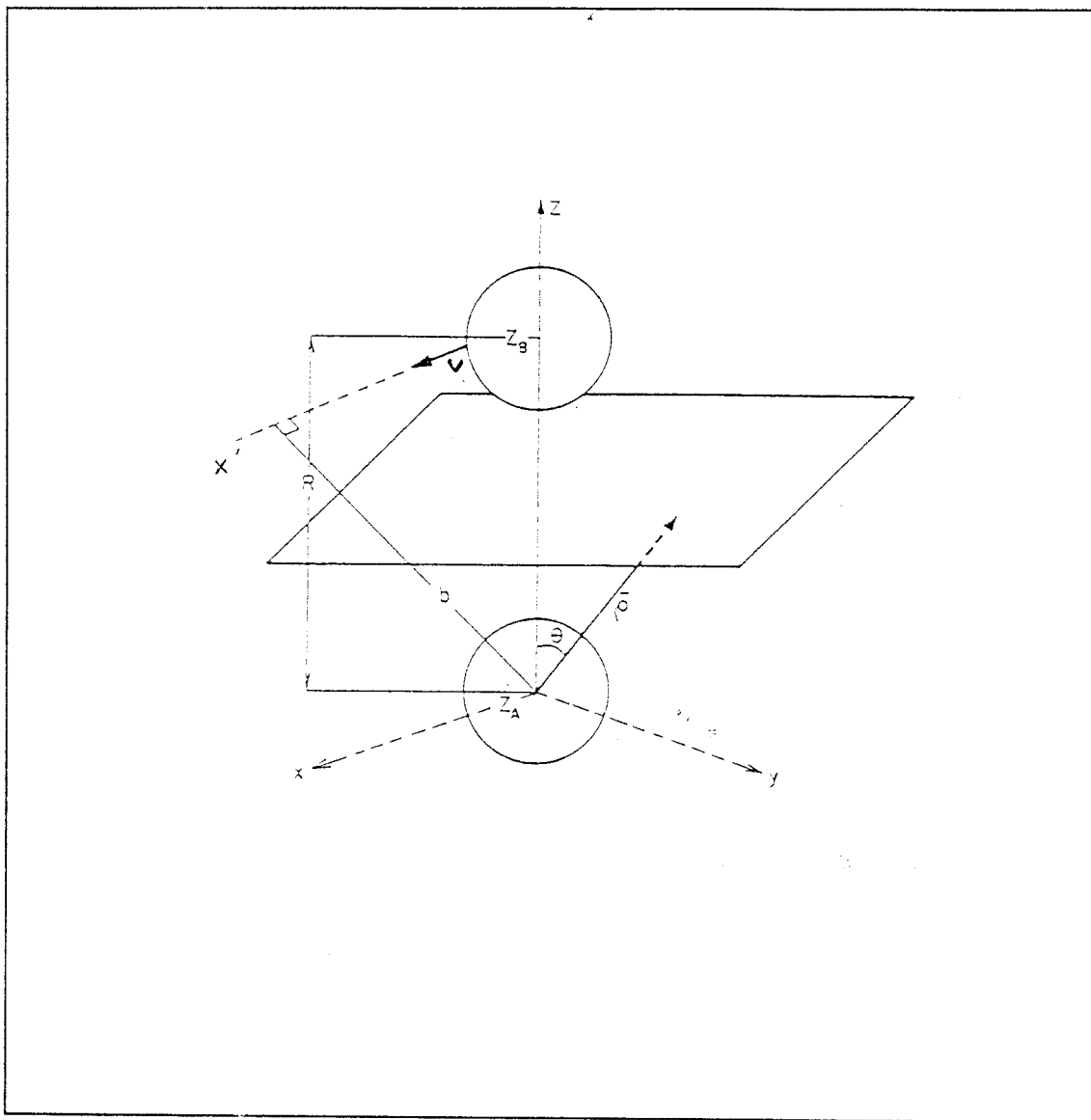


Figura 2.10 Representación esquemática para la evaluación de S_e en el modelo de Firsov. El átomo B se mueve con velocidad relativa v y con un parámetro de impacto b . El plano hipotético de Firsov está colocado a una distancia fraccional entre los átomos A y B dada por el potencial atómico del proyectil y blanco.

el flujo de electrones en el plano hipotético de Firsov que van del átomo A al átomo B, entonces la fuerza ejercida sobre B por A es:

$$\mathbf{F}_B = \Phi_{AB} m \mathbf{v}$$

entonces, la fuerza total entre los dos sistemas esta dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \mathbf{F}_A + \mathbf{F}_B \\ &= (\Phi_{AB} + \Phi_{BA}) m \mathbf{v} \\ &= \Phi m \mathbf{v} \end{aligned}$$

donde Φ es el flujo total de electrones a través del plano de Firsov. El trabajo realizado sobre el sistema debido a la fuerza de arrastre es

$$\begin{aligned} dW &= \mathbf{F} \cdot d\mathbf{R} \\ &= \Phi m \mathbf{v} \cdot d\mathbf{R} \end{aligned}$$

donde el vector \mathbf{R} es el vector que une los dos átomos A y B. Proyectando sobre la dirección de movimiento del proyectil encontramos que

$$dW = \Phi m v dx'$$

y x' se mide a lo largo de la trayectoria del proyectil.

Si el trabajo hecho sobre el sistema es igual a la energía que pierde el proyectil durante la interacción con el blanco, la sección de frenamiento esta dada segun la ecuacion (1.42) [ver capítulo I]

$$S_e = 2 \pi m \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi v b dx' db$$

Suponiendo que el movimiento del proyectil es rectilíneo y que la velocidad se mantiene constante durante la colisión (transferencia a grados de libertad internos), tenemos que

$$S_e = 2 \pi m v \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi b dx' db , \quad (2.89)$$

Lo único que nos resta es calcular el flujo de electrones. Para esto, consideremos el plano de Firsov y la figura (2.11), escojamos el eje z a lo largo de la normal al plano. Considerando aquellos electrones cuya velocidad esta entre u y $u + du$ los cuales sufren un desplazamiento $u dt$ en un intervalo infinitesimal de tiempo dt , entonces aquellos electrones que están dentro del cilindro infinitesimal de sección transversal dA y longitud $u dt$ formando con el eje z un ángulo ϑ , atravesarán el plano en el tiempo dt , los electrones fuera de este cilindro en este tiempo no atravesarán al plano. El volumen de éste cilindro es $dA u dt \cos\vartheta$. Ahora, el número de electrones N esta dado por

$$N = \iiint f(u) d^3u d^3r$$

donde $f(u)$ es la distribución de partículas en el espacio fase, así, el número de partículas con velocidad u y $u + du$ dentro del cilindro es, $f(u) d^3u dA u dt \cos\vartheta$. Dividiendo entre el área dA y el intervalo de tiempo dt obtenemos el número de partículas por unidad de tiempo y área que atraviesan el plano *i.e.* el flujo de electrones es

$$\Phi = \int f(u) u d^3u \cos\vartheta .$$

Como sólo queremos las partículas que atraviesan el plano en la dirección positiva del eje z , entonces

$$\Phi = \int_0^{\infty} u^3 f(u) du \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \cos\vartheta \sin\vartheta d\vartheta .$$

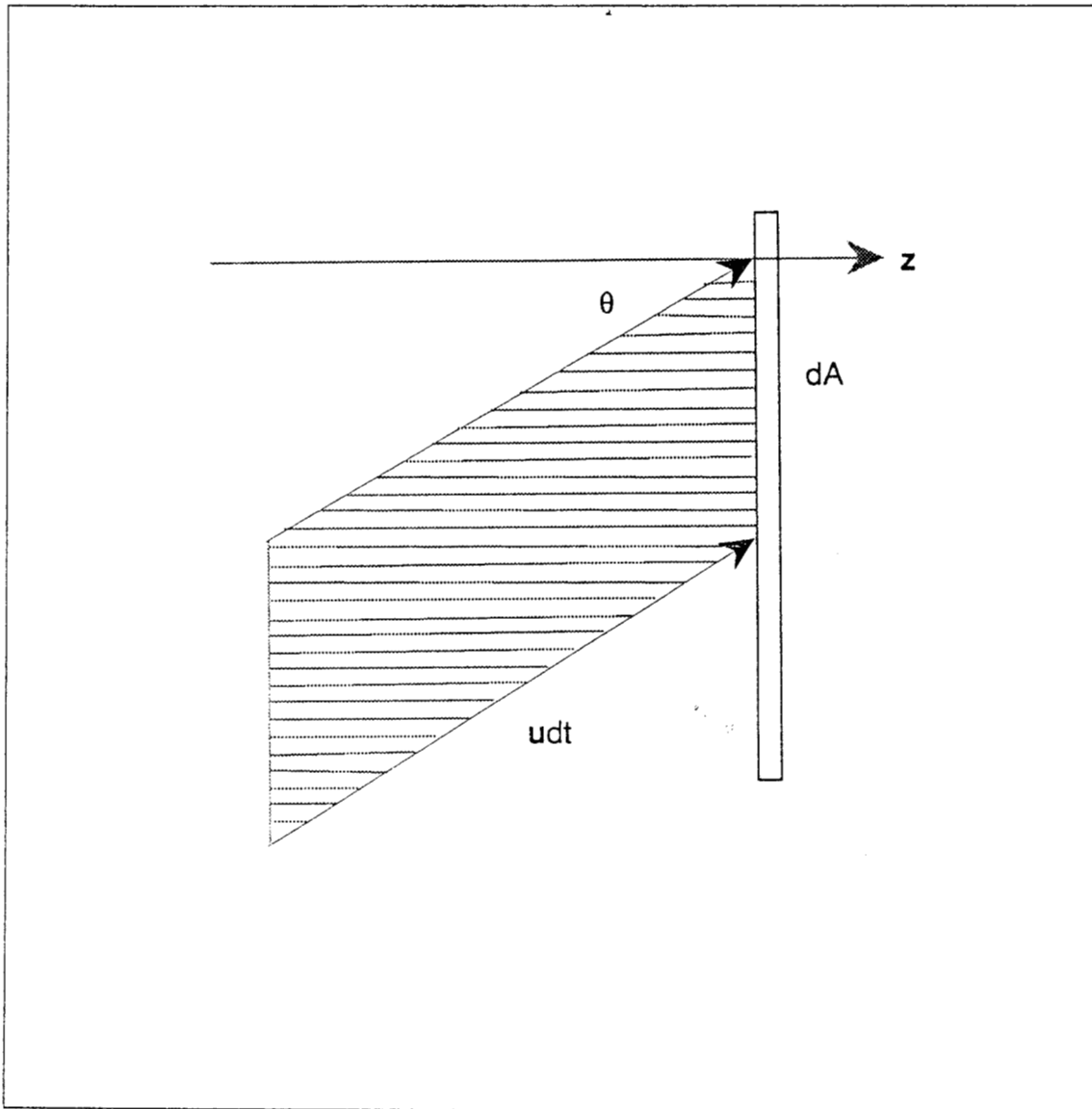


Figura 2.11 Cálculo del flujo electrónico a través de un plano de área dA para partículas que inciden con velocidad u en un tiempo dt formando un ángulo ϑ con la normal al plano.

Sí suponemos que la distribución de velocidades electrónicas es simétrica, podemos llevar a cabo las integrales angulares obteniendo:

$$\Phi = \pi \int_0^{\infty} u^3 f(u) du . \quad (2.90)$$

La velocidad media de los electrones esta dada por

$$\bar{u} = \frac{1}{n} \int u f(u) d^3u = \frac{4\pi}{n} \int_0^{\infty} u^3 f(u) du ,$$

donde $n = N/V$ es el número de partículas por unidad de volúmen, sustituyendo en (2.90) encontramos que

$$\Phi = \frac{1}{4} n \bar{u} \quad (2.91)$$

donde \bar{u} es la velocidad media de los electrones.

Por lo tanto el número de electrones por unidad de tiempo atravesando el plano de Firsov es:

$$\Phi = \int_S \left(\frac{1}{4} n \bar{u} \right) dS$$

donde S es la superficie correspondiente al plano de Firsov. Ahora, según el modelo de Thomas-Fermi, la velocidad promedio de los electrones está dada por [ecuación (A.14), apéndice A]:

$$\bar{u} = \frac{3}{4} \frac{(3\pi^2)^{1/3}}{m_e} \hbar n^{1/3}$$

así:

$$S_e = \frac{3^{4/3} \pi^{5/3} \hbar v}{8} \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_S n^{4/3} dS \right) b dx db$$

que expresando la densidad electrónica en términos del potencial

φ del sistema [ecuación (A.15)]:

$$n = \frac{(2 m e \varphi)^{3/2}}{3 h^3 \pi^2} ;$$

tenemos que:

$$S_e = \frac{m_e^2 e^2 v}{2h^3 \pi} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \left[\int_s \varphi^2 ds \right] b dx db , \quad (2.92)$$

Otra suposición que hizo Firsov fue que si la carga nuclear de los átomos que coliden no difieren más de cuatro veces, entonces, en una buena aproximación se puede considerar que el plano se encuentra a la mitad de la línea que conecta los núcleos. Con estas suposiciones y utilizando el potencial de Thomas-Fermi [ver apéndice A] encontramos que la ecuación (2.92) se reduce [ver apéndice B] a:

$$S_e = 6.9488 (Z_p + Z_b) h v a_0$$

o en términos de la velocidad de Bohr v_0 :

$$\begin{aligned} S_e &= 6.9488 (Z_p + Z_b) \left(\frac{v}{v_0} \right) h a_0 v_0 & (2.93) \\ &= 5.293 (Z_p + Z_b) u \times 10^{-15} \text{ eV cm}^2/\text{átomo} . \end{aligned}$$

Como vemos, una característica importante del tratamiento de Firsov es que, análogamente a Fermi-Teller y Lindhard, para bajas velocidades la sección de frenamiento es lineal en la velocidad. Otro hecho mucho más importante es que es el primer modelo que considera la estructura electrónica del proyectil, permitiendo esto considerar al proyectil con estructura electrónica y no como una carga puntual. En la figura (2.12) se compara la predicción del modelo de Firsov con la ecuación de Lindhard (2.88) y los datos experimentales.

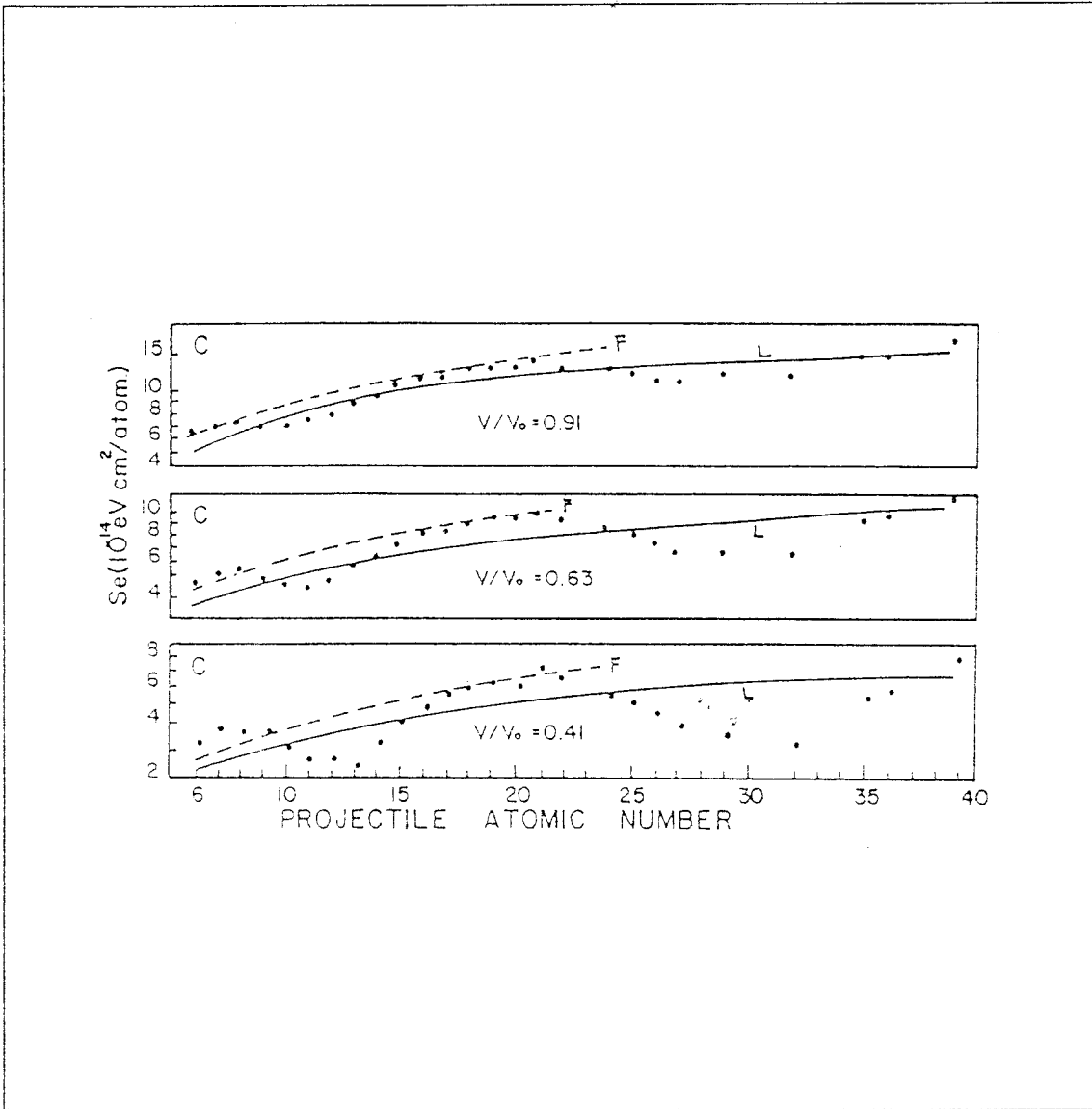


Figura 2.12 Sección de frenamiento electrónico para varios proyectiles incidentes en carbono para diferentes velocidades. Nótese el efecto oscilatorio de S_e conforme cambia el número atómico del proyectil. En esta misma figura se comparan las predicciones del modelo de Firsov (ecuación 2.93) y las de Lidhard (ecuación 2.89) (curvas etiquetadas con B y L respectivamente). Figura tomada de la referencia [39].

Sin embargo, experimentalmente se ha encontrado que a bajas velocidades del proyectil, la sección de frenamiento tiene un comportamiento oscilatorio cuando el número atómico del proyectil se incrementa [38]. Este efecto se debe a la estructura de capas de los átomos, puesto que las oscilaciones se repiten cada vez que una capa electrónica del proyectil se llena, como podemos observar de la figura experimental (2.12) en donde se gráfica la sección de frenamiento en función del número atómico del proyectil.

Para tomar en cuenta tal efecto, se hicieron algunas modificaciones a la teoría de Firsov. Con este fin revisaremos algunas de las modificaciones llevadas a cabo para tomar en cuenta el efecto de las capas electrónicas que se describen en terminos de un tratamiento cuántico.

2.4.3.a MODIFICACIÓN DE CHESHIRE [40].

Una de las primeras modificaciones llevada a cabo a la teoría de Firsov fue la de Cheshire en 1968 y posteriormente utilizada por otros autores. Como se vió en la sección anterior, la idea central del modelo de Firsov radica en evaluar el momento transferido debido al intercambio de electrones, como un proceso efusivo a través de un plano hipotético localizado en el mínimo del potencial entre los dos átomos que coliden. Así, considerando al proyectil y blanco como dos átomos de Thomas-Fermi, el flujo de partículas atravesando el plano en un elemento de área dA es según la ecuación (2.91)

$$d\sigma = \frac{1}{4} n \langle u \rangle dA$$

donde n es la densidad de Thomas-Fermi y $\langle u \rangle$ la velocidad promedio de los electrones. Una de las características del modelo de Firsov es que el flujo total es una combinación lineal de la contribución del proyectil y blanco. Esto permite considerar la contribución de cada partícula por separado, así:

$$S_e = S_e(\text{proyectil}) + S_e(\text{blanco})$$

Para tomar en cuenta el efecto observado experimentalmente de la oscilación de la sección de frenamiento S_e en función del número atómico del proyectil y blanco, Cheshire reemplazó la densidad de Thomas-Fermi por una densidad atómica de Hartee-Fock-Slater [41]

$$n_\lambda = w_\lambda \psi_\lambda^* \psi_\lambda ,$$

donde ψ_λ son las funciones de onda del orbital λ y w_λ la población electrónica de ese orbital. De lo cual, la contribución total del átomo al flujo en el plano es la suma de las contribuciones por orbital. Además, la velocidad promedio en el modelo de Thomas-Fermi ha sido reemplazada por una velocidad rms de Hartee-Fock-Slater:

$$u_{\text{rms}} = \langle u^2 \rangle^{1/2} = \left[\frac{2}{m} \langle \hat{T} \rangle \right]^{1/2} = \left[\frac{2}{m} \right]^{1/2} \left[\int \psi_\lambda^* \hat{T} \psi_\lambda d\tau \right]^{1/2}$$

donde m es la masa del electrón y \hat{T} es el operador de energía cinética.

Conforme a la idea original de Firsov de trayectoria rectilínea, Cheshire retiene la noción de un mínimo parámetro de impacto, pero a diferencia de Firsov, el plano hipotético no se encuentra a la mitad de la línea que une el proyectil y el blanco, con lo cual fue necesario introducir una nueva variable que tuviera en cuenta esta posición del plano que ahora se encuentra donde el potencial electrostático tiene un mínimo y así considerar la diferencia de estructura entre los átomos que coliden.

Cheshire calculó el flujo a través de la superficie hipotética y encuentra que la contribución del orbital λ está dada por:

$$S_e = \frac{2 \pi^2 m v w_\lambda}{\alpha} \langle u_\lambda^2 \rangle^{1/2} \int_{b_0}^{\infty} db b I(\alpha b)$$

donde:

$$I(\alpha b) = \int_{\alpha b}^{\infty} \psi_\lambda^* \psi_\lambda r (r^2 - \alpha^2 b^2)^{1/2} dr$$

y la cantidad adimensional α representa la posición fraccional del plano de Firsov entre la partícula incidente y el blanco. El mínimo parámetro de impacto b_0 se ha considerado como un parámetro ajustable en este modelo.

Con esto, Cheshire logró explicar de manera cualitativa y cuantitativa el comportamiento oscilatorio de la sección de frenamiento con la desventaja de ajustar el parámetro de impacto b_0 al experimento.

Poco después Cruz et. al. [39] mostraron que la modificación propuesta por Cheshire es muy sensible al uso de una velocidad promedio $\langle u \rangle$ en lugar de la velocidad rms- (u_{rms}) para los electrones atómicos, además de que también lo es al escoger la representación más precisa de la función de onda atómica. Ellos concluyen que para tener predicciones confiables sobre S_e se requieren funciones de onda precisas junto con la velocidad promedio para los electrones, dado que encuentran discrepancias de hasta el 100% en la sección de frenamiento como se puede ver en la figura (2.13) en donde se grafica a S_e en función del número atómico del proyectil.

2.4.3.b MODIFICACION DE BRICE AL MODELO DE FIRSOV [42]

En 1972, Brice [42] propuso una modificación diferente para el modelo de Firsov. Brice se basa en la introducción correcta mecánico-cuántica del flujo de partículas que atraviesan el plano de Firsov. De acuerdo a Firsov, la sección de frenamiento está dada por [ver ecuación (2.89)]:

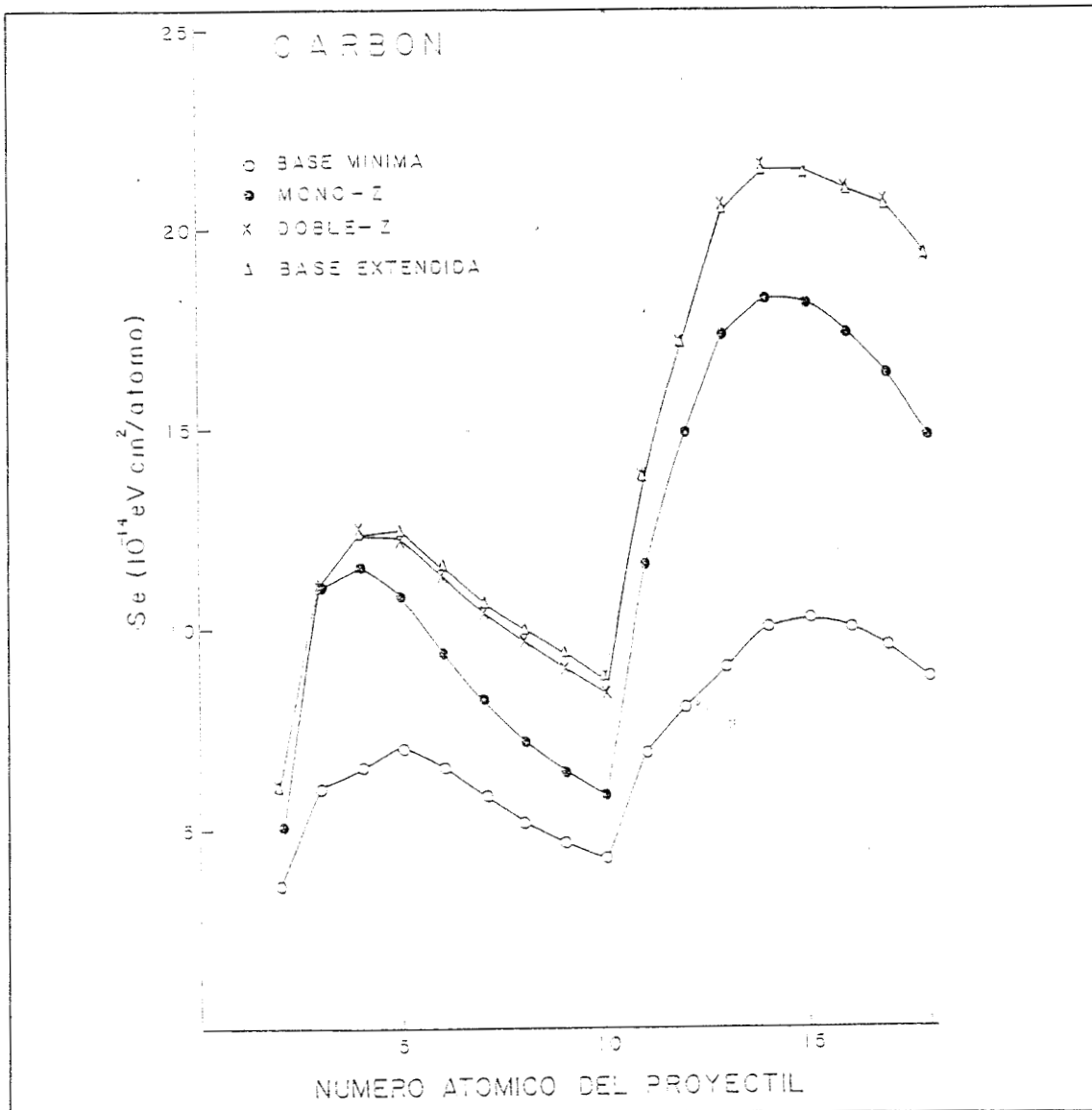


Figura 2.13 Predicciones de la modificación de Cheshire para varios proyectiles incidentes en carbono a la velocidad de $0.5 v_0$ con parámetro de impacto de ajuste $b_0=2.5 a_0$ y posición fraccional de plano $\alpha=0.5$ para diferentes conjuntos de bases orbitales. Nótese la sensibilidad del modelo. Figura tomada de la referencia [39].

$$S_e = 2 \pi m v \int_0^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \varnothing b dx' db \quad (2.94)$$

donde m es la masa del electrón, v es la velocidad del proyectil, \varnothing es el flujo de electrones a través de la superficie de Firsov y b es el parámetro de impacto con el que incide el proyectil. La localización espacial del proyectil está especificada por x' , y' , z' respecto al blanco.

A pesar de que el modelo de Firsov es un tratamiento clásico, el flujo de electrones \varnothing a través del plano hipotético se puede considerar cuánticamente a través de la corriente de probabilidad en una dirección como lo hizo por primera vez Brice.

Considerando la corrección debido al movimiento del plano hipotético relativo al blanco cuyo momento es k_0 , el flujo cuántico en el plano es [18]:

$$\varnothing = \frac{\hbar}{2 m i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \left(\Psi_+^* \frac{\partial \Psi_+}{\partial z} - \Psi_+ \frac{\partial \Psi_+^*}{\partial z} - 2k_0 i |\Psi_+|^2 \right) \quad (2.95)$$

y donde Ψ_+ es la función de onda parcial construida adecuadamente para tomar en cuenta el flujo de electrones en una dirección, así:

$$\Psi_+(\mathbf{r}) = (1/2\pi)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{k_0}^{\infty} dk_z e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \varphi(\mathbf{k}) \quad (2.96)$$

donde \mathbf{r} denota la posición de un punto en el plano hipotético y $\varphi(\mathbf{k})$ es la transformada de Fourier de la función de onda electrónica $\Psi(\mathbf{r})$.

Usando las ecuaciones (2.94), (2.95) y (2.96) y asumiendo que el plano hipotético está localizado a una distancia fraccional α medida desde el blanco tal que $\alpha(\text{blanco}) +$

$\alpha(\text{proyectil}) = 1$ Brice obtiene la sección de frenamiento electrónico para la región de bajas energías en el caso atómico como:

$$S_e = \frac{\pi \hbar u}{\alpha^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_0^{\infty} dk_z k_z \left| \frac{\partial \varphi}{\partial k_z} \right|^2 \quad (2.97)$$

donde u es la velocidad relativa entre proyectil y blanco. Una característica importante de este tratamiento es que no depende de ningún parámetro ajustable al experimento, puesto que α se calcula a partir de primeros principios.

2.4.3.c Interpretación geométrica de la modificación de Brice [43].

La ecuación (2.97) se puede escribir de una manera diferente tal que esta nos permita darle una interpretación física a la modificación de Brice al modelo de Firsov.

En el espacio momental el operador \hat{z} está dado por:

$$\hat{p}_z = \hbar k_z$$

$$\hat{z} = i \hbar \frac{\partial}{\partial p_z} = i \frac{\partial}{\partial k_z}$$

entonces, en la notación de Dirac en el espacio momental

$$S_e = \frac{\pi v}{\alpha^3} \langle \hat{z} \varphi | \hat{p}_z | \hat{z} \varphi \rangle$$

pero del principio de incertidumbre de Heisenberg

$$\Delta \hat{p}_z \Delta \hat{z} \approx \frac{\hbar}{2}$$

entonces

$$S_e \approx \frac{\pi v}{2 \alpha^3} \hbar \langle \hat{z} \varphi | \varphi \rangle = \frac{\pi \hbar v}{2 \alpha^3} \langle \varphi | \hat{z} | \varphi \rangle \quad (2.98)$$

así, vemos que la contribución a la sección de frenamiento de un sólo orbital es proporcional a las dimensiones geométricas de ése orbital, mientras que α nos da esa proporcionalidad i.e. nos dice quién contribuye más, el proyectil o el blanco dependiendo si α es mayor o menor a 1/2 debido al flujo electrónico en el plano de Firsov.

Los tratamientos analizados en este capítulo, como el lector se habrá dado cuenta, se refieren a blancos monoatómicos, sin embargo recientemente experimentos llevados a cabo en blancos moleculares sugieren un tratamiento diferente que tome en cuenta el estado de agregación de la materia i.e. que considere los diferentes elementos que conforman la molécula. Para esto es necesario analizar el grado de participación que tienen los enlaces químicos en la sección de frenamiento, ésto lo analizaremos en el capítulo siguiente.

CAPITULO III

EFFECTOS MOLECULARES EN LA SECCION DE FRENAMIENTO DE IONES DE BAJA ENERGIA

3.1 Introducción.

Hasta hace poco tiempo, la mayoría de los cálculos para evaluar la sección de frenamiento electrónico en materiales compuestos se basaba en la aplicación de la Regla de Bragg [44], que en su forma más simple consiste en la suma de las secciones de frenamiento de los elementos constituyentes por separado i.e.:

$$S_e \text{ (molecula)} = \sum_i n_i S_{e,i} \quad (3.1)$$

donde n_i es el número de átomos del elemento i en la molécula. Lo cual implica que para moléculas complejas, el enlace químico de los átomos dentro de las moléculas y los cambios en el estado físico sean despreciados en el cálculo de la sección de frenamiento.

Sin embargo en los últimos años, el interés sobre el efecto de los enlaces químicos en la sección de frenamiento se ha incrementado debido a la importancia que tiene en los procesos de bombardeo con iones a blancos compuestos, donde las características de la estructura molecular pueden tener una fuerte influencia sobre S_e . Recientemente Thwaites [9,45] ha reportado un análisis completo de la evidencia experimental para efectos de enlaces químicos y efectos físicos de fase sobre S_e para blancos compuestos. La conclusión dada por este autor es que la regla de aditividad de Bragg no es adecuada para explicar las observaciones experimentales, particularmente para velocidades del proyectil menores y alrededor del máximo de la curva de frenamiento.

Para proyectiles de Helio y Litio existe una considerable cantidad de información experimental sobre S_e de blancos

moleculares colectada principalmente por los grupos de Baylor [46], Köln [47] y Giessen [48]. Estos resultados han sugerido la idea de incorporar entidades moleculares en la contribución a la sección de frenamiento, con lo cual S_e se puede obtener a partir de las contribuciones de los grupos moleculares característicos.

Sin embargo, desde el punto de vista teórico, sólo algunos esfuerzos aislados han sido dirigidos al estudio del efecto de enlaces sobre S_e . Los primeros trabajos se han hecho para protones incidentes sobre pequeñas moléculas ya sea utilizando la aproximación de plasma local [49] o recientes aplicaciones de la teoría cinética de frenamiento desarrollada por Sigmund [50] e implementada por Oddershede y Sabin [51] para evaluar la contribución a S_e debido a los enlaces y carozos de hidrocarburos bombardeados con protones. Por último, hemos [52] conjuntado la teoría de plasma local y la teoría cinética con la implementación de orbitales moleculares localizados para evaluar la pérdida de energía en materiales moleculares compuestos. Aunque estos resultados son alentadores, son sólo para protones. Como nuestro interés es también evaluar la pérdida de energía de iones pesados hemos desarrollado un tratamiento en el que podamos incorporarlos. En este trabajo nos limitaremos al caso de bajas energías empleando el modelo de Firsov, el cuál permite incorporar iones pesados.

3.2 Adaptación del modelo de Firsov a blancos moleculares

Brice y Cruz [43] en 1979 encontraron que para tratar a una molécula, no era apropiado considerar un sólo plano cuando el blanco está extendido como en el caso de una molécula. Sino que es posible aproximar la superficie de Firsov por un conjunto de planos escogidos, tal que cada centro de carga sobre la molécula contribuya al flujo en uno de los planos del conjunto existente entre proyectil y blanco.

Consideremos un blanco molecular cuya distribución electrónica puede ser descrita mediante un conjunto de orbitales $\Psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)$, cada uno centrado en la posición \mathbf{R}_i relativa a un sistema de coordenadas fijo centrado sobre la molécula [ver figura (3.1)]. Sea u la velocidad del proyectil y b_i el correspondiente parámetro de impacto como es observado desde el punto \mathbf{R}_i . Siguiendo la idea original de Firsov, si asumimos una velocidad relativa constante durante la interacción, el trabajo total para frenar al proyectil debido al flujo \varnothing de electrones entre el proyectil y blanco es:

$$\varepsilon(b_i) = -m u \int dx' \varnothing_i \quad (3.2)$$

donde x' es la proyección del vector de posición relativo entre el proyectil y el centro \mathbf{R}_i a lo largo de la dirección definida por u . En esta ecuación \varnothing_i es el flujo electrónico integrado sobre un plano hipotético localizado a una distancia fraccional α_i entre el centro \mathbf{R}_i y el proyectil. De aquí la contribución orbital a la sección de frenamiento electrónico se obtiene integrando sobre todos los parámetros de impacto [ecuación (1.42)], por lo que:

$$S_{e,i} = 2 \pi \int \varepsilon(b_i) b_i db_i \quad (3.3)$$

Notemos que de acuerdo a la figura (3.1), si construimos un plano de impacto perpendicular a x' la integral anterior se puede escribir como:

$$S_{e,i} = -m u \iiint dx' dy' dz' \varnothing_i \quad (3.4)$$

donde y' , z' son coordenadas en el plano de impacto. Hasta aquí, el tratamiento es el mismo que se hizo en el caso atómico del modelo de Firsov y la modificación de Brice, como lo podemos ver de las ecuaciones (2.89) y (2.94).

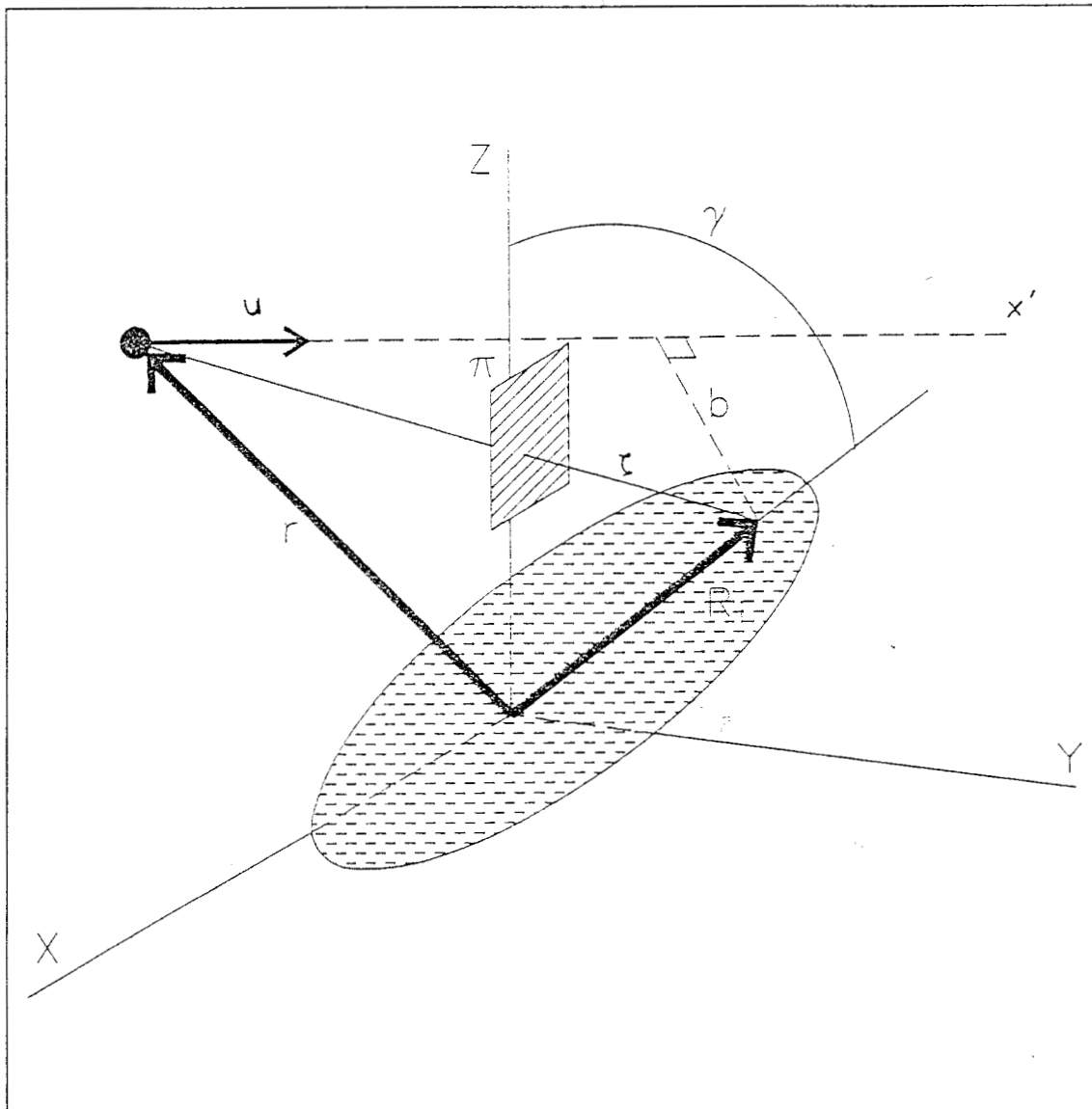


Figura 3.1 Orbital molecular colocado a una distancia R_i del centro de la molécula para calcular la contribución a la sección de frenamiento para un proyectil que incide con velocidad relativa u con un parámetro de impacto b . El flujo electrónico se evalúa en el plano π que está a una distancia ζ del orbital molecular.

Para poder evaluar el flujo en la ecuación (3.4) definamos la posición de una superficie hipotética como:

$$\zeta = \alpha_1 (r - R_1) \quad (3.5)$$

medida desde el centro R_1 , a través de la cual evaluaremos el flujo electrónico que va del orbital colocado en R_1 al proyectil. Además, como esta superficie se considera perpendicular a ζ , entonces denominemos a ξ y η como dos coordenadas ortogonales definidas en el plano hipotético. En este esquema, la función de onda parcial asociada a los electrones que tienen momento mayor o igual al momento del plano k_0 debido al efecto de acercamiento y/o alejamiento del proyectil es:

$$\Psi_+(\rho_1) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{\xi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{\eta} \int_{k_0}^{\infty} e^{i\mathbf{k} \cdot \rho} \varphi_1(\mathbf{k}) dk_{\zeta} \quad (3.6)$$

donde ρ_1 es el vector medido desde el centro de carga R_1 localizado sobre el plano hipotético y $\varphi_1(\mathbf{k})$ es la transformada de Fourier de el orbital localizado $\Psi(\mathbf{r}-R_1)$. De acuerdo a Brice el flujo sobre el plano está dado por:

$$\sigma_1 = \frac{\hbar}{2 m i} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \left(\Psi_+^* \frac{\partial \Psi_+}{\partial \zeta} - \Psi_+ \frac{\partial \Psi_+^*}{\partial \zeta} - 2 k_0 i |\Psi_+|^2 \right) \quad (3.7)$$

Sustituyendo la ecuación (3.6) en (3.7) y siguiendo los pasos dados en el Apéndice C, el flujo electrónico para calcular la sección de frenamiento en la región de bajas energías resulta:

$$\sigma_1 = \frac{\hbar}{8\pi m} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{\xi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{\eta} \int_0^{\infty} K' dK' \int_{-K'}^{K'} dK e^{i K \zeta} \varphi\left(\frac{K + K'}{2}\right) \varphi^*\left(\frac{K' - K}{2}\right) \quad (3.8)$$

donde $K = k_{\zeta} - k_{\zeta}'$, y $K' = k_{\zeta} + k_{\zeta}' - 2k_0$.

Para evaluar la sección de frenamiento de acuerdo a la ecuación (3.4), observamos de la figura (3.1) que el elemento de

volumen en el sistema primado puede ser escrito en terminos de ζ [de la ecuación (3.5)] como:

$$dx'dy'dz' = \alpha^{-3} \zeta^2 d\zeta d\Omega_\zeta \quad (3.9)$$

de aqui, sustituyendo (3.8) y (3.9) dentro de (3.4) obtenemos:

$$S_{e,i} = \frac{u\hbar\alpha^{-3}}{8\pi m} \int d\Omega_\zeta \int_0^\infty \zeta^2 e^{iK\zeta} d\zeta \int_{-\infty}^\infty dk_\xi \int_{-\infty}^\infty dk_\eta \int_0^\infty K' dK' \int_{-K'}^{K'} dK \varphi \varphi^* \quad (3.10)$$

donde la dependencia explicita de φ sobre K y K' ha sido eliminada por simplicidad. Una característica importante es que la integración sobre los parámetros de impacto la hemos sustituido por una integración angular que se puede interpretar como un promedio sobre las orientaciones con las que incide el proyectil. Notemos ahora que la integral sobre ζ se puede reducir a través de la relación:

$$\int_0^\infty \zeta^2 e^{iK\zeta} d\zeta = -\pi \frac{\partial^2}{\partial K^2} \delta(K) \quad (3.11)$$

donde $\delta(K)$ es la función Delta de Dirac. Usando esta relación en la ecuación (3.10) y llevando a cabo la manipulación dada en el Apéndice C, obtenemos la contribución a la sección de frenamiento de un orbital molecular localizado en R_i como:

$$S_{e,i} = 4^{-1} \hbar u \alpha_i^{-3} \int d\Omega_\zeta \int_{-\infty}^\infty dk_\xi \int_{-\infty}^\infty dk_\eta \int_0^\infty k_\zeta \left| \frac{\partial \varphi_i}{\partial k_\zeta} \right|^2 dk_\zeta \quad (3.12)$$

esta ecuación es valida para la región de velocidades menores a la velocidad orbital de los electrones del orbital Ψ .

Brice y Cruz aplicaron la ecuación (3.12) a la molécula de hidrógeno, representando a la función de onda molecular como una combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO). Dado que la función de onda total de la molécula depende de la separación

internuclear que existe en los dos centros que la forman, la sección de frenamiento tiene que ser evaluada numéricamente para una cierta distancia internuclear de la molécula.

Como al variar la distancia internuclear R , la concentración de carga en el enlace se redistribuye, entonces la sección de frenamiento está influenciada por la concentración de carga entre los dos centros que forman el enlace en la molécula.

El valor de S_e a $R = \infty$ corresponde a la contribución de dos átomos de Hidrógeno aislados, por lo que de acuerdo a estos autores la contribución a S_e para protones incidentes en la molécula de hidrógeno vista como una suma de dos átomos de hidrógeno (Regla de Bragg) es:

$$\begin{aligned} S_e(H^+ \rightarrow H_2) &= 2 S_e(H^+ \rightarrow H) \\ &= 13 \times 10^{-15} \text{ eV cm}^2/\text{molécula} \quad ; \end{aligned}$$

mientras que para blancos moleculares de H_2 para la distancia de equilibrio de la molécula ($R = 1.4a_0$) obtienen para el mismo caso:

$$S_e(R = 1.4a_0) = 10.2 \times 10^{-15} \text{ eV cm}^2/\text{molécula}$$

de esto, vemos que el efecto del enlace se refleja en la sección de frenamiento debido a la concentración de carga en el mismo, produciendo una diferencia $\sim 30\%$ respecto a las predicciones de la regla de Bragg. Como vemos la contribución a la sección de frenamiento se modifica debido a la redistribución de la carga haciendo que el efecto del enlace sea importante. Este ha sido uno de los primeros intentos por explicar como el enlace químico afecta la sección de frenamiento al considerar blancos moleculares.

Un análisis de la ecuación (3.12) nos revela que: una vez escogido un conjunto de orbitales moleculares se puede obtener la

contribución orbital a la sección de frenamiento, permitiendo con ésto separar la contribución a la sección de frenamiento a partir de orbitales carozos, orbitales de enlace y orbitales de pares solitarios (lone-pairs) como lo veremos en la siguiente sección. Esto no es de sorprendernos, dadas las suposiciones consideradas en el modelo. Por otra parte, el promedio angular sobre todas las orientaciones de la molécula aparece de manera natural en el cálculo, el cual está directamente relacionado con el tratamiento del parámetro de impacto del problema. Así, los efectos geométricos serán evidentes debido a este hecho. Para el caso de un orbital centrado en el origen, el cuál no depende de R_1 , la ecuación (3.12) se reduce al caso atómico de Brice, como es de esperarse.

Aún en el caso de la molécula de hidrógeno, el tratamiento vía la representación LCAO de los orbitales moleculares resulta sumamente complejo como lo mostraron Brice y Cruz, lo cual representa un serio problema para estudiar moléculas más complicadas. Como veremos a continuación, el uso de orbitales moleculares localizados en la representación de Funciones Gaussianas Esféricas Flotantes (FSGO) ha permitido avanzar notablemente en la solución del problema.

3.3 Representación FSGO de orbitales moleculares localizados

Por ser de interés central en este trabajo el uso de los Orbitales Gaussianos Esféricos Flotantes (FSGO) en esta sección daremos una breve descripción del método seguido por Frost [53,54] para representar los orbitales moleculares localizados

Descripción del método de Frost para FSGO:

Consideremos un sistema con número par de electrones ($2n$) ocupando n orbitales localizados, ésto es con el fin de que el

método converja a la representación enlace-valencia. Los orbitales ψ_i ($i=1$ hasta n) no necesariamente deben ser ortogonales. Cada orbital puede ser clasificado como: orbital de capa interna (carozo), orbital de enlace y orbital de pares solitarios.

El modelo de orbitales localizados consiste en el uso de un método variacional para la energía, con el fin de determinar la localización de los orbitales que sea óptima. Sin embargo para calcular algunas propiedades físicas de la molécula se requiere que los orbitales sean ortonormales, para este fin se utiliza el método de Löwdin [55] para ortonormalización simétrica, que en notación matricial es:

$$X = \phi T^{1/2} \quad (3.13)$$

donde $T=S^{-1}$ es el inverso de la matriz de traslape S definida por:

$$S_{ij} = \int \phi_i^* \phi_j \, d\tau \quad (3.14)$$

con X y ϕ los vectores columna de los correspondientes orbitales ortogonalizados y no ortogonales. El método de Frost es aplicable a cualquier conjunto de orbitales. Sin embargo el tratamiento más simple para el modelo de orbitales localizados es cuando ϕ_i es de la forma (orbital gaussiano esférico):

$$\psi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \left(\frac{2}{\pi \rho_i^2} \right)^{3/2} \exp \left[-(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)^2 / \rho_i^2 \right] \quad (3.15)$$

donde ρ_i es el radio del orbital y \mathbf{R}_i su posición. Así, cada par de electrones en un orbital carozo, de enlace o par solitario está representado por la ecuación (3.15). Este modelo sólo permite considerar sistemas de capa cerrada.

Una de las ventajas que tiene el modelo de Frost es que permite "visualizar" los orbitales de las moléculas mediante esferas. Esto se debe a que en la ecuación (3.15) ρ_i representa el radio de una esfera que contiene alrededor del 74% de la

densidad de carga electrónica. En base a esto, la molécula se puede representar como un conjunto de esferas localizadas que representan a los enlaces, carozos y pares solitarios.

Como un ejemplo del método, consideremos a la molécula de Metano CH_4 [figura (3.2a)]

La molécula de Metano CH_4 está compuesta de 4 átomos de Hidrógeno y uno de Carbono; el Carbono consta de 6 electrones, 2 en el orbital 1s, capa K y 4 en la capa L, como estos 4 electrones forman los electrones de valencia, cada electrón se enlazaré con el electrón de un átomo de hidrógeno para formar un enlace covalente, así, representando este enlace como una concentración de carga mediante un orbital FSGO el cual llamaremos el orbital del enlace C-H, tendremos 4 de estos y por último representando el orbital 1s con sus dos electrones por otro orbital FSGO el cual llamaremos como carozo. Minimizando la energía molecular Frost encuentra los valores de ρ_1 y R_1 de los orbitales moleculares localizados. En la figura (3.2a-3.2c) se representan a las moléculas de CH_4 , H_2 y O_2 .

Sin embargo, cuando Frost formuló el modelo de los orbitales FSGO, medía R_1 a partir de un origen escogido ya sea en el centro de simetría de la molécula o en cualquier otra posición dentro de la molécula -por ejemplo en un núcleo- si ésta no es simétrica. Para moléculas extendidas es conveniente dividir las en grupos moleculares o fragmentos. Un fragmento molecular corresponderá a ciertos grupos funcionales identificables en la estructura de la molécula y ubicados en la región centrada en un núcleo de un átomo pesado donde el carozo y los otros orbitales se "compactan" juntos.

En la figura (3.3) se representa la molécula de propileno para representar esquemáticamente como serían los fragmentos.

Debemos notar que los orbitales de enlace entre dos fragmentos moleculares han sido compartidos por estos de acuerdo a su distancia fraccional de los correspondientes núcleos. Así

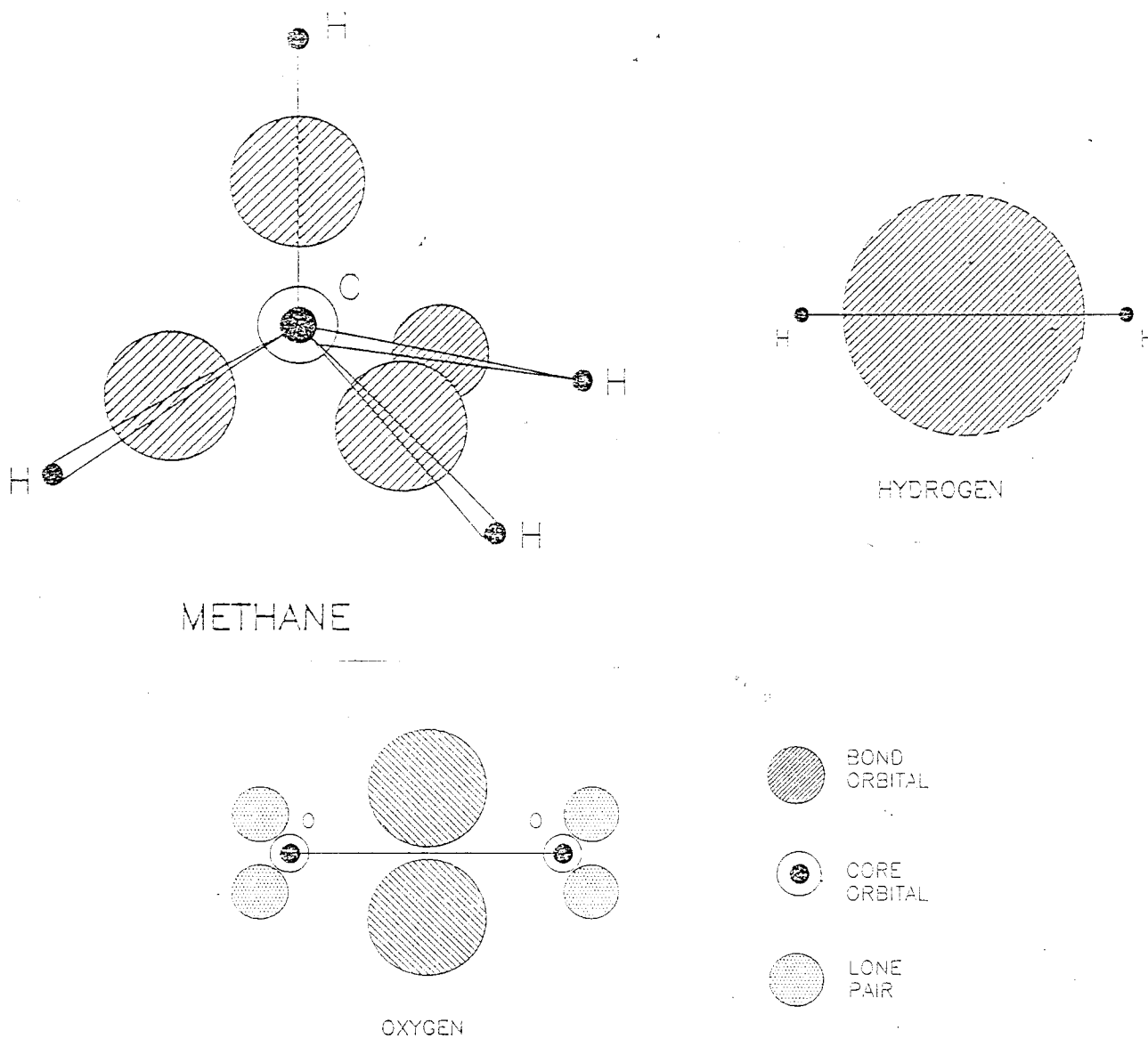


Figura 3.2 Representación esquemática de los orbitales gaussianos esféricos flotantes, FSGO, para las moléculas de a).-Metano, b).-Hidrógeno y c).- Oxígeno mediante orbitales carozos, de enlace y pares solitarios.

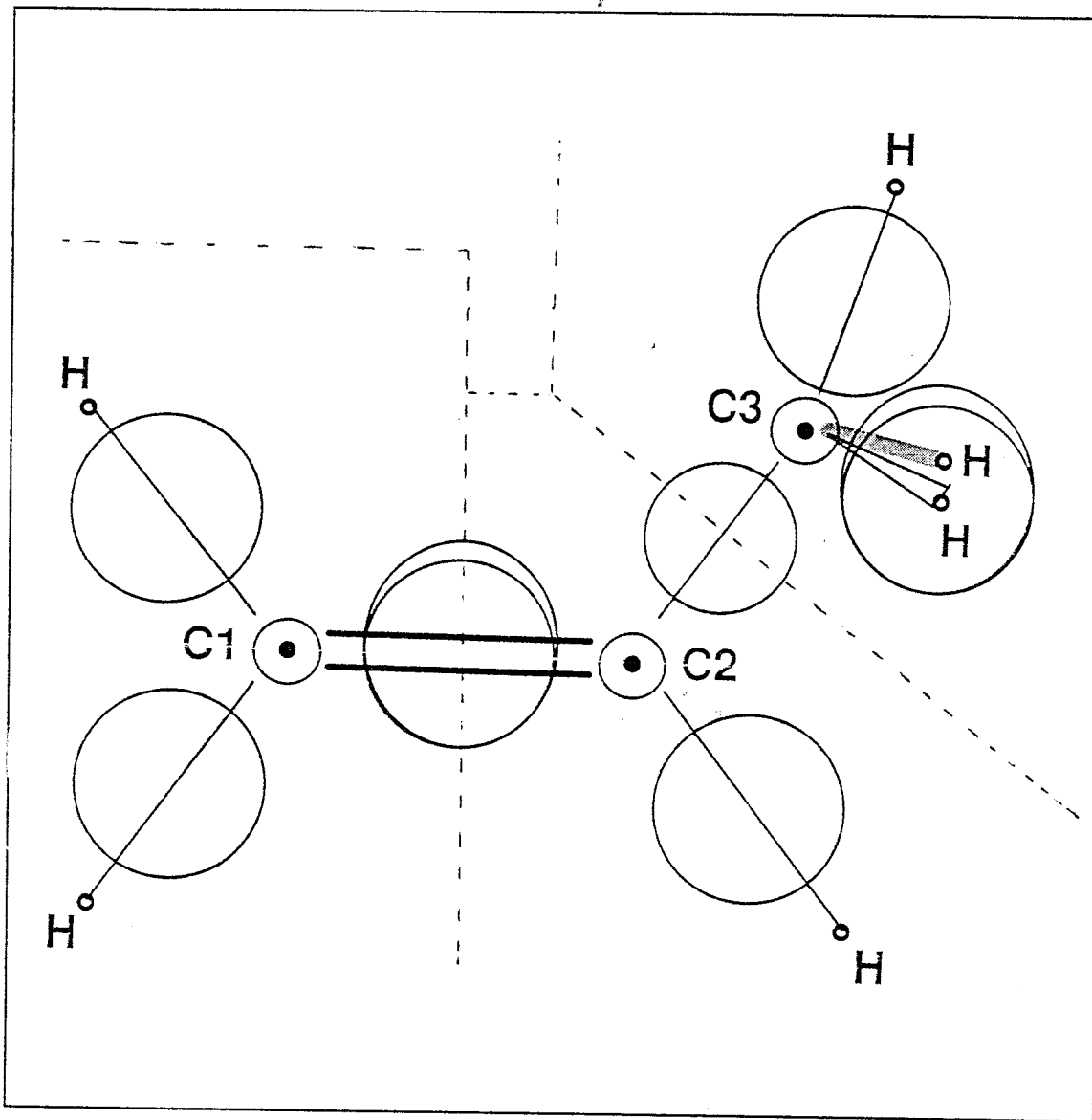


Figura 3.3 Representación de la molécula de propileno para la localización de los orbitales FSGO de carozos y enlaces y su partición en fragmentos

dos fragmentos contiguos (A y B) que comparten el mismo orbital de enlace tienen como factor de partición a:

$$f = 1 - R_A/R_{AB}$$

donde R_A es la distancia entre el origen del fragmento A y el centro del orbital de enlace A - B y R_{AB} es la distancia entre los orígenes de los fragmentos.

De acuerdo a esta idea en la tabla (3.I) se muestran los valores de ρ_i y R_i para los fragmentos en las diferentes moléculas que se encuentran en la literatura [54,56]. Aunque el modelo es muy simplista, las predicciones que se obtienen para algunos parámetros físicos son buenas. Por ejemplo el cálculo de la energía total de la molécula lo predice con un error del orden del 13% [53], predice razonablemente bien los Perfiles Compton de la molécula [57]. También muy importante, es que predice la densidad electrónica molecular con una buena precisión como lo podemos observar de la figura (3.4) en donde se muestra la densidad electrónica radial para el caso de las capas K y L en el caso del Sodio con una sola gaussiana no ortogonal por cada par de electrones comparada con el caso de orbitales ortogonales de Hartree-Fock-Slater [41]. Con esto se muestra que no es grave utilizar orbitales FSGO no ortogonales, dado que contienen el 87% de la información orbital.

De este análisis vemos que:

- Los orbitales FSGO son adecuados para la representación de los enlaces de las moléculas.
- Podemos utilizar una gaussiana para representar el orbital.
- Y por último, como veremos más adelante, son ideales para el tratamiento de la pérdida de energía.

3.4 Efecto de enlaces químicos en la sección de frenamiento de protones a bajas velocidades [58]

La distinción clara que permite el tratamiento de Frost entre carozos, enlaces y pares solitarios (lone-pairs) permite subdividir al frenamiento molecular en:

TABLA 3.I^a

Molécula	Fórmula	Fragmento	Orbital	ρ_i	R_i	
Alcanos						
Metano	CH ₄	CH ₄	C	0.328	0.000	
			C-H	1.694	1.256	
Etano	C ₂ H ₆	·CH ₃	C	0.328	0.000	
			C-H	1.695	1.283	
			C-C	1.646	1.418	
Propano	C ₃ H ₈	·CH ₂ ·	C	0.328	0.000	
			C-H	1.699	1.307	
			C-C	1.647	1.444	
		·CH ₃	C	0.328	0.000	
			C-H	1.697	1.281	
			C-C	1.647	1.444	
Ciclopropano	C ₃ H ₆	·CH ₂ ·	C	0.328	0.000	
			C-H	1.683	1.281	
			C-C	1.770	1.449	
Alquenos						
Etileno	C ₂ H ₄	:CH ₂	C	0.328	0.000	
			C-H	1.642	1.269	
			C=C	1.794	1.281	
Propileno	C ₃ H ₆	:CH ₂	C	0.328	0.000	
			C-H	1.649	1.292	
			C=C	1.796	1.310	
		·CH :	C-H	1.645	1.271	
			·CH ₃	C-H	1.688	1.262
				C-C	1.620	1.408
Alquinos						
Acetileno	C ₂ H ₂	:CH	C	0.328	0.000	
			C-H	1.581	1.213	
			C≡C	1.781	1.164	

continúa ...

continuación ...

Molécula	Fórmula	Fragmento	Orbital	ρ_i	R_i	
Alcoholes^b Metanol	CH ₃ OH	·OH	O	0.240	0.000	
			LP(O)	1.358	0.100	
			O-H	1.340	0.634	
				O-C	1.340	0.634
		·CH ₃	C	0.328	0.000	
			C-H	1.673	1.234	
Aminas^b Metilamina	CH ₃ NH ₂	·NH ₂	N	0.277	0.000	
			LP(N)	1.489	0.332	
			N-H	1.554	0.799	
			N-C	1.554	0.799	
		·CH ₃	C-H	1.673	1.234	
			Trimetilamina (CH ₃) ₃ N	·N·	N	0.277
LP(N)	1.489	0.332				
N-C	1.554	0.799				
·CH ₃	H-C	1.673		1.234		
	Moléculas diatómicas	Nitrógeno N ₂		N	0.277	0.000
				LP(N)	1.489	0.332
N≡N			1.449	1.027		
Oxígeno O ₂		:O	O	0.240	0.000	
			LP(O)	1.271	0.150	
			O:O	1.264	1.020	
Monóxido de Carbono CO	CO	C:	C	0.328	0.000	
			LP(C)	1.489	0.574	
			O:	O	0.277	0.000
		C≡O		1.348	0.367	
		LP(O)		1.358	0.227	

continúa ...

continuación ...

Molécula	Fórmula	Fragmento	Orbital	ρ_i	R_i
Agua	H ₂ O	H ₂ O	O	0.240	0.000
			LP(O)	1.331	0.102
			O-H	1.308	0.564
Amoniaco	NH ₃	NH ₃	N	0.277	0.000
			LP(N)	1.627	0.160
			N-H	1.554	0.799
Sulfide	H ₂ S	H ₂ S	<i>S_{capa K}</i>	0.115	0.000
			<i>S_{capa L}</i>	0.438	0.017
			LP(S)	1.955	0.422
			S-H	1.806	1.089

Valores de los parámetros para los orbitales FSGO en unidades atómicas.

a Valores tomados de la referencia [53,54].

b Las demás moléculas de este tipo que aparecen en las siguientes tablas contienen los mismos valores de los parámetros para los correspondientes orbitales.

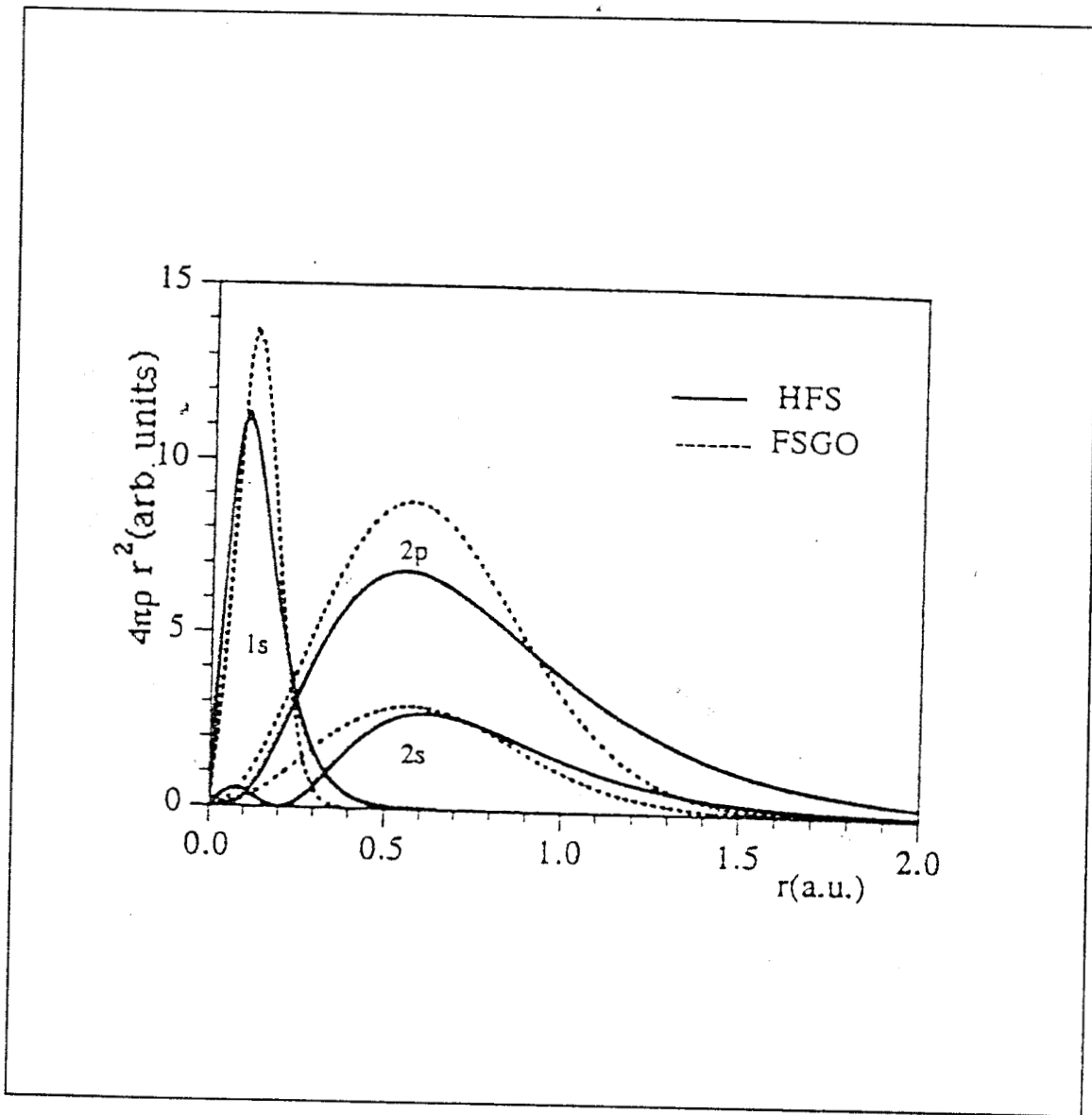


Figura 3.4 Distribución de carga radial para los orbitales de Sodio (Na) 1s, 2s y 2p mediante orbitales de una sólo Gaussiana FSGO (línea punteada) y orbitales HFS (curva continua)

$$S_e(\text{molécula}) = S_e(\text{carozo}) + S_e(\text{enlaces}) + S_e(\text{pares solitarios})$$

Por otra parte, dada la posibilidad de tratar la estructura molecular, en el esquema de los orbitales FSGO, mediante fragmentos moleculares, podemos escribir a la sección de frenamiento como:

$$S_e = \sum_f S_{e,f} \quad , \quad (3.16)$$

donde la suma es sobre los fragmentos y:

$$S_{e,f} = \sum S_{e,f}(\text{carozo}) + \sum S_{e,f}(\text{enlaces}) + \sum S_{e,f}(\text{pares solitarios}) \quad (3.17)$$

lo cual es consistente con el método de carozos y enlaces (CAB) propuesto por varios autores [59]. Así, se evalúa la contribución de cada fragmento molecular y luego se suma sobre los fragmentos de la molécula para obtener la contribución total de S_e .

Como mencionamos en la introducción del capítulo, experimentalmente existe una fuerte evidencia que respalda el uso del concepto de fragmentos moleculares en el análisis del frenamiento como lo han dado a conocer Kreutz et. al. [59] y Thwaites [45] quienes han sugerido que la sección de frenamiento molecular pueda expresarse como la contribución de grupos moleculares característicos.

Por lo tanto, para obtener la contribución por orbital para S_e , utilizamos la ecuación (3.12) mediante el uso de orbitales FSGO [ecuación (3.15)].

Tomando la transformada de Fourier de la ecuación (3.15) y haciendo la integración en coordenadas cartesianas, tenemos que:

$$\varphi_i(\mathbf{k}) = \left(\frac{\rho_i^2}{2\pi} \right)^{3/2} e^{-k^2 \rho_i^2 / 4} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i}$$

para calcular la sección de frenamiento necesitamos calcular la derivada parcial respecto a k_ζ , así:

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial k_\zeta} = \left(\frac{\rho_i^2}{2\pi} \right)^{3/4} \left[-\frac{1}{2} k_\zeta \rho_i^2 - i R_\zeta \right] \exp\left(\frac{-k^2 \rho_i^2}{4} - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R} \right)$$

con lo cual:

$$\left| \frac{\partial \varphi_i}{\partial k_\zeta} \right|^2 = \frac{\partial \varphi_i}{\partial k_\zeta} \frac{\partial \varphi_i^*}{\partial k_\zeta} = \left(\frac{\rho_i^2}{2\pi} \right)^{3/2} \left[\frac{k_\zeta^2 \rho_i^4}{4} + R_\zeta^2 \right] e^{-k^2 \rho_i^2 / 2}.$$

Sustituyendo en la ecuación (3.12) para el cálculo de la sección de frenamiento y haciendo las integraciones, lo cual se lleva a cabo fácilmente, obtenemos:

$$S_{e,i} = \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} \frac{\hbar u}{8\pi\alpha_i^3 \rho_i} \int d\Omega_\zeta \left\{ 1 + 2 \frac{R_\zeta^2}{\rho_i^2} \right\}.$$

Como vemos, ésta es una relación bastante sencilla para el cálculo de S_e y de manera natural aparece el promedio sobre la orientación de la molécula. De la figura (3.1) vemos que $d\Omega_\zeta = \sin \gamma \, d\gamma \, d\vartheta$ y $R_\zeta = R \cos \gamma$, que utilizándola en la ecuación anterior obtenemos:

$$\langle S_{e,i} \rangle = 2 \left(\frac{\pi}{8} \right)^{1/2} \frac{\hbar v}{\alpha^3} \rho_i \left\{ 1 + \frac{2}{3} \frac{R_i^2}{\rho_i^2} \right\} \quad (3.18)$$

donde el factor 2 se debe a que cada orbital representa un par de electrones. Como vemos, el modelo de las orbitales FSGO permite calcular de manera muy sencilla la sección de frenamiento a partir de la relación (3.18). Aquí queda mostrada la dependencia

de S_e sobre el tamaño y posición de los diferentes orbitales que componen la molécula, como ya lo habíamos vislumbrado en el capítulo anterior.

Unicamente nos resta calcular la posición del plano de Firsov para cada FSGO. El potencial producido por un orbital gaussiano a una distancia r es:

$$|V_b| = \frac{|q_b e|}{r}$$

y el producido por el proyectil:

$$|V_p| = \frac{|q_p e|}{r}$$

El plano de Firsov está colocado en el punto donde se cumple que:

$$V_b(r) = V_p(R-r)$$

[ver figura (3.6)] donde R es la separación entre el orbital localizado FSGO y el protón, entonces

$$\frac{|q_b|}{r} = \frac{|q_p|}{R-r} \quad \text{o} \quad r = R \frac{|q_b|}{|q_b| + |q_p|}$$

pero como α_1 es la posición fraccional del plano a partir del orbital al que se le calcula la contribución, en este caso el orbital FSGO, entonces:

$$\alpha = \frac{r}{R} = \frac{|q_b|}{|q_b| + |q_p|}$$

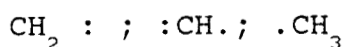
ahora, para el proyectil $q_p = Z_p = 1$, por lo que:

$$\alpha = \frac{|q_b|}{|q_b| + 1} \quad (3.19)$$

sí el orbital es un orbital de enlace o un par solitario entonces $q_b = 2$ (2 electrones), sin embargo si es un orbital carozo,

entonces hay que considerar los dos electrones del orbital y la carga nuclear del átomo en cuestión, por lo que $q_b = Z_c - 2$ donde Z_c es la carga nuclear alrededor de la cual el orbital carozo está centrado. Claramente para un FSGO asociado a un enlace o a un par solitario $\alpha = 2/3$ y para el carozo dependerá de Z_c , para el caso de protones como proyectil.

Como un ejemplo numérico del método desarrollado hasta aquí, apliquemoslo al caso de Propileno, para mostrar el procedimiento. En el caso de la molécula de Propileno C_3H_6 , los fragmentos serían [ver figura (3.3)]:



por lo que:

$$S_e (C_3 H_6) = S_e (:CH_2) + S_e (:CH.) + S_e (.CH_3) .$$

En este caso el factor de partición f es $f = 1/2$ para todos los enlaces como lo reporta Blustin et. al. [60], por lo que la contribución por fragmento es:

$$S_e (:CH_2) = S_e (C) + 2 S_e (C - H) + \frac{1}{2} S_e (C = C) ,$$

$$S_e (:CH.) = S_e (C) + S_e (C - H) + \frac{1}{2} S_e (C = C) + \frac{1}{2} S_e (C - C) ,$$

$$S_e (.CH_3) = S_e (C) + 3 S_e (C - H) + \frac{1}{2} S_e (C - C) ,$$

donde utilizando la ecuación (3.18) y los valores para los parámetros ρ_i y R_i tabulados en la tabla (3.I) y notando que R_i está definido respecto al origen de su correspondiente fragmento molecular, encontramos que:

$$S_e (:CH_2) = 23.43$$

$$S_e (:CH.) = 19.79$$

$$S_e (.CH_3) = 26.94$$

por lo que la contribución total de la molécula es:

$$S_e(C_3H_6) = 70.16$$

En la tabla (3.II) se reportan las contribuciones a S_e para los orbitales FSGO, utilizando los valores para ρ_i y R_i tomados de la tabla (3.I) de los correspondientes fragmentos. De esta tabla notamos que la contribución de cada tipo de enlace no varía apreciablemente de un sistema a otro, aún si su estructura es completamente diferente. Podemos por lo tanto, considerar el valor promedio por orbital en la contribución a la sección de frenamiento. Para probar esta idea, se han extraído los grupos característicos de las diferentes moléculas de la tabla (3.II) y se ha calculado su contribución a S_e . Para los mismos fragmentos se ha promediado su contribución y se compara con la contribución promedio por fragmento obtenida a partir de la contribución promedio por orbital para el mismo fragmento, en la tabla (3.III) se muestran los resultados de este ejercicio. Como podemos darnos cuenta el uso de cantidades promedio para carozos y enlaces nos da contribuciones completamente razonables comparadas con aquellas obtenidas directamente. Estos resultados sugieren que al menos para hidrocarburos, la sección de frenamiento electrónico debida a fragmentos moleculares puede ser tratada como independiente del resto de la molécula, lo que está de acuerdo con los resultados de Kreutz et. al. [59] como ya lo habíamos mencionado.

En la tabla (3.IV) se muestran la contribución total a S_e de varios hidrocarburos mediante el empleo de la contribución promedio de los fragmentos tomados de la tabla (3.II) y se compara con los correspondientes valores semi-empíricos de Ziegler y Manoyan [15] y los predichos por la teoría cinética en base a la aproximación de plasma local obtenidos por Oddershede y Sabin [51] para protones incidiendo con velocidad igual a la Bohr, i.e. $v=v_0$. En la figura (3.5) se comparan las predicciones de modelo para protones de baja velocidad ($v \leq v_0$) incidiendo en etileno y benceno con los resultados experimentales de Reynolds et. al. [61] y con las correspondientes predicciones de Ziegler y

TABLA 3.II

Molécula	Fórmula	S(C)	S(C-H)	S(C-C)	S(C=C)	S(C≡C)
Metano	CH ₄	0.612	7.462			
Acetileno	C ₂ H ₂	0.612	7.093			22.116
Etileno	C ₂ H ₄	0.612	7.397		15.490	
Etano	C ₂ H ₆	0.612	7.547	7.935		
Ciclopropano	C ₃ H ₆	0.612	7.517	8.251		
Propano	C ₃ H ₈	0.612	7.635 ^a	8.026		
			7.545 ^b			
Propileno	C ₃ H ₆	0.612	7.489 ^c	7.849	15.676	
			7.411 ^d			
			7.467 ^a			
Promedio		0.612	7.456	8.015	15.583	22.116

Sección de frenamiento electrónico por enlace para protones incidiendo a la velocidad de Bohr en algunos hidrocarburos.

- a Enlace C-H del grupo molecular -CH₃ de esta molécula.
- b Enlace C-H del grupo molecular -CH₂- de esta molécula.
- c Enlace C-H del grupo molecular CH₂ = de esta molécula.
- d Enlace C-H del grupo molecular = CH- de esta molécula.

TABLE 3.III

Grupo	Molécula	S_e^a	$\langle S_e \rangle^b$
H	Propano	27.53	
	Etano	27.22	
H - C·	Propileno	26.93	
H	promedio	27.23	26.99
H	Propano	23.73	
	Ciclopropano	23.90	
·C·			
	promedio	23.81	23.54
H			
H	Etileno	23.15	
	Propileno	23.43	
C :			
	promedio	23.29	23.32
H			
H	Propileno	19.79	19.87
: C·			
: C - H	Acetileno	18.76	19.13

Grupos moleculares característicos de algunas moléculas de Hidrocarburos y su contribución a S_e para protones incidentes a v_0 . Las unidades son 10^{-15} eV cm²/grupo. Ver texto para detalles.

El punto en el enlace indica una partición $f = \frac{1}{2}$

a Calculada a partir de los valores específicos de la tabla 3.II

b Calculada con los valores promedio de la tabla 3.II.

TABLA 3.IV

Blanco	Fórmula	S_z^a	$S_z(ZM)^b$	$S_z(OS)^c$
Aleno	C_3H_4	62.61	52.97	58.81
Butano	C_4H_{10}	101.99	86.06	99.54
Cicloexano	C_6H_{10}	134.54	109.77	123.04
Ciclobutano	C_4H_8	94.91	77.73	88.33
Ciclohexano	C_6H_{12}	142.36	116.60	151.17
Ciclooctano	C_8H_{14}	181.99	148.63	167.03
Ciclopentano	C_5H_{10}	118.64	97.17	110.42
Ciclopropano	C_3H_6	71.18	58.30	66.50
n-Decaeno	$C_{10}H_{22}$	244.36	202.66	232.25
Fenilacetileno	C_8H_6	150.24	120.83	N/A
Polietileno	$[C_2H_4]_n$	46.2	38.87	44.17
Poliestileno	$[C_8H_8]_n$	159.25	126.64	136.82
Tolueno	C_7H_8	142.61	115.54	127.22
Xileno	C_8H_{10}	166.34	134.98	148.29

a Este trabajo, usando los valores promedio de la tabla 3.II.

b Ver referencia [15]. Estos valores se toman a 26 keV.

c Ver referencia [51].

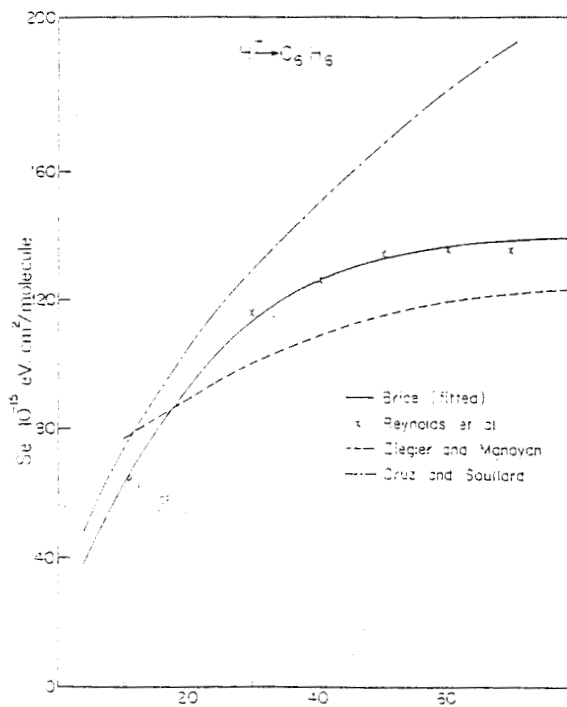
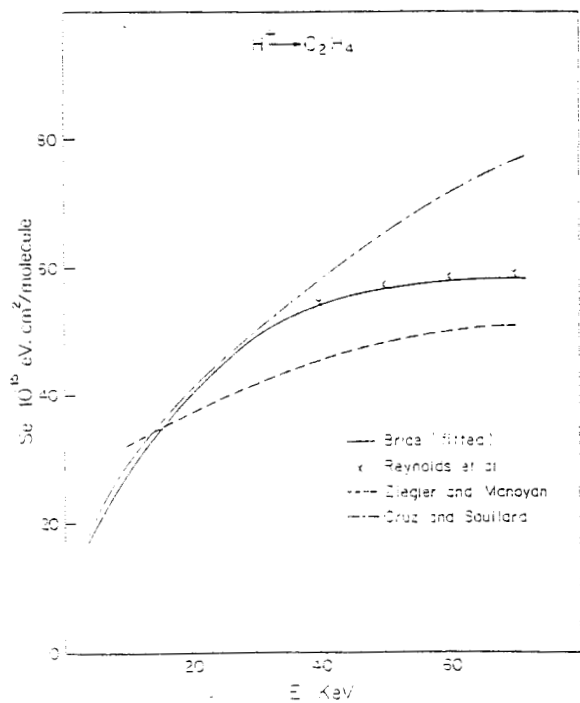


Figura 3.5 Sección de frenamiento electrónico en la región de bajas energías para protones incidentes en etileno y benceno respectivamente. La línea continúa es el ajuste experimental de Brice [42], x son los datos experimentales de Reynolds et al. [61]. ---- es la predicción del programa TRIM-91 [15]. La línea con punto es el modelo expuesto en éste trabajo. Figura tomada de la referencia [58].

Manoyan [15], por completez se compara con el ajuste de Brice [42].

Con lo expuesto hasta aquí, notamos que las predicciones de este modelo comparadas con el experimento muestran un error menor al 10%, lo cual está dentro del error experimental en esta región. Aparte de la sencillez del modelo y de las predicciones razonables dentro de la región de validez, debemos enfatizar que carece de parámetros ajustables al experimento.

En la siguiente sección, veremos como este análisis se puede generalizar para iones pesados como proyectiles.

3.5 SECCION DE FRENAMIENTO PARA IONES PESADOS A BAJAS ENERGIAS [62].

Hasta ahora los esfuerzos teóricos han sido enfocados a la pérdida de energía de protones debido a blancos moleculares para tomar en cuenta el efecto del enlace químico. Sin embargo, aún no existe una teoría que considere el frenamiento de iones pesados. La tarea de enfrentarse con este problema es enorme. Aparte de las características del enlace del blanco molecular y el estado de agregación del medio, la naturaleza de muchos cuerpos del problema impone serias limitaciones sobre su tratabilidad. En general en el caso más simplificado, las propiedades dinámicas del proyectil y blanco deben ser consideradas en detalle durante el proceso de la colisión. Tal es el caso de, digamos, procesos de captura y pérdida de electrones, al cuál ya se dió una somera explicación en la sección 2.3.1

Como un primer paso en el análisis de este complicado problema, es meritorio considerar un modelo simple el cuál nos permita vislumbrar cualitativa y cuantitativamente el efecto del enlace químico en el proceso de frenamiento del ion. Con esta idea presentamos en esta sección las predicciones del modelo de Firsov para la sección de frenamiento electrónico de iones en la región de bajas velocidades penetrando en medios complejos, por ejemplo, hidrocarburos, N_2 , O_2 , CO , H_2O , NH_3 y H_2S . El análisis se llevará a cabo para proyectiles con $2 \leq Z \leq 18$ pudiendose extender para cualquier proyectil.

Antes de proceder en el análisis del problema, el lector debe saber de las limitaciones de los cálculos, contenidas en el modelo de Firsov.

- El modelo de Firsov es válido para velocidades del proyectil menores a la velocidad de Bohr, i. e. $v \leq v_0$.
- Se supone que el proyectil y blanco retienen todos sus electrones durante el proceso de la colisión.

3.5.1 Método de Cálculo.

De acuerdo a Firsov [ecuación (3.4)], la sección de frenamiento electrónico es la contribución de una combinación lineal del flujo de electrones a través de un plano hipotético colocado en el mínimo del potencial entre el proyectil y blanco *i.e.*

$$\sigma = \sigma_p + \sigma_b \quad (3.20)$$

y de aquí la sección de frenamiento electrónico está dada por:

$$S_e = S_{e,p} + S_{e,b} \quad (3.21)$$

donde *p* y *b* especifican el proyectil y blanco respectivamente. Esta propiedad nos permite tratar separadamente la contribución a S_e del proyectil y blanco.

Como ya vimos para el tratamiento molecular, la contribución del blanco a S_e se da a través de la representación del carozo, los enlaces y pares solitarios por orbitales gaussianos doblemente ocupados (FSGO) y su apropiada descomposición en fragmentos moleculares como lo analizamos en la sección anterior. De esto, la contribución a S_e de un orbital molecular está dada por [ecuación (3.18)]:

$$\langle S_{e,i} \rangle = 2 \left(\frac{\pi}{8} \right)^{1/2} \frac{\hbar u}{\alpha_i^3} \rho_i \left[1 + \frac{2}{3} \frac{R_i^2}{\rho_i^2} \right] \quad (3.22)$$

donde ρ_i denota el radio del orbital y R_i su posición relativa al origen de su correspondiente fragmento molecular. α_i indica la posición fraccional, medida desde el orbital *i*, donde el plano hipotético de Firsov es definido. La contribución total a la sección de frenamiento debida al blanco es:

$$S_{e,b} = \sum S_{e,carozos} + \sum S_{e,enlaces} + \sum S_{e,pares\ solitarios} \quad (3.23)$$

como vemos, para el caso del blanco, el método expuesto anteriormente es de carácter general y puede ser utilizado con ligeras modificaciones para el caso de proyectiles pesados como veremos a continuación.

Desde el punto de vista de la contribución molecular a S_e cuando consideramos a un proyectil pesado, de acuerdo a la ecuación (3.22), la única cantidad que requiere un análisis más detallado es la posición fraccional, α_i , en la cual se define el plano de Firsov. En la sección anterior para el caso de protones, α_i fue calculada analíticamente usando argumentos electrostáticos simples, tratando al protón y a la carga asociada a el orbital FSGO como entidades puntuales. Sin embargo, cuando un proyectil pesado es considerado, la distribución espacial debida a la densidad de carga necesita ser incluida en detalle. Para esto, debemos calcular el potencial electrostático producido por el proyectil y por el orbital FSGO.

Sea W_{HF} el potencial electrostático debido al proyectil y W_{FSGO} el del orbital molecular. La posición r , en la cual el plano de Firsov está colocado entre el orbital molecular i y el proyectil es tal que:

$$| W_{FSGO}(r) | = | W_{HF}(R - r) | \quad (3.24)$$

con lo cual la posición fraccional del plano de Firsov medida desde el orbital i es:

$$\alpha_i = \frac{r}{R} \quad (3.25)$$

donde r es medido desde el orbital molecular i y R es la separación entre el proyectil y orbital molecular i .

Para evaluar el potencial electrostático debido al proyectil, necesitamos conocer la distribución electrónica de

éste. Para ésto, describimos a un orbital atómico del proyectil como una combinación lineal de orbitales del tipo Hartree-Fock-Slater (HFS), por lo tanto:

$$\psi(r) = \sum_p C_p r^{n_p-1} e^{-\xi_p r} Y_{\lambda}^{\mu}(\hat{r}) \quad (3.26)$$

donde:

$$C_p = \left[(2\xi_p)^{2n_p+1} / \Gamma(2n_p+1) \right]^{1/2} a_p \quad (3.27)$$

las cantidades a_p , ξ_p y n_p son tabuladas por Clementi et. al. [41], Y_{λ}^{μ} son los armónicos esféricos. En base a ésto, la densidad electrónica del orbital λ está dada por $\rho_{\lambda}(r) = \psi_{\lambda}^*(r) \psi_{\lambda}(r)$. Con ayuda de la ecuación de Poisson para la densidad de carga radial encontramos que el potencial electrostático debido al orbital λ es (ver el Apéndice D):

$$W_{\lambda}(r) = \sum_{p,q} C_p C_q \frac{\nu!}{\eta^{\nu+1} r} e^{-\eta r} V_{p,q} \quad (3.28)$$

donde

$$V_{p,q} = 1 + \sum_{k=2}^{\nu} \frac{(k-2)!}{k!} \sum_{\tau=0}^{k-2} \frac{(\eta r)^{\tau+1}}{\tau!}$$

y η, ν están definidas por:

$$\nu = n_p + n_q \quad \text{y} \quad \eta = \xi_p + \xi_q$$

El potencial electrostático total a una distancia r del núcleo es la superposición de la contribución de los orbitales i.e.:

$$W_{HF}(r) = \sum_{\lambda} w_{\lambda} W_{\lambda}(r) \quad (3.29)$$

donde w_{λ} es la población del orbital λ . Siguiendo el mismo procedimiento para el caso del orbital molecular, en el mismo Apéndice D, encontramos que para los orbitales FSGO:

$$W_{FSGO}(r) = \left[Z_{c,i} - 2 \operatorname{erf} \left(\sqrt{2} \frac{r}{\rho_i} \right) \right] r^{-1} \quad (3.30)$$

donde ρ_i es el radio del orbital y $Z_{c,i}$ es la carga del núcleo al que se asocia el orbital carozo (para los enlaces y los pares solitarios $Z_{c,i}=0$), y $\text{erf}(x)$ es la función de error [13].

En contraste con el caso para protones, para iones pesados la ecuación (3.24) no se puede resolver analíticamente, por lo que es necesario resolverla numéricamente para conocer r y de ahí conocer α_i ; para esto, se realizó un programa en Fortran. Sin embargo, al resolverla muestra una dependencia implícita sobre la distancia relativa R , i. e. para cada valor diferente de R , α_i cambia ligeramente. Entonces calculando un promedio para α_i para varios valores de R , como :

$$\langle \alpha_i \rangle = \frac{1}{(R_{\max} - R_0)} \int_{R_0}^{R_{\max}} \alpha_i (R) dR \quad (3.31)$$

donde R_0 es el mínimo parámetro de impacto medido desde el proyectil a un fragmento molecular que contiene el orbital i y R_{\max} es la distancia para la cual, el potencial de interacción entre el proyectil y el fragmento es de 10^{-3} Hartree o 0.1272 eV. Como estamos en la suposición de trayectoria rectilínea recurrimos a la aproximación de impulso [63,64] para la cuál el mínimo parámetro de impacto satisface:

$$E_0 \vartheta = R_0 \int_{R_0}^{\infty} \left[- \frac{\partial V}{\partial R} \right] (R^2 - R_0^2)^{-1/2} dR \quad (3.32)$$

donde E_0 y ϑ son la energía del proyectil y el ángulo de dispersión en el sistema del laboratorio, respectivamente. $V(R)$ es el potencial de interacción el cual consideramos del tipo Bohr [7,65] puesto que en un estudio llevado a cabo por Cruz et. al. [39] predice valores para R_0 consistentes con aquellos obtenidos a través de potenciales realistas, como lo podemos apreciar de la figura 3.6 (tomada de la referencia [39]).

El potencial de Bohr está definido por:

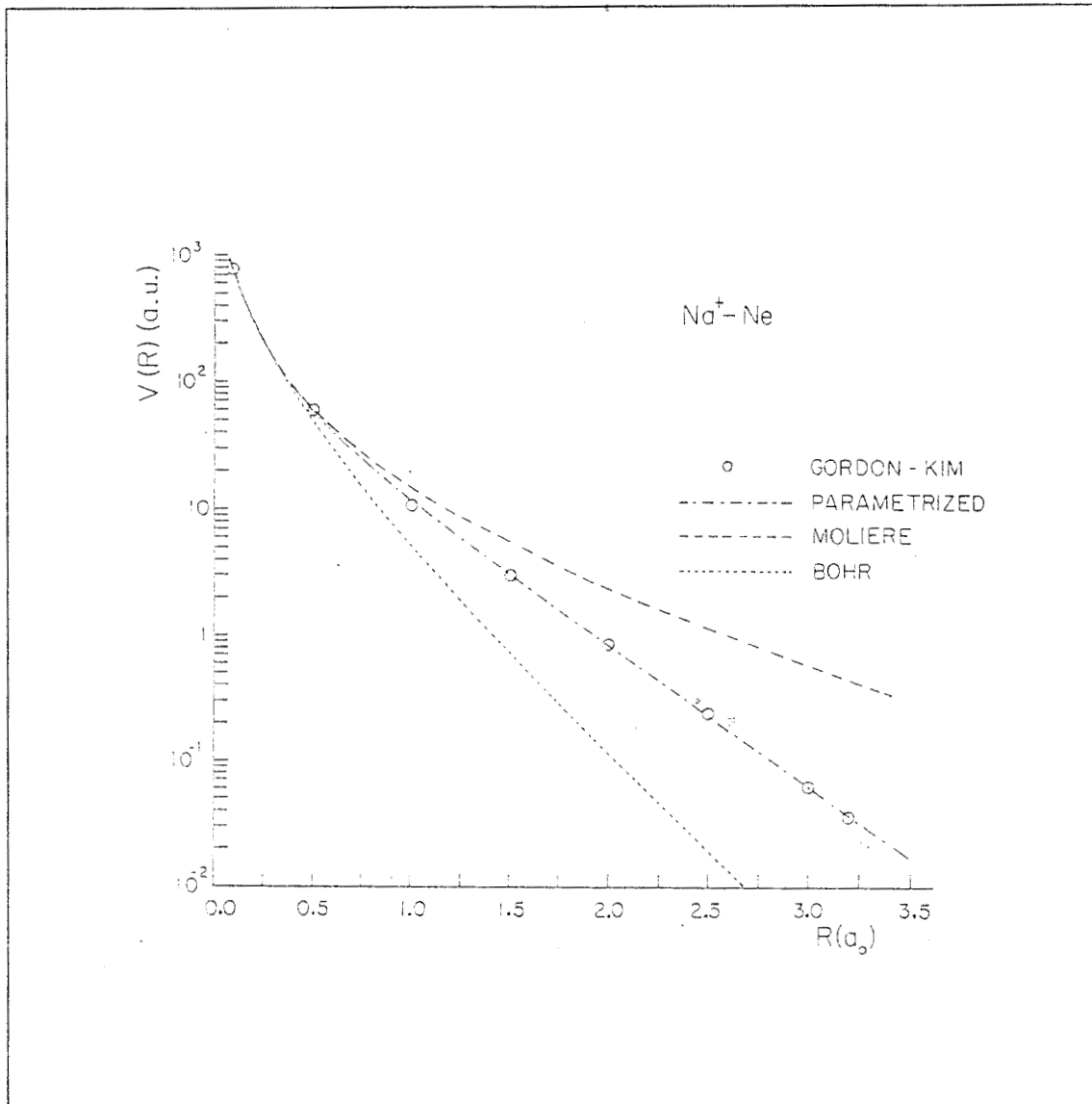


Figura 3.6 Potencial de interacción en la región repulsiva para $\text{Na}^+ - \text{Ne}$ representado mediante el potencial de Bohr, Thomas-Fermi-Moliere y potencial de interacción realístico. Figura tomada de la referencia [39].

$$V(R) = \frac{Z_f Z_p}{R} e^{-R/a} \quad (3.33)$$

con

$$a = \frac{a_0}{\sqrt{Z_f^{2/3} + Z_p^{2/3}}} \quad (3.34)$$

y a_0 es el radio de Bohr, Z_f es el número atómico equivalente asociado al fragmento y Z_p es el número atómico del proyectil. Así, utilizando la ecuación (3.33) en (3.32) se obtiene (ver Everhart et. al. [63]):

$$E_0 \vartheta = \frac{Z_f Z_p}{a} K_1 \left(\frac{R_0}{a} \right) \quad (3.35)$$

Para evaluar la contribución del proyectil a la sección de frenamiento S_e , como lo hemos indicado con anterioridad, consideraremos que el momento transferido a la molécula es una superposición de la contribución a los fragmentos moleculares individuales i.e.

$$S_{e,p} = \sum S_{e,f} \quad (3.36)$$

donde la suma es sobre todos los fragmentos que componen la molécula y $S_{e,f}$ es la contribución del proyectil al fragmento, una vez que el plano de Firsov es definido entre el proyectil y el fragmento. La contribución del proyectil al fragmento la calcularemos a través del uso de los orbitales Hartree-Fock-Slater (HFS) [41] en la ecuación (3.12) i.e.

$$S_{e,f} = \frac{\hbar u}{\alpha_f^3} \sum_{\lambda} w_{\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_z k_z \left| \frac{\partial \varphi_{\lambda}}{\partial k_z} \right|^2 \quad (3.37)$$

donde la suma es sobre todas las capas atómicas del proyectil cuya transformada de Fourier es φ_{λ} y cuya población por orbital es w_{λ} y donde α_f define ahora una posición fraccional - medida desde el proyectil - donde el correspondiente plano de Firsov es

localizado entre un fragmento molecular dado y el proyectil.

Siguiendo el criterio empleado por Kishenevsky [66], el cual considera la posición fraccional α_f medida desde el sistema más pesado como:

$$\alpha_k = \frac{1}{1 + (Z_L/Z_H)^{1/6}} \quad , \quad (3.38)$$

donde Z_H y Z_L es el número de electrones en el sistema más pesado y el ligero respectivamente. De aquí, si el fragmento molecular tiene en número atómico equivalente más grande Z_f que el del proyectil Z_p , entonces $\alpha_f = 1 - \alpha_k$; si no $\alpha_f = \alpha_k$. para que α_f sea medida desde el proyectil.

Además notamos que la dependencia de la contribución a la sección de frenamiento del proyectil sobre el tipo de blanco es a través de α_f . De aquí por conveniencia escribiremos a la ecuación (3.37) como:

$$S_{e,pf} = S_e^* / \alpha_f^3 \quad , \quad (3.39)$$

donde S_e^* solamente está relacionada con las propiedades estructurales del proyectil y por lo tanto, la podemos calcular para todos los proyectiles independientemente del blanco como lo veremos a continuación.

Cruz et. al. [67] encontraron en 1978 que utilizando los orbitales atómicos HFS, calculándoles su transformada de Fourier y sustituyendo en la ecuación (3.39) y después de un álgebra bastante laboriosa en la manipulación de la sección de frenamiento, ésta está dada para el orbital λ con número cuántico azimutal μ por:

$$S_{e,\lambda}^{*(\mu)} = h u a_0 \left\{ \sum_p C_p^2 (2\lambda + 1) \sum_{g,h} (-1)^{g+h} 2^{2(n_p - g - h)} \right.$$

$$P(n_p, \lambda, \mu; g, h) Q(\lambda, \mu; g, h) \xi_p^{-2n_p-2} + (2\lambda + 1) (\lambda + \mu)!$$

$$(\lambda - \mu)! \lambda! \sum_{\substack{p, q \\ p \neq q}} C_p C_q (-1)^{n_p+n_q} D_p^{n-\lambda, n_q-\lambda}$$

$$R(\lambda, \mu; \xi_p, \xi_q) \left. \vphantom{\sum} \right\} \quad (3.40)$$

con C_p dados por la ecuación (3.37) y donde a_p, ξ_p, n_p son cantidades tabuladas por Clementi et. al. [41]. Las funciones P, Q y R son dadas en el Apéndice E, mientras que $D^{a,b}$ es el operador de diferenciación determinado por:

$$D^{a,b} = \frac{\partial^a}{\partial \xi_p^a} \frac{\partial^b}{\partial \xi_q^b}$$

De esto, vemos que S_e es una función de la simetría del orbital. Sin embargo, para un número cuántico dado λ existen $2\lambda + 1$ valores para el número cuántico azimutal μ , entonces la contribución a S_e de electrones con una simetría dada es:

$$S_{e,\lambda}^* = \frac{w_\lambda}{(2\lambda + 1)} \left[2 \sum_{\mu=1}^{\lambda} S_{e,\lambda}^{(\mu)} + S_{e,\lambda}^{(0)} \right] \quad (3.41)$$

con w_λ el número de electrones correspondientes a la simetría λ .

Así la contribución total del proyectil es:

$$S_e^* = \sum_{\lambda} S_{e,\lambda}^* \quad (3.42)$$

Utilizando los valores tabulados para los coeficientes a_p, ξ_p y n_p por Clementi [41] y con la ayuda de un programa en Fortran, se calculó la contribución de los átomos de Helio hasta el Argón ($2 \leq Z \leq 18$) los valores encontrados para S_e^* se tabulan en la Tabla 3.V.

TABLA 3.V

Z_p	S_e^*
2	0.9914
3	2.8725
4	3.4954
5	3.6958
6	3.8641
7	3.8066
8	3.9098
9	3.9010
10	3.9207
11	5.8871
12	6.8669
13	7.2633
14	7.8355
15	8.1859
16	8.4651
17	8.6653
18	8.8169

Tabla 3.V .- Factor S_e^* para la sección de frenamiento electrónico como una función del número atómico del proyectil (ver texto). Todos los valores son calculados para $v = v_0$ y están en unidades de 10^{-15} eV cm²/átomo. Para $11 \leq Z_p \leq 18$ se a utilizado una base mínima para los orbitales Hartree-Fock-Slater del proyectil.

3.6 Aplicación a hidrocarburos.

La estrategia mostrada en la sección anterior a sido aplicada a proyectiles atómicos con $Z \leq 18$ sobre hidrocarburos para los cuales existen los parametros ρ_1 y R_1 del modelo de orbitales FSGO. Subsecuentemente, dado un proyectil, la contribución a S_e de un orbital molecular se calcula a partir de la ecuación (3.22), con α_1 dada a través de las ecuaciones (3.24) a (3.35). En la Tabla (3.VI) se muestran las contribuciones promedio para carozos y enlaces a la sección de frenamiento S_e estimada para cada tipo de proyectil. Cada valor dado en ésta tabla es el resultado de un promedio sobre todas las contribuciones de las diferentes moléculas para el mismo enlace para las cuales existen los parametros FSGO.

Así, con la ayuda de los resultados presentados en las tablas (3.V) y (3.VI) y con las ecuaciones (3.21), (3.23) y (3.39) podemos calcular la contribución a la sección de frenamiento de cualquier blanco de hidrocarburo que contenga los carozos y enlaces mostrados en la tabla (3.VI).

Antes de continuar analicemos el valor de S_e para algún grupo molecular característico y comparemos con la correspondiente cantidad extraída experimentalmente por el grupo de Köln [59] para proyectiles de Litio.

Tomemos como ejemplo el grupo $\cdot C_2 H_3$ donde "." indica que estamos considerando un medio enlace. El grupo lo podemos visualizar en términos de los orbitales FSGO como se muestra en la figura (3.7). En base a esto identificamos dos fragmentos moleculares para este grupo: ($:CH_2$) y ($\cdot CH:$). De acuerdo a la ecuación (3.36) la contribución del proyectil está dada por:

$$S_{e,p} = S_{e,p}(\text{Li} \rightarrow :CH_2) + S_{e,p}(\text{Li} \rightarrow \cdot CH:) \quad (3.43)$$

debemos por lo tanto, calcular α_f medida desde el proyectil hacia el fragmento. De la ecuación (3.38), para el fragmento $:CH_2$,

TABLA 3.VI

Z_p	$S_e(C)$	$S_e(C - H)$	$\frac{1}{2}S_e(C - C)$	$\frac{1}{2}S_e(C = C)$	$\frac{1}{2}S_e(C \equiv C)$
2	0.607	7.385	3.886	7.845	11.367
3	0.735	8.732	4.752	9.836	14.124
4	0.887	13.296	7.286	15.344	23.308
5	1.045	12.214	7.074	14.299	20.442
6	1.114	12.653	7.228	14.187	21.408
7	1.183	12.013	6.792	13.406	18.194
8	1.201	11.517	6.482	12.419	17.807
9	1.201	10.760	5.906	11.906	18.002
10	1.199	10.698	5.989	11.715	16.830
11	1.225	11.024	6.168	12.489	18.835
12	1.358	14.832	8.585	18.290	26.257
13	1.511	19.605	10.830	17.983	24.331
14	1.661	16.797	10.344	21.715	29.033
15	1.820	18.715	11.776	23.566	31.279
16	1.901	18.775	11.522	22.053	31.579
17	2.020	19.059	11.299	24.200	34.684
18	2.082	18.306	10.809	23.067	33.107

Sección de frenamiento electrónico promedio para los orbitales carozo y de enlace para proyectiles pesados incidiendo con baja velocidad en hidrocarburos (ver texto). Todos los valores son calculados para $v = v_0$ y estan en unidades de 10^{-15} eV cm²/orbital.

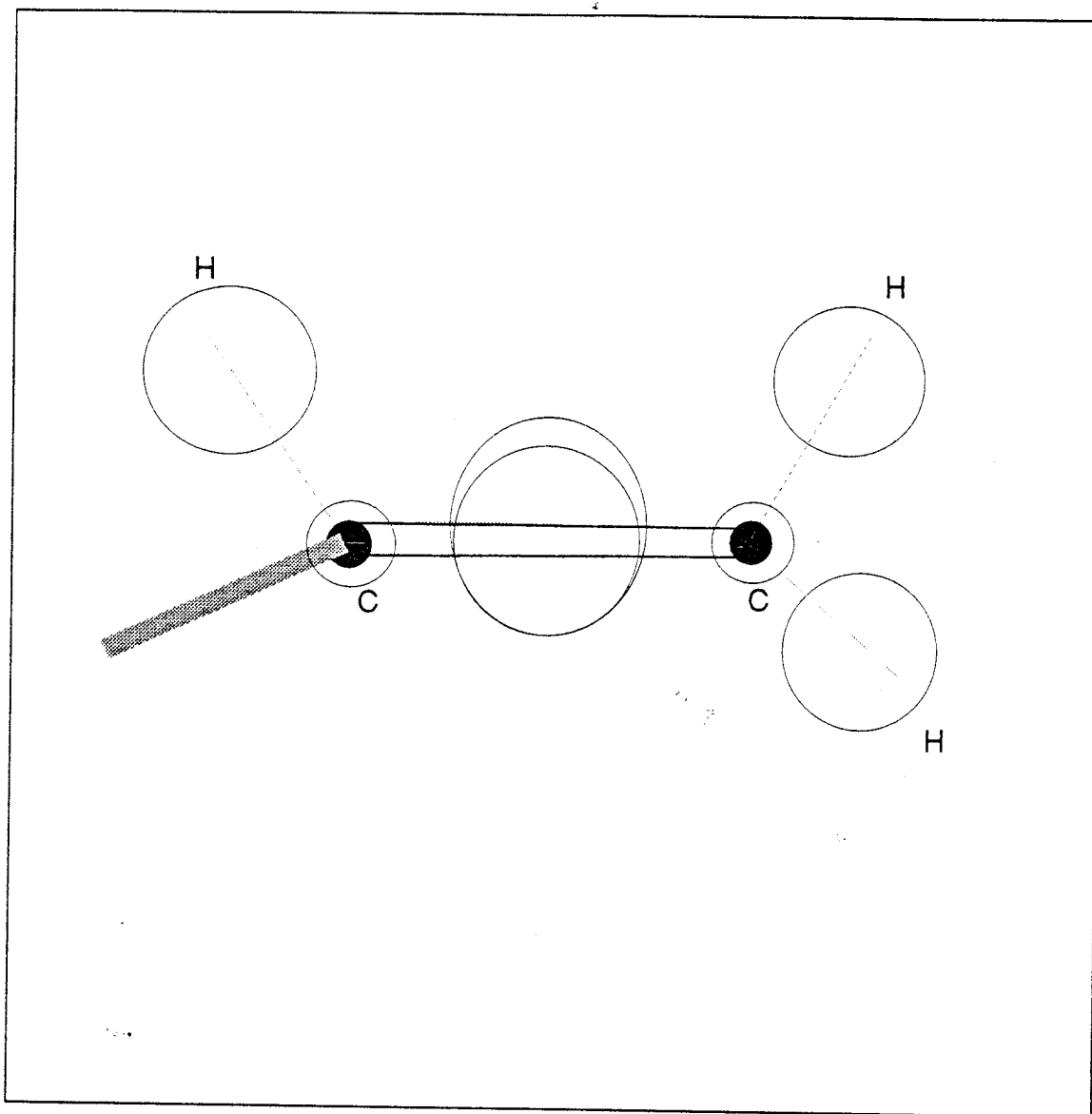


Figura 3.7 Representación esquemática de los orbitales FSGO para el grupo funcional C_2H_5 .

$Z_f=8$ y por lo tanto:

$$\alpha_k = \frac{1}{1 + (3/8)^{1/6}} = 0.54077$$

medida desde el fragmento, por lo que medida desde el proyectil:

$$\alpha_{f_{CH_2}} = 1 - \alpha_k = 0.4592$$

y para el otro fragmento $\cdot CH$: $Z_f = 7$ entonces, haciendo lo mismo:

$$\alpha_{f_{CH}} = 0.4647$$

de la tabla (3.V) vemos que S_e^* para el Litio es 2.8725, así, de la ecuación (3.39)

$$S_{e,pf}(Li \rightarrow :CH_2) = \frac{2.8725}{(0.4592)^3} = 29.6657$$

Y

$$S_{e,pf}(Li \rightarrow \cdot CH:) = \frac{2.8725}{(0.4647)^3} = 28.6248$$

en unidades de 10^{-15} eV cm^2 /molecula. La contribución del Li a la sección de frenamiento cuando éste incide en el fragmento $\cdot C_2H_3$ es de acuerdo a (3.43):

$$S_{e,p} = 29.6657 + 28.6248 = 58.2905$$

La contribución del fragmento molecular, es para el caso de Litio utilizando la tabla (3.VI)

$$\begin{aligned} S_{e,b}(\cdot C_2H_3) &= 2 S_e(C) + S_e(C=C) + \frac{1}{2} S_e(C-C) + 3 S_e(C-H) \\ &= 2 (0.735) + 2 (9.836) + 4.752 + 3 (8.732) \end{aligned}$$

$$S_{e,b}(\cdot C_2H_3) = 52.09$$

así, la contribución total del proyectil y blanco es de la

ecuación (3.21)

$$S_e (\text{Li} \rightarrow \cdot \text{C}_2\text{H}_3) = 58.2905 + 52.09 = 110.38$$

en la cual las unidades son 10^{-15} eV $\text{cm}^2/\text{grupo molecular}$ y está calculada para la velocidad del proyectil igual a $v = v_0$. Este valor es del orden del 20% mayor que el valor experimental para el cual el grupo de Köln da 91.1 [59], en las mismas unidades.

Consideremos otro grupo molecular el cual es $\cdot\text{CH}_3$ como vemos, por sí sólo forma un fragmento con $Z_f = 9$ entonces calculando α_f medida desde el proyectil:

$$\alpha_f = 0.4544$$

por lo tanto, la contribución del proyectil a la sección de frenamiento para éste fragmento es:

$$S_{e,p} = \frac{2.8725}{(0.4544)^3} = 30.6255$$

de la misma manera que el caso anterior la contribución del fragmento para este proyectil a $v = v_0$ es:

$$S_{e,b} = S_e (\text{C}) + \frac{1}{2} S_e (\text{C} - \text{C}) + 3 S_e (\text{C} - \text{H}) = 31.683$$

así, la contribución total a S_e es:

$$S_e = 62.3 \times 10^{-15} \text{ eV cm}^2/\text{fragmento}$$

que comparado con el valor experimental de 58.9×10^{-15} eV $\text{cm}^2/\text{molécula}$ [59], vemos que tenemos un error del 6%. Por lo tanto, parece que el acuerdo cuantitativo con el experimento parece ser razonable dada la simplicidad del modelo, el cual es libre de parámetros ajustables.

Ahora sí, para el caso de una molécula el procedimiento es el mismo, puesto que dividimos a ésta en fragmentos y sumamos.

Por ejemplo en el caso de la molécula de etano (C_2H_6) para el cual incide de nuevo Litio como proyectil tenemos que está formada por dos fragmentos similares de $\cdot CH_3$ así:

$$S_e (C_2 H_6) = 2 S_e (\cdot CH_3) = 2 (62.3) = 124.6$$

que comparada con el valor experimental de 124.8 [59] en las mismas unidades de 10^{-15} eV cm^2 /molécula vemos que el valor está razonablemente de acuerdo con el experimento.

En la tabla (3.VII) se despliega las predicciones para Helio y Litio sobre varios hidrocarburos y se les compara con los valores experimentales disponibles.

Como podemos observar de esta tabla, los valores para el proyectil Litio estan, en promedio, por arriba de los valores experimentales en contraste con los valores de Helio. Una posible explicación de este comportamiento es que los valores experimentales para el Litio han sido llevados a cabo en blancos en la fase líquida, mientras que para el Helio las correspondientes medidas se han llevado a cabo en la fase gaseosa [45]. Como la teoría desarrollada aquí es para la fase gaseosa de los blancos, no podemos considerar efectos de fase, por lo que es razonable tener un mejor acuerdo con las medidas experimentales en la fase gaseosa que en la fase líquida.

De la discusión anterior, es claro que es posible construir grupos moleculares característicos a partir de la superposición de las contribuciones de los carozos y enlaces, además del soporte que nos dan las ideas de los grupos de Baylor y Köln de la descomposición de la sección de frenamiento molecular de los N-alcanos y N-alquenos en términos de los módulos elementales. En la figura (3.8) se muestran los resultados de graficar la contribución molecular de estos N-alcanos y N-alquenos contra el número de carbonos que tiene la molécula en el caso teórico y

TABLA 3.VII

Molécula	Fórmula	He (Teoría)	He (Exp.)	Li (Teoría)	Li (Exp.)
Alcanos					
Metano	CH ₄	42.3	50.9 ^d 50.0 ^b 46.3 ^c	67.2	—
Etano	C ₂ H ₆	76.9	85.0 ^d 76.6 ^c	124.6	124.8 ^f
Propano	C ₃ H ₈	111.5	121.9 ^a	182.0	163.7 ^g
n-Butano	C ₄ H ₁₀	146.1	158.1 ^a	239.4	209.0 ^g
n-Pentano	C ₅ H ₁₂	180.7	—	296.7	263.6 ^h
n-Hexano	C ₆ H ₁₄	215.3	—	354.1	313.3 ^h
n-Heptano	C ₇ H ₁₆	249.9	—	411.4	356.2 ^h
n-Octano	C ₈ H ₁₈	284.5	—	468.8	408.0 ^h
n-Pentadecano	C ₁₅ H ₃₂	526.7	—	870.4	740.0 ^h
iso-octano	C ₈ H ₁₈	253.8	—	416.4	407.0 ^h
Ciclopropano	C ₃ H ₆	103.8	103.9 ^d 111.5 ^b 102.3 ^c	172.1	144.9 ⁱ
Ciclobutano	C ₄ H ₈	138.4	—	229.5	—
Ciclopentano	C ₅ H ₁₀	173.0	177.3 ^e	286.8	244.5 ^h
Ciclohexano	C ₆ H ₁₂	207.6	213.0 ^e	344.2	291.3 ^h
Cicloheptano	C ₇ H ₁₄	242.1	—	401.6	336.4 ^h
Ciclooctano	C ₈ H ₁₆	276.7	285.8 ^e	458.9	386.7 ^h
Alquenos					
Etileno	C ₂ H ₄	69.3	72.2 ^d 73.9 ^b 65.3 ^c	115.4	102.4 ⁱ
Propileno	C ₃ H ₆	103.9	108.7 ^d 109.8 ^b	172.7	150.0 ⁱ
Buteno	C ₄ H ₈	138.5	—	230.0	—
Penteno	C ₅ H ₁₀	173.1	—	287.4	246.9 ^h
Hexaeno	C ₆ H ₁₂	207.7	—	344.8	295.5 ^h
Ciclopropeno	C ₃ H ₄	96.1	—	162.7	—
Ciclobuteno	C ₄ H ₆	130.7	—	220.1	—
Ciclopenteno	C ₅ H ₈	165.3	163.4 ^e	277.4	227.5 ^h
Ciclohexaeno	C ₆ H ₁₀	192.2	202.6 ^e	325.4	272.9 ^h
Aleno	C ₃ H ₄	96.2	102.1 ^a	163.3	—
1-3-Butadieno	C ₄ H ₆	130.8	133.4 ^a	220.7	—
1-3-Ciclohexadieno	C ₆ H ₈	200.0	188.8 ^e	334.8	—

continuación ...

Molécula	Formula	He (Teoría)	He (Exp.)	Li (Teoría)	Li (Exp.)
Alquinos					
Acetileno	C ₂ H ₂	60.8	63.0 ^d 63.7 ^b 57.3 ^c	104.4	-
Aromatizantes					
Benceno	C ₆ H ₆	184.5	181.3 ^e	316.1	239.1 ^h
Tolueno	C ₇ H ₈	210.0	215.9 ^e	373.2	285.4 ^h
Fenilacetileno	C ₈ H ₆	237.4	229.8 ^e	410.2	-

Comparación entre teoría y experimento para la sección de frenamiento electrónico para He y Li incidiendo en varios hidrocarburos con velocidad $v = v_0$. Las unidades estan dadas en 10^{-15} eV cm²/molécula.

a Tomado de la referencia [68].

b Tomado de la referencia [69].

c Tomado de la referencia [42].

d Tomado de la referencia [70].

e Tomado de la referencia [71].

f Tomado de la referencia [49].

g Tomado de la referencia [72].

h Tomado de la referencia [59].

i Construido usando los grupos moleculares de la referencia [59].

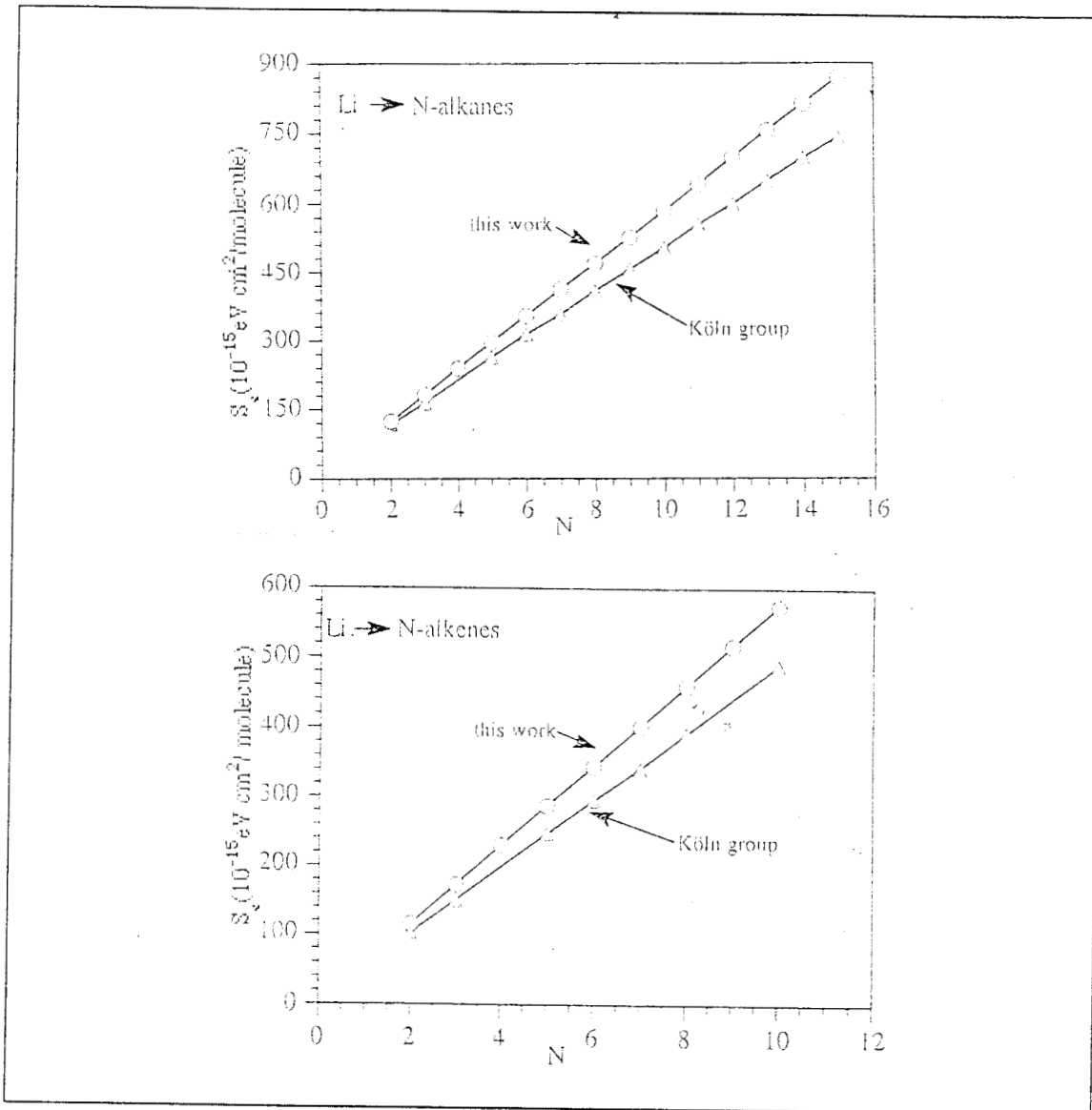


Figura 3.8 Sección de frenamiento electrónico para proyectiles de Litio ($v=v_0$) incidentes en N-alcanos y N-alquenos como función del número de carbonos N . Los círculos representan este trabajo y los triángulos el experimento del grupo de Köln [73] (ver texto).

experimental para el caso de Litio incidiendo a la velocidad de Bohr. En ambos casos se muestra un comportamiento lineal consistente con el experimento. De acuerdo a Neuwirth et. al. [73] la pendiente en las curvas nos debe dar el valor de S_e del modulo elemental ($\text{'CH}_2\text{'}$). Analizando nuestros datos encontramos que la pendiente es de 57.4 para alcanos y alquenos, mientras que los correspondientes valores experimentales dados por Neuwirth es de 48.3 (ambas medidas estan dadas en $10^{-15}\text{eV cm}^2/\text{molécula}$). El mismo análisis fue llevado a cabo para proyectiles de Helio incidiendo en varias moléculas de alcanos en la fase gaseosa. En este caso, suponemos un comportamiento proporcional a la velocidad para la sección de frenamiento para velocidades mayores a v_0 con el fin de poder comparar con los datos experimentales que estan dados para una velocidad de $v=1.73v_0$. La figura (3.9) muestra el resultado de este ejercicio, donde de nuevo observamos un comportamiento lineal apartir de los datos teóricos y experimentales, encontrandose que las pendientes son 59.9 para el caso teórico contra 61.5 para el caso experimental, indicando ésto un mejor acuerdo con la fase gaseosa.

Los resultados obtenidos hasta ahora nos dan confianza para extender el análisis a proyectiles más pesados utilizando los resultados dados en las tablas (3.V) y (3.VI). Como un ejemplo, se ha calculado la sección de frenamiento electrónico para proyectiles con $2 \leq Z \leq 18$ incidiendo a la velocidad de Bohr sobre etano (C_2H_6) y tolueno. La figura (3.10) muestra el comportamiento de S_e para estos sistemas en función del número atómico del proyectil y se compara con las predicciones del modelo semi-empírico de Ziegler y Manoyan [15] utilizando su programa computacional TRIM-91. Aunque se observa un buen acuerdo para los iones con $Z \leq 5$, se observa una fuerte diferencia cuantitativa para proyectiles más pesados, ademas de que se muestra un corrimiento en el máximo y mínimo del comportamiento oscilatorio de S_e . Desafortunadamente hasta el momento no existen datos experimentales de la sección de frenamiento para iones más pesados que el Helio y Litio en la región de bajas velocidades $v \leq v_0$ para dar algunas conclusiones.

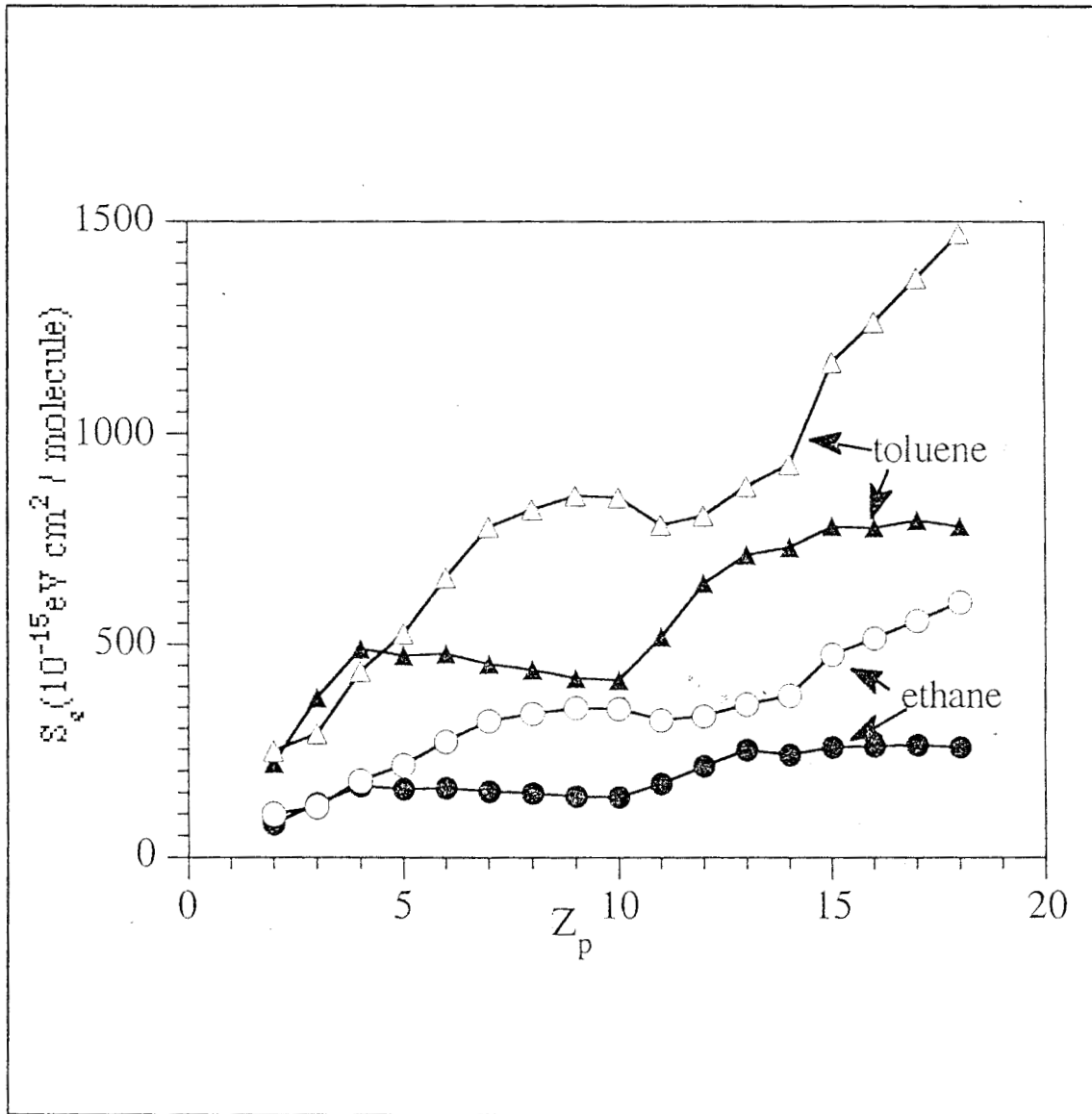


Figura 3.10 Sección de frenamiento electrónico para diferentes proyectiles a $v=v_0$. Círculos y triángulos vacíos son las predicciones de Ziegler [15]. Círculos y triángulos llenos son las predicciones de este trabajo.

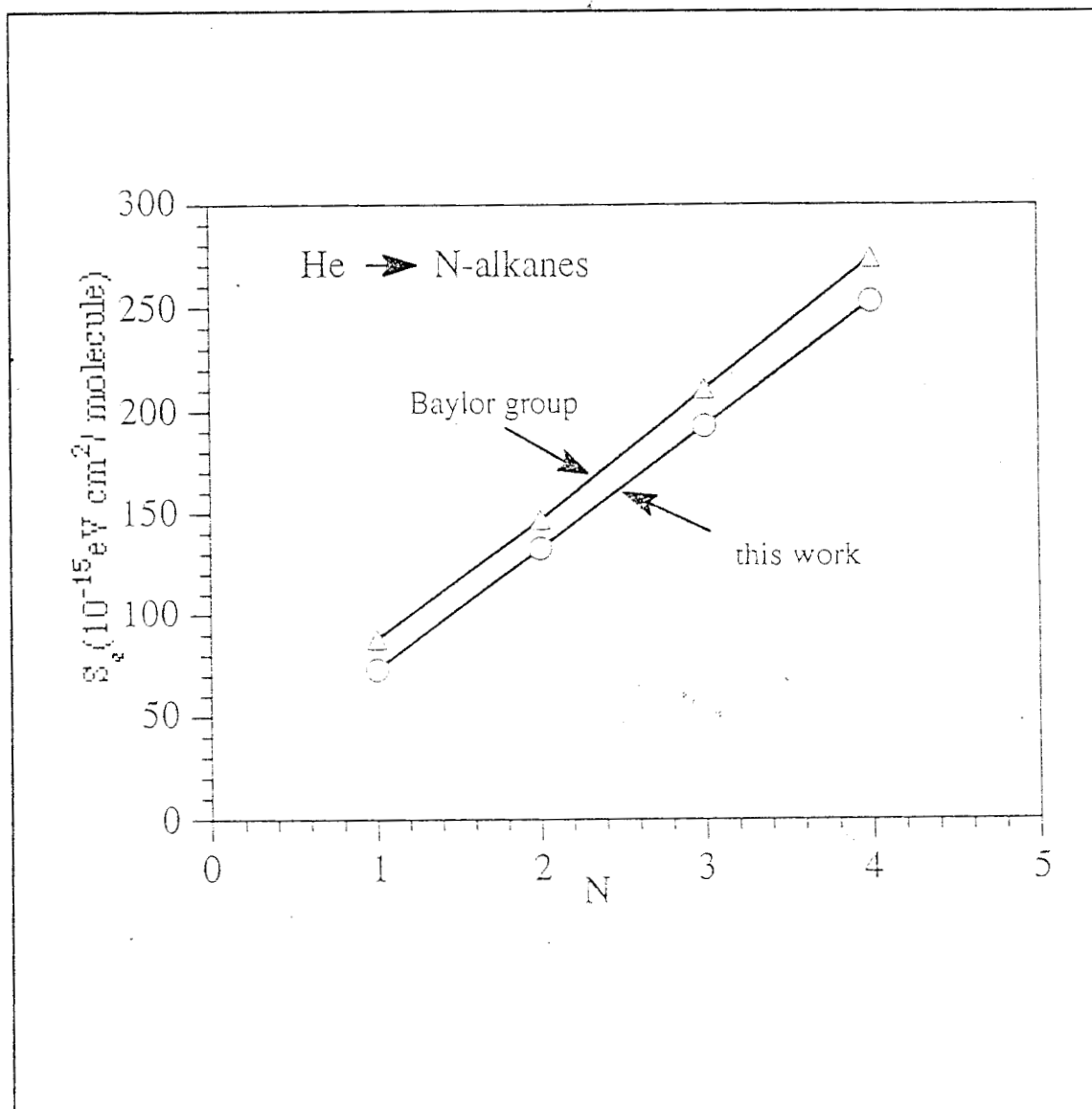


Figura 3.9 Sección de frenamiento electrónico para proyectiles de Helio ($v=1.73 v_0$) incidentes en N-alcenos como función del número de carbonos N. Los círculos representan éste trabajo y los triángulos el experimento del grupo de Baylor [68] (ver texto).

3.7 Aplicación a otras moléculas [62,74].

Por completez, en esta sección discutiremos la aplicación del método anterior para el caso de otros compuestos. Como en el caso anterior, el tratamiento para otras moléculas estriba en la identificación de los correspondientes fragmentos y en el acceso a los parámetros de los orbitales moleculares FSGO, puesto que el procedimiento es el mismo como fue discutido anteriormente. Así, en la Tabla 3.I se muestran los valores de los parámetros FSGO para algunas moléculas de aminas, éteres, alcoholes y moléculas diatómicas. El caso de la molécula de H_2S es de especial interés, puesto que ésta involucra un átomo cuyas capas K y L son representadas por una gaussiana centrada en el núcleo y cuatro en los vértices de un cubo respectivamente, tal que la hibridización sp^3 se tome en cuenta. De aquí, si Z representa la carga nuclear, entonces, para poder evaluar la contribución a S_e de los electrones de la capa K y L debemos considerar $Z_{c,i}=Z$ y $Z_{c,i}=Z-2$ respectivamente para calcular la localización del plano de Firsov.

Utilizando el método descrito en la sección 3.5 se evalúa la contribución a S_e por orbital, la cual se muestra en la Tabla 3.VIII para la velocidad $v=v_0$. La sección de frenamiento total se puede calcular a partir de la tabla 3.V y 3.VIII utilizando las ecuaciones (3.23), (3.38) y (3.39) de la misma manera que en la sección 3.5. La contribución para éstas moléculas se muestra en la tabla (3.IX) en donde se observa un acuerdo en general con los datos experimentales entre teoría y experimento, éstos últimos tomados principalmente del grupo de Baylor [70,75,76], para el caso de proyectiles de He y Li. Los datos experimentales reportados por Reiter et. al. [77] para He incidiendo a 100 keV ($v=v_0$) sobre N y O se muestra junto con las predicciones de Brice [42]. En el caso de proyectiles de Li sólo se pudo comparar con los datos de Neuwirth et. al. [78] para el agua en la fase líquida. Notemos que los valores teóricos están sistemáticamente por arriba de los valores experimentales para los blancos en la fase líquida, al igual que para hidrocarburos, con un error del

TABLA 3.VIII

Z_p	O-H (H_2O)	N-H (NH_3)	$C \equiv O$ (CO)	$N \equiv N$ (N_2)	O=O (O_2)	S-H (H_2S)	$L_p(O)$
2	3.944	5.231	11.876	17.739	9.976	6.588	3.818 ^a 3.878 ^b 3.521 ^c
3	6.379	9.379	19.329	20.805	15.963	12.041	6.707 ^a 6.326 ^b 5.641 ^c
7	8.262	9.025	26.993	30.786	22.381	16.347	9.237 ^a 8.411 ^b 7.535 ^c
8	8.181	11.920	26.699	30.310	22.182	15.876	9.010 ^a 8.345 ^b 7.488 ^c

Z_p	$L_p(N)$	$L_p(C)$	$L_p(S)$	O	N	C	S_{capaK}	S_{capaL}
2	4.754 ^d 4.748 ^e	4.888	6.086	0.377	0.471	0.607	0.147	2.428
3	6.336 ^d 5.335 ^e	6.023	11.607	0.430	0.556	0.735	0.162	2.701
7	9.019 ^d 7.531 ^e	8.239	9.773	0.622	0.879	1.183	0.210	3.585
8	8.833 ^d 7.454 ^e	8.153	9.580	0.646	0.914	1.201	0.219	3.736

Contribución a la sección de frenamiento S_e para iones pesados de baja energía
incidiendo en blancos moleculares a $v = v_0$.

a H_2O

b CO

c O_2

d NH_3

e N_2

TABLA 3.IX

Proyectil	Molécula	fórmula	teoría	Experimento
He	Nitógeno	N_2	50.2	49.7 ^a
				45.0 ^b
				40.6 ^c
He	Oxígeno	O_2	47.7	47.3 ^a
				44.8 ^b
				38.7 ^c
He	Monóxido de carbono	CO	43.7	48.8 ^a
				43.9 ^c
He	Agua	H_2O	32.1	36.5 ^a
Li	Agua	H_2O	58.0	46.8 ^d
He	Amoniaco	NH_3	33.0	44.3 ^a
He	Sulfide	H_2S	48.5	62.1 ^a

a Valores extrapolados para $v = v_0$ a partir de la referencia [70]

b Referencia [77]

c Referencia [42]

d Referencia [78]

e Valores extrapolados a $v = v_0$ de las referencias [46,79]

Proyectil	Molécula	fórmula	teoría	Experimento ^e
	Alcoholes			
He	Metanol	CH_3OH	62.9	71.8
He	Etanol	C_2H_5OH	97.5	107.3
He	Propanol	C_3H_7OH	132.0	143.2
He	Dimetil éter	C_2H_6O	97.1	107.8
He	Dietil éter	$C_4H_{10}O$	166.7	177.7
	Aminas			
He	Metil amina	CH_3NH_2	67.1	80.7
He	Dimetil amina	$(CH_3)_2NH$	101.3	119.5
He	Trimetil amina	$(CH_3)_3N$	135.5	147.4
He	Etilamina	$CH_3CH_2NH_2$	101.7	117.9

Comparación entre teoría y experimento para la sección de frenamiento para He y Li incidentes en varios blancos moleculares. Todas las unidades están en 10^{-15} eV cm² /molécula.

orden del 20%, lo cual es razonable si consideramos que no hemos tomado en cuenta a los efectos de fase.

CAPITULO IV

CONCLUSIONES GENERALES

Como el lector se habrá dado cuenta, se ha efectuado una revisión amplia de los conceptos y modelos asociados a la pérdida de energía de iones con el fin de mostrar los diferentes enfoques existentes en su tratamiento y de ahí tomarlos como punto de partida para el análisis del tema principal de esta tesis.

En base a evidencia experimental se ha puesto en relevancia la importancia de los efectos moleculares en la sección de frenamiento electrónico, principalmente la debida a los enlaces moleculares, haciendose prioritario un tratamiento teórico que los considere. En base a ésto, se ha desarrollado el primer modelo teórico para estudiar el efecto del enlace químico en el frenamiento de iones pesados. Debemos resaltar que una característica del modelo expuesto aquí es que es libre de parámetros ajustables y que predice los valores experimentales con un error entre el 6% y 20% para la región de bajas energías, dándonos confianza en su aplicabilidad. Para el desarrollo del modelo se ha implementado el modelo de orbitales moleculares localizados en términos de funciones gaussianas esféricas flotantes (FSGO), para la representación de enlaces químicos en la molécula. Esto nos ha permitido descomponer a la molécula en forma natural en un tratamiento de carozos y enlaces ("Cores and Bonds":CAB) y en fragmentos moleculares que contribuyen a la pérdida de energía como entidades independientes del resto de la molécula, lo cual está de acuerdo con la evidencia experimental. Este tratamiento nos permite hacer predicciones teóricas sobre la pérdida de energía en una gran variedad de compuestos moleculares para los cuales todavía no existen datos experimentales. Otra característica es que el modelo considera el comportamiento oscilatorio de la sección de frenamiento electrónico conforme cambia el número atómico del proyectil. Esto se debe a que considera el efecto de las capas electrónicas del proyectil mediante orbitales del tipo Hartree-Fock-Slater.

Sin embargo, debemos tener cuidado al hacer conclusiones finales respecto al modelo propuesto aquí, en cuanto a los mecanismos detallados que suceden en el proceso de frenamiento - tales como efectos de intercambio de carga y correcciones debido a capas internas- las cuales están claramente ausentes en los postulados del modelo. Aunque estos efectos son importantes y deben ser considerados en un tratamiento completo de la sección de frenamiento electrónico, creemos que el método aquí propuesto parece ser potencialmente útil para el análisis de la sección de frenamiento para iones pesados en la región de bajas energías incidentes en compuestos moleculares a modo de ver cualitativa y cuantitativamente el proceso de frenamiento.

Como el modelo propuesto aquí es aplicable sólo para el rango de velocidades menores a la velocidad de Bohr ha sido necesario buscar un análisis diferente para poder considerar cualquier velocidad del proyectil que no sea relativista. Para esto, actualmente se ha llevado a cabo un análisis del proceso de la pérdida de energía para protones con cualquier velocidad no relativista incidiendo en blancos moleculares, principalmente de hidrocarburos y algunas moléculas simples utilizando la aproximación de plasma local para poder determinar la energía media de ionización necesaria en el modelo de Bethe. Para esto, es necesario contar con un buen conjunto de orbitales moleculares para considerar el efecto del enlace químico. Como lo demuestra el trabajo de esta tesis, los orbitales FSGO representan una buena opción en dicho análisis, dado que nos permiten descomponer a la molécula en fragmentos. Con esto en mente y en base a la teoría cinética de la sección de frenamiento se ha obtenido la pérdida de energía de protones con resultados bastante prometedores [52].

En base al trabajo mostrado en esta tesis, se ve la imperante necesidad de contar con un tratamiento formal a partir de primeros principios en el tratamiento de los efectos moleculares en la sección de frenamiento. Para esto y en base a

lo expuesto aquí se buscará un tratamiento cuántico de la pérdida de energía en base a la aproximación de Born, lo cual involucra el cálculo de Tensiones de Oscilador Generalizado para el caso de moléculas, lo cual a su vez implica conocer el espectro de excitación molecular.

Como vemos, el problema está aún abierto a la investigación, tanto desde el punto de vista teórico como experimental dada la cantidad de procesos que involucra su tratamiento.

APENDICE A.

Modelo estadístico de Thomas-Fermi para el átomo [24]

Consideremos en primera aproximación que los electrones en un átomo se pueden considerar sin interacción entre ellos mismos pero que están confinados dentro del átomo por un potencial electrostático $\varphi(r)$. De acuerdo a la estadística de Fermi-Dirac, los electrones -que son fermiones- tienen como número de ocupación promedio en un estado energético ε_i de una sola partícula a:

$$\langle n_{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/kT} + 1} \quad (A.1)$$

En el límite, cuando la temperatura tiende a cero $T \rightarrow 0$ i.e. el gas de electrones -que es como estamos visualizando al átomo- está degenerado, se tiene que:

$$\langle n_{\varepsilon_i} \rangle_{T=0} = \begin{cases} 1 & \varepsilon_i < \mu_0 \\ 0 & \varepsilon_i > \mu_0 \end{cases} \quad (A.2)$$

y donde μ_0 es el potencial químico de el sistema a $T = 0$. La función $\langle n_{\varepsilon_i} \rangle$ es claramente una función escalón. Así a $T = 0$ todos los estados de una sola partícula con $\varepsilon_i < \mu_0$ están completamente ocupados con una partícula por estado (de acuerdo al principio de Pauli), mientras que los estados con energía $\varepsilon_i > \mu_0$ están vacíos. La energía límite μ_0 se conoce generalmente como la energía de Fermi ε_F del sistema. El valor del momento p_F correspondiente a la energía ε_F se le conoce como momento de Fermi. Por lo tanto, el número total de partículas es:

$$N = \sum_{\varepsilon_i=0}^{\varepsilon_F} \langle n_{\varepsilon_i} \rangle$$

pero considerando que los estados energéticos ϵ_i son cercanos al continuo, podemos escribir:

$$N = \int_0^{\epsilon_F} g(\epsilon) \langle n_\epsilon \rangle d\epsilon \quad (\text{A.3})$$

donde $g(\epsilon)$ denota la densidad de estados con energías entre ϵ y $\epsilon + d\epsilon$. Para calcular la densidad de estados, consideremos una celda en el espacio fase, entonces el número de microestados de la partícula con momento p y $p + dp$ y posición r y $r + dr$ está dada por:

$$W = \frac{1}{h^3} \int d^3p d^3r ,$$

integrando sobre todo el volumen, V , del gas tenemos:

$$W = \frac{4\pi V}{3h^3} p^3 ;$$

que en términos de la energía:

$$W = \frac{4\pi V}{3h} (2m_e \epsilon)^{3/2}$$

Debemos multiplicar por 2 debido a que cada estado puede ser ocupado por dos electrones, uno con espín $1/2$ y el otro con espín $-1/2$; así, la densidad de estados con energía entre ϵ y $\epsilon+d\epsilon$ es:

$$g(\epsilon) d\epsilon = 2 \frac{\partial W}{\partial \epsilon} d\epsilon = \frac{4\pi V}{h^3} (2m_e)^{3/2} e^{1/2} d\epsilon \quad (\text{A.4})$$

sustituyendo en (A.3) e integrando:

$$n = \frac{N}{V} = \frac{4\pi}{h^3} (2m_e)^{3/2} \frac{2}{3} \epsilon_F^{3/2}$$

donde n es la densidad de partículas con energía menor a la energía de Fermi ϵ_F ó en términos del momento de Fermi p_F :

$$n = \frac{8\pi}{3h} p_F^3 = \frac{8\pi}{3h^3} (m_e v_F)^3 \quad (\text{A.5})$$

Por lo tanto, la velocidad de los electrones en un átomo está dada por:

$$v_F = \left(\frac{3 h^3 n}{8\pi} \right)^{1/3} \frac{1}{m_e} = \left(3\pi^2 n \right)^{1/3} \frac{h}{m_e} . \quad (\text{A.6})$$

En este sistema la densidad electrónica n varía de punto a punto, por lo tanto varía p_F i.e. estamos diciendo que $p_F = p_F(r)$ lo cual es claramente una descripción "cuasi-clásica". Tal descripción es justificable si la longitud de onda de de Broglie de los electrones en una región del espacio es menor que la distancia sobre la cual las funciones $p_F(r)$ y $n(r)$ sufren una variación apreciable, lo cual se satisface para los átomos pesados.

Ahora, la energía total ϵ de un electrón en un punto r es:

$$\epsilon(r) = \frac{1}{2m} p_F^2(r) - e \varphi(r)$$

Escogiendo apropiadamente el cero del potencial electrostático podemos tener que la energía total del electrón sea cero i.e. $\epsilon = 0$, por lo tanto, por conservación de la energía para cualquier r , tenemos que:

$$\frac{1}{2m} p_F^2(r) - e \varphi(r) = 0 \quad (\text{A.7})$$

sustituyendo la ecuación (A.5) y usando la ecuación de Poisson:

$$\nabla^2 \varphi(r) = -4\pi \rho(r) = 4\pi e n(r)$$

obtenemos:

$$\nabla^2 \varphi(r) = \frac{4e (2m_e)^{3/2}}{3\pi h^3} \varphi^{3/2}(r) \quad (\text{A.8})$$

si asumimos simetría esférica en el átomo, la ecuación (A.8) toma la forma:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left\{ r^2 \frac{d}{dr} \varphi(r) \right\} = \frac{4e (2me)^{3/2}}{3\pi\hbar^3} \varphi^{3/2}(r) \quad . \quad (\text{A.9})$$

Introduciendo variables adimensionales x y Φ definidas por:

$$x = 2 \left(\frac{4}{3\pi} \right)^{2/3} Z^{1/3} \frac{me^2}{\hbar^2} r = \frac{Z^{1/3}}{0.88534} \frac{r}{a_0} = \frac{r}{a} \quad (\text{A.10})$$

y

$$\Phi(x) = \frac{\varphi(r)}{Z_e/r}$$

donde Z es el número atómico del átomo y a_0 el radio de Bohr. La ecuación (A.9) se reduce a:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = \frac{\Phi^{3/2}}{x^{1/2}} \quad (\text{A.11})$$

la cuál es la ecuación adimensional de Thomas-Fermi. Resolviendo esta ecuación para el potencial de apantallamiento Φ , conocemos $\varphi(r)$ para el átomo, con lo cual conoceremos a $p_F(r)$ de la ecuación (A.7) y de ahí obtener la densidad electrónica del átomo. Para ésto, necesitamos conocer las condiciones a la frontera. Así, conforme nos acercamos al núcleo, $r \rightarrow 0$, el potencial $\varphi(r)$ debe tender al potencial sin apantallamiento Ze/r , por lo tanto, $\Phi(x \rightarrow 0) = 1$. Conforme $r \rightarrow \infty$, para el caso del átomo neutro, $\Phi \rightarrow 0$. En principio, con estas dos condiciones es suficiente para determinar la función Φ , la cual dependerá del tamaño del átomo. La naturaleza de la solución cerca del origen es:

$$\Phi(x) = 1 - 1.5886 x + \frac{4}{3} x^{3/2} + \dots \quad (\text{A.12})$$

Una de las soluciones aproximadas a la ecuación de Thomas-Fermi es la propuesta por Kerner [25], la cual es:

$$\Phi(x) \approx \frac{1}{1 + Bx} \quad (\text{A.13})$$

donde:

$$B = 1.3679$$

Relación entre densidad de Thomas-Fermi y velocidad promedio en el modelo de Firsov.

Para el modelo de Firsov, necesitamos calcular la velocidad promedio de los electrones que atraviesan el plano de Firsov. Si suponemos que la normal al plano está en la dirección z entonces sólo los electrones con $\bar{v}_z > 0$ atravesarán el plano, por lo que de la isotropía del problema:

$$|\bar{v}| = \bar{v} = 3 \bar{v}_z$$

pero:

$$\bar{v}_z = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi/2} v_F \cos\vartheta \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi$$

para una r dada i.e. para $\bar{v}_z = \bar{v}_z(r)$ entonces:

$$\bar{v}_z = \frac{v_F}{4}$$

por lo tanto:

$$\bar{v} = \frac{3}{4} v_F = \frac{3}{4} (3\pi^2)^{1/3} \frac{\hbar n^{1/3}}{me} \quad (\text{A.14})$$

Ahora, de la ecuación (A.7):

$$p_F = (2m e\phi)^{1/2}$$

que combinando con (A.5) tenemos que:

$$n(\mathbf{r}) = \frac{[2me \varphi(\mathbf{r})]^{3/2}}{3h^3 \pi^2} \quad (\text{A.15})$$

que es la ecuación que necesitamos en el modelo de Firsov en base al modelo del átomo de Thomas-Fermi.

APENDICE B

Cálculos para el modelo de Firsov.

En el modelo de Thomas-Fermi el potencial en el plano para 2 átomos está dado por [ver ecuación (A.10)]:

$$\varphi = \frac{(Z_p + Z_b) e}{r} \chi \left(\frac{r}{a} \right) \quad (\text{B.1})$$

donde $a = 0.8853414 a_0 (Z_p + Z_b)^{-1/3}$, r es la distancia de un punto en el plano a uno de los núcleos y χ es al potencial de apantallamiento de Thomas-Fermi.

Así, para calcular (2.92), calculemos

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_s \varphi^2 ds \right) dx$$

pero $ds = 2\pi\rho d\rho$ y $r^2 = \left(\frac{R}{2} \right)^2 + \rho^2$, por lo que

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_s \varphi^2 ds \right) dx = (Z_p + Z_b)^2 e^2 8\pi \int_{-\infty}^{\infty}$$

$$\left(\int_0^{\infty} \frac{\chi \left(\frac{1}{2a} \sqrt{R^2 + 4\rho^2} \right)}{[R^2 + 4\rho^2]} \rho d\rho \right) dx$$

como $R^2 = b^2 + x^2$ donde b es la mínima distancia entre los núcleos i.e. el parámetro de impacto, así:

$$I = (Z_p + Z_b)^2 e^2 16 \pi \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_0^{\infty} \frac{\chi^2 \left(\frac{1}{2a} \sqrt{R^2 + x^2 + 4^2 \rho} \right)}{\left[R^2 + x^2 + 4 \rho^2 \right]} \rho d\rho \right) dx$$

entonces, haciendo el cambio el variable

$$\rho = a \xi \cos \vartheta$$

$$\frac{x}{2} = a \xi \sin \vartheta$$

se cumple que:

$$\xi^2 = \left(\rho^2 + \frac{x^2}{4} \right) \frac{1}{a^2}$$

y el Jacobiano de la transformación es:

$$d\rho dx = J \begin{pmatrix} \rho, x \\ \xi, \vartheta \end{pmatrix} d\xi d\vartheta = 2\xi a^2$$

por lo que la integral resulta:

$$I = 8\pi (Z_p + Z_b)^2 a e^2 \int_0^{\pi/2} \int_0^{\infty} \frac{\chi^2 \left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \xi_0^2}}{2} \right)}{\left[\xi^2 + \xi_0^2 \right]} \xi^2 \cos \vartheta d\xi d\vartheta$$

llevando a cabo la integración en ϑ

$$I = 8\pi (Z_p + Z_b)^2 a e^2 \int_0^{\infty} \frac{\chi^2 \left(\frac{\sqrt{\xi_0^2 + \xi^2}}{2} \right)}{\left[\xi_0^2 + \xi^2 \right]} \xi^2 d\xi$$

donde:

$$\xi_0 = \frac{1}{a} \frac{b}{2}$$

por lo tanto, utilizando la ecuación (2.92), la sección de frenamiento nos queda:

$$S_e = \frac{4 m_e^2 e^4 (Z_p + Z_b)^2 a}{h^3} v \int_0^\infty b \int_{\xi_0}^\infty \frac{\chi^2 \left(\sqrt{\xi_0^2 + \xi^2} \right)}{\left[\xi_0^2 + \xi^2 \right]} \xi^2 d\xi db \quad (\text{B.2})$$

pero escribiendo en unidades atómicas:

$$a_0 = \hbar^2 / m_e e^2$$

entonces

$$S_e = 3.541366 (Z_p + Z_b)^{5/3} \frac{\hbar v}{a_0} \int_0^\infty b \int_0^\infty \frac{\chi^2 \left(\sqrt{\xi_0^2 + \xi^2} \right)}{\left[\xi_0^2 + \xi^2 \right]} \xi^2 d\xi db$$

siguiendo a Firsov, la primera integral se puede evaluar numéricamente y se puede aproximar por la función [37]:

$$\int_0^\infty \frac{\chi^2 \left(\sqrt{\xi_0^2 + \xi^2} \right)}{\left[\xi_0^2 + \xi^2 \right]} \xi^2 d\xi \approx \frac{0.61}{(1 + 0.285 \xi_0)^5} \quad (\text{B.3})$$

para $\xi_0 > 6$, así:

$$S_e = 2.16 (Z_p + Z_b)^{5/3} \frac{\hbar v}{a_0} \int_0^\infty \frac{b db}{\left(1 + \frac{0.285}{2a} b\right)^5}$$

pero esta integral se puede evaluar, obteniendo [14]:

$$\int_0^\infty \frac{b db}{\left(1 + \frac{0.285}{2a} b\right)^5} = \frac{1}{3} \frac{a^2}{(0.285)^2}$$

con lo cual, la sección de frenamiento en el modelo de Firsov resulta:

$$S_e = 2.16 (Z_p + Z_b)^{5/3} \frac{h\nu}{a_0} \frac{1}{3} \frac{a^2}{(0.285)^2}$$

que simplificando y sustituyendo el valor de a dado en la ecuación (B.1) obtenemos el resultado:

$$S_e = 6.9488 (Z_p + Z_b) h \nu a_0$$

éste es el resultado dado por la ecuación (2.93)

APENDICE C

Cálculos para S_e molecular en la modificación de Brice-Cruz.

Sustituyendo la ecuación (3.6) en (3.7) encontramos que el flujo de electrones en el plano de Firsov es [cambiando las variables ξ, η, ζ por x, y, z]:

$$\phi = \frac{\hbar}{2 m} \left(\frac{1}{2 \pi} \right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dk_{x''} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{x'} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{y''} \int_{-\infty}^{\infty} dk_{y'} \int_{k_0}^{\infty} dk_z \int_{k_0}^{\infty} dk_{z''} \left\{ \right. \\ \left. \varphi^*(\mathbf{k}'') \varphi(\mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'') \cdot \rho} \left[k_z + k_{z''} - 2 k_0 \right] \right\} \quad (C.1)$$

donde los índices encomillados son para distinguir el producto que se incluye en la ecuación (3.7). Para reducir la ecuación (C.1) utilizamos la definición de la función delta de Dirac.

$$2 \pi \delta(x-x') = \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{i(x-x')y} \quad (C.2)$$

así, utilizandola en las integrales de x y y , y el hecho que ésta satisface:

$$f(x') = \int f(x) \delta(x-x') dx' , \quad (C.3)$$

encontramos que el flujo de electrones de un átomo al otro es

$$\phi = \frac{\hbar}{4 m \pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{k_0}^{\infty} dk_{z''} \int_{k_0}^{\infty} dk_z \varphi^*(k_x, k_y, k_{z''}) \varphi(k_x, k_y, k_z) \\ \left[k_{z''} + k_z - 2 k_0 \right] e^{i(k_z - k_{z''})z} . \quad (C.4)$$

Como podemos darnos cuenta, las componentes de \mathbf{k} y \mathbf{k}'' en el plano de Firsov son las mismas. Si definimos a ϕ_z como:

$$\phi_z = \int_{k_0}^{\infty} dk_z \int_{k_0}^{\infty} dk_{z''} e^{iKz} (k_z + k_{z''} - 2k_0) \varphi(k) \varphi^*(k''); \quad (C.5)$$

donde $K = k_z - k_{z''}$; e introduciendo $q_z = k_z - k_0$ y $q'_z = k_{z''} - k_0$ y notando que $K = q_z - q'_z$, entonces (C.5) nos da

$$\phi_z = \int_0^{\infty} dq'_z \int_0^{\infty} dq_z \varphi^*(q'_z + k_0) \varphi(q_z + k_0) [q_z + q'_z] e^{iKz}. \quad (C.6)$$

Aquí hay que tener cuidado, puesto que se ha supuesto que k_0 es constante lo cual sólo se cumple para parámetros de impacto grandes. Como estamos en la región de bajas velocidades k_0 es pequeño y podemos desarrollar en serie de Taylor, *i. e.*

$$\varphi^*(q'_z + k_0) \varphi(q_z + k_0) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{k_0^p}{p!} \left[\frac{\partial^p}{\partial k_0^p} \left[\varphi^*(q'_z + k_0) \varphi(q_z + k_0) \right] \right]_{k_0=0}$$

pero

$$\frac{\partial}{\partial k_0} = - \left(\frac{\partial}{\partial q_z} + \frac{\partial}{\partial q'_z} \right) \equiv -D$$

con ésto, nos damos cuenta que al sustituir este operador, podemos evaluar en $k_0=0$, así

$$\varphi^*(q'_z + k_0) \varphi(q_z + k_0) = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p k_0^p}{p!} D^p \left[\varphi^*(q'_z) \varphi(q_z) \right], \quad (C.7)$$

es la probabilidad de encontrar al electrón en el plano de Firsov. Haciendo un nuevo cambio de variable

$$K' = q'_z + q_z$$

vemos que

$$D = 2 \frac{\partial}{\partial K'} \quad (C.8)$$

cambiando a las variables K y K' y utilizando (C.7) y (C.8) en (C.6) obtenemos

$$\phi_z = \sum \frac{2^{p-1}}{p!} \int_0^\infty K' dK' \int_{-K}^{K'} \frac{\partial^p}{\partial K'^p} \left[\varphi\left(\frac{K'+K}{2}\right) \varphi^*\left(\frac{K'-K}{2}\right) \right] k_o^p e^{i K z} \quad (C.9)$$

pero el momento del plano esta dado por

$$k_o = \frac{m}{h} \frac{dz}{dt}$$

y de la figura (3.1) vemos que (con $\zeta=z$)

$$z = \alpha | r - R |$$

es la posición del plano de Firsov medida desde el átomo A y se encuentra en el mínimo del potencial electrostático de los 2 átomos; α es esa posición fraccional respecto a la distancia de separación de los átomos A y B. Por lo tanto, de la misma figura:

$$| r - R | = \sqrt{x'^2 + b^2}$$

con lo que

$$z = \alpha \sqrt{x'^2 + b^2}$$

entonces, para un parámetro de impacto fijo

$$\omega = \frac{dz}{dt} = \frac{\alpha^2 x'}{z} \frac{dx'}{dt} = \frac{\alpha^2 x'}{z} v$$

así

$$k_0 = \frac{m \alpha^2 x'}{h z} v . \quad (C.10)$$

Como vemos, k_0 es función de la velocidad relativa entre el proyectil y blanco. Como a primer orden S_e es lineal en la velocidad entonces debemos tomar $p=0$ en la sumatoria, así :

$$\phi_z = 2^{-1} \int_0^\infty K' dK' \int_{-K'}^{K'} dK \varphi\left(\frac{K' + K}{2}\right) \varphi^*\left(\frac{K' - K}{2}\right) e^{iKz} \quad (C.11)$$

que sustituyendo en la ecuación (C.4) obtenemos la ecuación (3.8) dada por:

$$\phi = \frac{\hbar}{8 \pi m} \int_{-\infty}^\infty dk_x \int_{-\infty}^\infty dk_y \int_0^\infty K' dK' \int_{-K'}^{K'} dK e^{iKz} \varphi\left(\frac{K' + K}{2}\right) \varphi^*\left(\frac{K' - K}{2}\right) \quad (3.8)$$

donde $K=k_z - k_z'$, y $K'=k_z + k_z' - 2 k_0$.

Sustituyendo la relación (3.11) en (3.10) del texto del capítulo 3, encontramos que:

$$S_e = - \frac{u\hbar\alpha^{-3}}{8m} \int d\Omega_z \int_{-\infty}^\infty dk_x \int_{-\infty}^\infty dk_y \int_0^\infty K' dK \varphi \varphi^* \frac{\partial^2}{\partial K^2} \delta(K), \quad (C.12)$$

como el producto $\varphi \varphi^*$ es finito en $K=0$ y sus derivadas también, podemos transferir la segunda derivada de la función Delta de Dirac al producto mediante una doble integración por partes, con lo cual obtenemos:

$$S_e = - \frac{u\hbar\alpha^{-3}}{8m} \int d\Omega_z \int_{-\infty}^\infty dk_x \int_{-\infty}^\infty dk_y \left[- (\varphi \varphi^*) \Big|_{K=K'=0} + \int_0^\infty K' \left\{ \frac{\partial^2}{\partial K^2} (\varphi \varphi^*) \Big|_{K=0} \right\} dK' \right] \quad (C.13)$$

donde se ha escrito por simplicidad que:

$$\varphi \varphi^* = \varphi \left(\frac{K' + K}{2} \right) \varphi^* \left(\frac{K' - K}{2} \right) ,$$

pero de esta relación se puede ver que:

$$\frac{\partial^2 (\varphi \varphi^*)}{\partial K^2} = \frac{\partial^2 (\varphi \varphi^*)}{\partial K'^2} - 4 \left[\frac{\partial \varphi}{\partial K'} \frac{\partial \varphi^*}{\partial K'} \right] \quad (C.14)$$

i.e. con la ayuda de los argumentos de $\varphi \varphi^*$ podemos transformar las derivadas en K a derivadas en K' para poder evaluar en $K=0$, así, el único argumento que nos queda en ambas φ y φ^* es $K'/2$, entonces, haciendo un cambio de variable a $k_z = K'/2$ encontramos que después de reagrupar todos los términos con las mismas derivadas e integrando por partes el término de doble derivada obtenemos:

$$S_e = \frac{u\hbar\alpha^{-3}}{8m} \int d\Omega_z \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \left[\left(|\varphi|^2 - k_z \frac{\partial}{\partial k_z} |\varphi|^2 \right) \Big|_{k_z=0}^{k_z=\infty} + 4 \int_0^{\infty} k_z \left| \frac{\partial \varphi}{\partial k_z} \right| dk_z \right] \quad (C.15)$$

pero por propiedades de los orbitales encontramos que:

$$S_e = \frac{\hbar u \alpha^{-3}}{4} \int d\Omega_z \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_0^{\infty} k_z \left| \frac{\partial \varphi}{\partial k_z} \right|^2 dk_z \quad (C.16)$$

que es la ecuación (3.12) y donde se ha dividido por 2 porque queremos sólo la contribución de un electrón.

APENDICE D

Cálculo de los potenciales electrostáticos para los orbitales FSGO y Hartree-Fock-Slater.

De la ecuación (3.15) la densidad electrónica radial para un orbital FSGO está dada por:

$$\rho(r) = \psi(r) \psi^*(r) = 4 \pi \left(\frac{2}{\pi \rho^2} \right)^{3/2} r^2 e^{-2r^2/\rho^2} . \quad (D.1)$$

Para una simetría esférica, de la ley de Gauss obtenemos que el campo eléctrico producido por esta densidad de carga es:

$$E(r) = \frac{2 \pi^{-3/2}}{r^2} \gamma \left(\frac{3}{2}, \frac{2 r^2}{\rho^2} \right) \quad (D.2)$$

donde γ es la función gama incompleta, por lo tanto, el potencial eléctrico a una distancia r es:

$$W_{\text{FSGO}}(r) = \frac{1}{r} \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}}{\rho} r \right) .$$

Esto es para la distribución de carga del orbital FSGO, pero cuando se trata de un orbital carozo hay que agregar la carga nuclear de éste, por lo que se obtiene:

$$W_{\text{FSGO}}(r) = - \frac{1}{r} \left\{ Z_c - \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}}{\rho} r \right) \right\} . \quad (D.3)$$

De la misma manera, de la ecuación (3.26) dado el orbital atómico HFS obtenemos la densidad electrónica de carga radial, posteriormente calculamos el campo eléctrico y de ahí el potencial de éste a una distancia r , obteniéndose:

$$W_{\lambda}(r) = - \sum_{p,q} C_p C_q \frac{\nu!}{\eta^{\nu+1} r} e^{-\eta r} V_{p,q} \quad (D.4)$$

donde

$$V_{p,q} = 1 + \sum_{k=2}^{\nu} \frac{(k-2)!}{k!} \sum_{\tau=0}^{k-2} \frac{(\eta r)^{\tau+2}}{\tau!}$$

con η, ν definidos por $\nu = n_p + n_q$, $\eta = \xi_p + \xi_q$. Así, el potencial producido por todo el átomo a una distancia r está dado por el principio de superposición como:

$$W_{\text{HFS}}(r) = \sum w_{\lambda} W_{\lambda}(r) \quad (D.5)$$

donde w_{λ} es la población electrónica del orbital λ .

APENDICE E

Relaciones para el cálculo de S_e^* [67]

Las relaciones que se utilizan en la sección 3.5 son:

$$P(n_p, \lambda, \mu; g, h) \equiv \frac{\left[(n_p - \lambda)! \right]^2 (n_p - g)! (n_p - h)!}{(n_p - \lambda - 2g)! (n_p - \lambda - 2h)! g! h!} \quad (E.1)$$

$$\frac{(\lambda + \mu)! (\lambda - \mu)! (2n_p - \lambda - g - h)!}{(2n_p - g - h + 1)!}$$

$$Q(\lambda, \mu; g, h) \equiv 2^{2\mu+1} \left[S_1(\lambda - 1, \lambda - 1, \mu) - 2S_2(\lambda, \lambda - 1, \mu) + \right. \quad (E.2)$$

$$\left. 4 \frac{(n_p - g + 1) (n_p - h + 1)}{(2n_p - g - h + 2) (2n_p - g - h + 3)} S_3(\lambda, \lambda, \mu) \right]$$

$$R(\lambda, \mu; \xi_p, \xi_q) \equiv 2^{2\lambda+2\mu+1} \left\{ S_1(\lambda - 1, \lambda - 1, \mu) I(\lambda, \lambda + 1, \lambda + 1; \xi_p^2, \xi_q^2) - \right.$$

$$2 \left[I(\lambda, \lambda + 2, \lambda + 1; \xi_p^2, \xi_q^2) + I(\lambda, \lambda + 1, \lambda + 2; \xi_p^2, \xi_q^2) \right] S_2(\lambda, \lambda - 1, \mu) +$$

$$\left. 4 \frac{(\lambda + 1)}{(\lambda + 2)} S_3(\lambda, \lambda, \mu) I(\lambda, \lambda + 2, \lambda + 2; \xi_p^2, \xi_q^2) \right\} \quad (E.3)$$

donde

$$S_\alpha(\lambda, \lambda', \mu) = \sum_{\tau_\alpha} h_{\tau_\alpha}(\lambda, \lambda') g(\lambda, \lambda', \mu, \alpha)$$

con

$$h_{\tau_\alpha}(\lambda, \lambda') = \sum_{j=0}^{\tau_\alpha} \left[(\lambda + \mu - 2)! (\lambda' + \mu - 2\tau_\alpha + 2j)! j! (\tau_\alpha - j)! \right. \\ \left. (j - \mu)! (\tau_\alpha - \mu - j)! \right]^{-1}$$

y

$$g(\lambda, \lambda', \mu, \alpha) = (-1)^{\tau_\alpha} 2^{-2\tau_\alpha} \Gamma\left(\frac{\lambda + \lambda' + 2\mu - 2\tau_\alpha + \alpha + 1}{2}\right) (\tau_\alpha - \mu)!$$

REFERENCIAS

- [1].-Chr. Lehmann, 'Interaction of radiation with solids and elementary defect production". North-Holland Publ. Co. 1977
- [2].-E. Bonderup, "Penetration of Charged Particles Through Matter". (Fysik Instituts Trykkery, Aarhus Universitet, 2^a edición 1981. Dinamarca)
- [3].-H. Goldstein, "Classical Mechanics". Addison Wesley. Reading Mass. 1950
- [4].-S. A. Cruz, Radiat. Eff. 88 (1986) 159
- [5].-C. J. Joachain, *Quantum theory of collisions* (North-Holland Publ. Co. New York 1980
- [6].-Ver por ejemplo: P. G. Hoel, *Introduction to Mathematical Statistic* 3^a ed. Wiley, New York 1964
- [7].-N. Bohr, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 18 (1948) 8
- [8].-P. Sigmund, *Energy Loss of Charged Particles in Solids*, NATO series, editado por C. H. S. Dupuy 1975.
- [9].-D. I. Thwaites, Nucl. Instr. and Meth. B27 (1987) 293
- [10].-N. Bohr, Phil. Mag. 25 (1913) 10
- [11].-N. Bohr, Phil. Mag. 30 (1915) 581
- [12].-J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2^a ed. John Wiley and sons, New York 1975
- [13].-M. Abramowitz e I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover New York 1970)
- [14].-I. S. Gradshteyn e I. M. Ryzhik, *Table of Integrals Series and Products*, Academic Press 1965
- [15].-Sub-rutina SR del programa TRIM 91 de acuerdo a: J. F. Ziegler y J. M. Manoyan, Nucl. Instr. and Meth. B35 (1988) 215
- [16].-H. A. Bethe, Ann. Phys. 5 (1930) 325
- [17].-H. A. Bethe, Phys. Rev. 89 (1953) 1256
- [18].-E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* 2^a ed. Wiley-Toppan 1970
- [19].-H. A. Bethe, *Intermediate Quantum Mechanics* (Benjamin New York 1964)
- [20].-L. I. Schiff, *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, New York 1955)

- [21].-M. Inokuti, Rev. Mod. Phys. 43 (1971) 297
- [22].-M. S. Livingston y H. A. Bethe, Rev. Mod. Phys. 9 (1937) 282
- [23].-U. Fano, Ann. Rev. Nucl. Sci. 13 (1963) 1
- [24].-Ver por ejemplo: R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, 1^a edición, Pergamon Press 1972
- [25].-E. H. Kerner, Phys. Rev. 83 (1951) 71
- [26].-H. D. Betz, Rev. Mod. Phys. 44 (1972) 465
- [27].-J. M. Anthony y W. A. Landford, Phys. Rev. A35 (1982) 1868
- [28].-K. Shima, T. Ishihara y T. Mikumo, Nucl. Instr. and Meth. 200 (1982) 605
- [29].-W. Brandt y M. Kitagawa, Phys. Rev. B25 (1982) 5631
- [30].-J. Lindhard y M. Scharff, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 28 (1954) 8
- [31].-L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continua Media*. (Addison-Wesley, Reading, Mass. 1960) Chap. 12
- [32].-B. S. Yarlagadda, J. E. Robinson y W. Brandt, Phys. Rev. B17 (1978) 3473
- [33].-S. Kressler, C. Varelas y W. Brandt, Phys. Rev. B23 (1981) 82
- [34].-E. Fermi y E. Teller, Phys. Rev. 72 (1947) 399
- [35].-J. Lindhard y M. Scharff, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd. 27 (1953) 15
- [36].-J. Lindhard y M. Scharff, Phys. Rev. 124 (1953) 128
- [37].-O. B. Firsov, Sov. Phys. JETP 9 (1959) 1076
- [38].-Para una revisión ver por ejemplo: I. A. Akhiezer y L. N. Davydov, Sov. Phys. Usp. 22 (1979) 804
- [39].-S. A. Cruz, C. Vargas-Aburto, D. K. Brice, E. U. Alonso y D. G. Armour, Phys. Rev. A27 (1983) 2403
- [40].-I. M. Cheshire, G. Dearnaley y J. M. Poate, Phys. Lett. A27 (1968) 304
- [41].-E. Clementi y C. Roetti, At. Data Nucl. Data Tables 14 (1974) 177
- [42].-D. K. Brice, Phys. Rev. A6 (1972) 1791
- [43].-D. K. Brice y S. A. Cruz, Rad. Eff. 43 (1979) 143
- [44].-W. H. Bragg y R. Kleeman, Phil. Mag. 10 (1918) 305
- [45].-D. I. Thwaites, Nucl. Instr. and Meth. B69 (1992) y referencias ahí incluidas

- [46].-D. Powers, H. G. Olson y R. Gowda, *J. Appl. Phys.* **55** (1984) 1274 y referencias ahí incluidas
- [47].-W. Neuwirth, *Nucl. Instr. and Meth.* **B27** (1987) 335
- [48].-G. Reiter, E. Pfaff y G. Clausnitzer, *Nucl. Instr. and Meth.* **B51** (1990) 320 y referencias ahí incluidas
- [49].-G. Both, R. Krotz, K. Lohmer y W. Neuwirth, *Phys. Rev.* **A28** (1983) 3212
- [50].-P. Sigmund, *Phys. Rev.* **A26** (1982) 2497
- [51].-J. Oddershede y J. R. Sabin, *Nucl. Instr. and Meth.* **B42** (1989) 7
- [52].-R. Cabrera-Trujillo, S. A. Cruz y J. Soullard, *Nucl. Instr. and Meth.* (en prensa)
- [53].-A. A. Frost, *J. Chem. Phys.* **47** (1967) 3707
- [54].-A. A. Frost, *Theor. Chim. Acta* **18** (1970) 156 y referencias ahí incluidas
- [55].-P. O. Löwdin, *J. Chem. Acta* **18** (1950) 365
- [56].-R. E. Christoffersen, D. Spangler, G. G. Hall y G. M. Maggiora, *J. Am. Chem. Soc.* **95** (1973) 8526 y referencias ahí incluidas
- [57].-S. R. Gadre y P. T. Narasimhan, *Chem. Phys. Letters* **50** (1977) 247
- [58].-S. A. Cruz y J. Soullard, *Nucl. Instr. and Meth.* **B71** (1992) 387
- [59].-R. Kreutz, W. Neuwirth y P. Pietch, *Phys. Rev.* **A22** (1980) 2598 y 2606
- [60].-P. H. Blustin y J. W. Linnett, *J. Chem. Soc. Faraday II* **70** (1974) 274
- [61].-H. K. Reynolds, D. N. F. Dunbar, W. A. Wenzel y W. Whaling, *Phys. Rev.* **92** (1953) 742
- [62].-S. A. Cruz, J. Soullard y R. Cabrera-Trujillo, *Nucl. Instr. and Meth.* **B83** (1993) 5
- [63].-E. Everhart, G. Stune y R. J. Carbone, *Phys. Rev.* **99** (1955) 1287
- [64].-F. P. Zimba, G. J. Lockwood, G. H. Morgan y E. Everhart, *Phys. Rev.* **118** (1960) 1552
- [65].-I. M. Torrens, *Interatomics Potentials* (Academic Press, New York 1972)

- [66].-L. M. Kishenevsky, *Izv. Akad. Navk. SSSR, Fiz.* 26 (1962) 1410 (*Bull. Acad. Sci. USSR, Phys. Ser.* 26 (1962) 1433)
- [67].-S. A. Cruz, C. Cisneros e I. Alvarez, *Phys. Rev.* A17 (1978) 132
- [68].-A. S. Lodhi y D. Powers, *Phys. Rev.* A10 (1974) 2131
- [69].-J. T. Park y E. J. Zimmerman, *Phys. Rev.* 131 (1963) 1611
- [70].-P. D. Bourland, W. K. Chu y D. Powers, *Phys. Rev.* B3 (1971) 3625
- [71].-R. B. Brown y D. Powers, *J. Appl. Phys.* 50 (1979) 5099
- [72].-G. Both, R. Kreutz, R. Krotz, K. Lohmer y W. Neuwirth, *Phys. Rev.* A24 (1981) 1713
- [73].-W. Neuwirth, W. Pietsch y R. Kreutz, *Nucl. Instr. and Meth.* 149 (1978) 105
- [74].-J. Soullard, S. A. Cruz y R. Cabrera-Trujillo, *Nucl. Instr. and Meth.* B80/81 (1993) 20
- [75].-S. Matteson, D. Powers y E. K. L. Chau, *Phys. Rev.* A15 (1977) 852
- [76].-H. G. Olson y D. Powers, *J. Appl. Phys.* 52 (1981) 564
- [77].-G. Reiter, H. Baumgart, N. Kniest, E. Pfaff y G. Clausnitzer, *Nucl. Instr. and Meth.* B27 (1987) 287
- [78].-W. Neuwirth, W. Pietsch, K. Richter y U. Hauser, *Z. Phys.* A275 (1975) 209
- [79].-E. K. L. Chau, R. B. Brown, A. S. Lodhi, D. Powers, S. Matteson y S. R. Eisenbarth, *Phys. Rev.* A16 (1977) 1407