

ORIGEN DE LA CARGA EFECTIVA DEL PROTÓN Y LA PARTÍCULA- α EN METALES

THE ORIGIN OF THE EFFECTIVE CHARGE OF PROTONS AND α -PARTICLES IN SOLIDS

Gustavo Martínez T.¹

¹ Departamento de Física: Grupo de Física Nuclear, Laboratorio de Implantación de Iones
Universidad Nacional de Colombia

Resumen

Una versión simplificada del modelo de carga efectiva que predice el poder de frenado del protón y la partícula- α en metales muestra un buen acuerdo con los resultados experimentales y deja al descubierto serias dificultades de la teoría Funcional Densidad (TFD).

Palabras claves: Interacción ión-sólido, poder de frenado, carga efectiva, pérdida de energía.

Abstract

A simple version of the effective charge model of the stopping power of protons and α -particles in metals shows a rather good agreement to the experimental data at the time that reveals the tragic behavior of the Functional Density Theory (DFT).

Keywords: Ion-solid interaction, stopping power, effective charge, energy loss.

1. Gustavo Martínez T.: gmartinezt@unal.edu.co

Introducción

En respuesta a las dificultades que enfrenta la teoría de la funcional densidad, TFD, en la predicción de los cocientes de frenado de la partícula- α relativa al protón en metales simples, se propone una representación simple del modelo de carga efectiva modificado que defiende este laboratorio y que reivindica el trabajo de Yarlagadda et. al [1, 2]¹, en torno a la controversia abierta sobre los mecanismos de interacción de los átomos livianos con la materia. La propuesta se sustenta en el acierto que muestra la curva universal de ionización en la predicción de la carga efectiva que portan protones y alfas en al menos uno de casi dos órdenes de magnitud que constituyen el rango metálico en cuanto a densidad electrónica; y surge de observar la dependencia débil con respecto a dicha densidad, del frenado que sufre la carga efectiva de estos iones atómicos, a velocidades bajas.

Poder de frenado y carga efectiva

La técnica experimental para establecer la carga efectiva que presenta un átomo en un medio consiste en lanzar el proyectil atómico con velocidad inicial dada hacia el blanco de interés, determinando luego la relajación de la rapidez en función de la distancia recorrida dentro del material. La fortaleza de la interacción (pérdida de energía por unidad de camino) constituye una medida de la carga neta del ión, así: Si se desplaza como partícula neutra la energía perdida será mínima. Si por el contrario, se desplaza como ión desnudo sufrirá la mayor pérdida de energía posible. Para cuantificar dicha carga se introduce la variable adimensional reducida, y_r , que compara la rapidez media de los electrones del metal relativa al proyectil o impureza atómica, ν_r , con la velocidad media del electrón atómico, \bar{u} , según la definición $y_r = \nu_r/\bar{u}$, de modo tal que si $y_r > 1$ la ionización ocurre, caso contrario el electrón permanece ligado (criterio de velocidades de Bohr). En el modelo atómico de

¹Se han introducido correcciones que consideran el reflujó del gas de Fermi. Se destacan los trabajos de I. Nagy para helio (2000) y A. Lodder para hidrógeno (2005)

Thomas-Fermi, T-F, la velocidad electrónica media, en términos de la velocidad de Bohr, ν_0 , es: $\bar{u} = \nu_0 Z^{2/3}$. En términos de la nueva variable se establece la ley exponencial que aproximadamente cuantifica el grado de ionización, ζ , de proyectiles atómicos en medios materiales, como función de la velocidad,

$$\zeta = \frac{Z^*}{Z} = 1 - \exp\left(-\frac{\nu_r}{\nu_0 Z^{2/3}}\right) = 1 - e^{-\gamma_r} \quad (1)$$

Para ν_r altas, por causa de movimiento rápido del proyectil y/o por altas velocidades de Fermi en metales densos, aún para una impureza estática, el átomo liviano pierde buena parte de su electrones, revistiéndose gradualmente de los mismos a ν_r menores, como se observa en la “Curva Universal de Ionización” (Figura 1)[3].

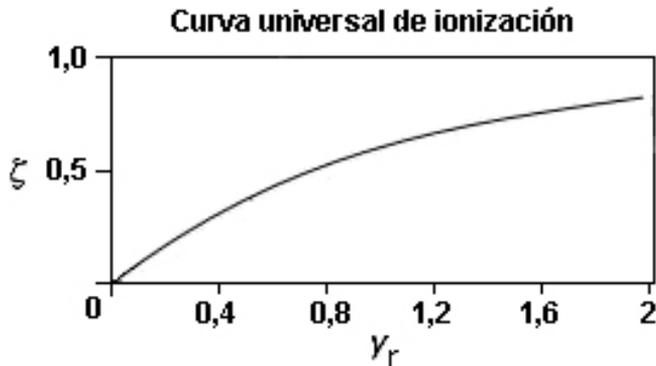


FIGURE 1. Curva de ionización de los átomos pesados

En el rango de velocidades bajas ($\nu < \nu_0$),

$$\nu_r = \frac{3}{4}\nu_F \left[1 + \frac{2}{3} \left(\frac{\nu}{\nu_F} \right)^2 - \frac{1}{15} \left(\frac{\nu}{\nu_F} \right)^4 \right],$$

tal que en el límite estático, $\nu_r = 3\nu_F/4$, ν_F , la velocidad de Fermi.

La fórmula de frenado de Bohr y Bethe para proyectiles atómicos pesados, rápidos, $S = Z^{*2}F(B, \nu)$, se expresa en términos de la

carga efectiva Z^* evaluada de la curva universal de ionización; de F , una función que depende de la naturaleza del blanco, B ; y de la velocidad con que el proyectil atraviesa el blanco, ν^2 . A velocidades bajas el blanco se comporta como un medio viscoso con frenado proporcional a la velocidad, $S = Z^{*2}F(B)\nu$; en tanto que F depende ahora débilmente de la densidad electrónica y en primera instancia se puede suponer constante, independiente del parámetro de densidad r_s . El frenado del átomo de interés relativo al del protón a la misma velocidad y en un mismo blanco permite estimar la carga efectiva, Z^* , (siempre y cuando se conozca de antemano la carga efectiva del protón) según la relación de escalamiento:

$$\frac{S}{S_p} = \left(\frac{Z^*}{Z_p^*} \right)^2,$$

razón que no depende de la forma detallada de la función F , ni de la incertidumbre experimental que representa la medición del espesor de la muestra. Para protones y alfas la igualdad se reduce a:

$$\frac{S_\alpha}{S_p} = 4 \frac{\zeta_\alpha^2}{\zeta_p^2}.$$

La teoría formal de carga efectiva sostiene que el protón intersticial nunca liga electrones por lo que $Z_p = 1$ y la correspondencia con los valores experimentales se logra al considerar la contribución de un efecto de colisiones cercanas que incrementa la carga efectiva de núcleos más pesados que el del helio [4]. Esta afirmación resulta también cierta en TFD por lo que se ha convertido en uno de los paradigmas de la interacción de iones en sólidos [5]. Se puede mostrar, sin embargo, que valores acertados de R se obtienen simplemente al suponer que el hidrógeno, al igual que los átomos pesados, cumplen con la ley universal de ionización que tendría ahora sí validez general (Figura 2).

Notoriamente, un punto de control de las teorías ocurre para el magnesio, $r_s = 2,7$, pues allí TFD predice el valor $R = 1$, y para r_s

²Como se verifica por la magnitud de la deflexión que sufre el ión saliente al pasar por un campo eléctrico o magnético

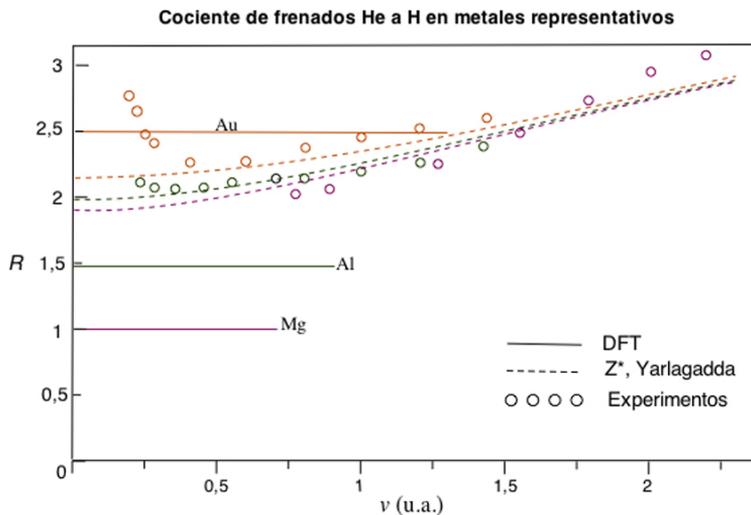


FIGURE 2. El punto de cruzamiento de las curvas de frenado que predice TFD no ocurre

menores las curvas de frenados de estos iones atómicos livianos deberían cruzarse, es decir, el protón superaría en frenado a las alfas, lo cual resulta una predicción sorprendente que los experimentos no confirman[6]. En su lugar, la versión modificada del Laboratorio predice un valor de R con dependencia suave de r_s , cercano al valor 2.³

Una primera aproximación a los valores experimentales de frenado del hidrógeno en metales, que evita el mal comportamiento de TFD al predecir el frenado de alfas se consigue con $F \sim 1$, con lo cual la ley de frenado de proyectiles lentos, en unidades atómicas, se reduce a $S = Z^*2\nu$ (figura 3). Nótese el factor cuadrático de carga efectiva que cumple el papel del coeficiente de fricción en medios viscosos, Q .

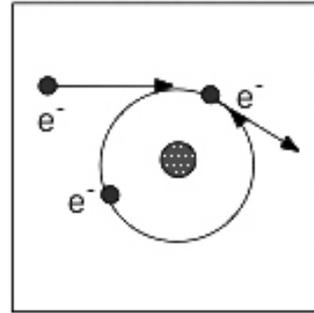
En rigor, la aplicación del criterio de velocidades de Bohr a átomos multi-electrónicos para distinguir los electrones que aban-

³El incremento de R_{Au} a muy bajas velocidades obedece a un efecto de umbral causado por los electrones d , que alejan al oro del comportamiento de gas ideal en este límite.

donan al átomo de aquellos que permanecen ligados, no tiene cabida en el caso extremo del protón y de la partícula- α , pues implica ligar fracciones de electrón. Sin embargo, el buen acuerdo con los datos experimentales obliga a hacer una interpretación libre del concepto de ligadura y consecuentemente del origen de la carga efectiva. Se argumentan a continuación dos posibles mecanismos que pudieran contribuir a tal efecto.

Mecanismo I: La relativa independencia del frenado del hidrógeno con respecto a F en un rango de densidad tan amplio (factor 60), compatible con una sucesión de procesos alternados de captura y pérdida electrónica más que el valor estático, promedio que suministra TFD, sugiere la siguiente interpretación: S_H (y quizás S_{He}) depende de un único evento de interacción que se repetiría con más

Carga efectiva por captura y pérdida electrónica



o menos frecuencia según la densidad del plasma metálico: El choque del protón con el electrón libre que lo apantalla. El protón enfrenta en neto la nube electrónica equivalente a una carga unitaria (independiente de la densidad electrónica del medio metálico y Z^* se interpreta como la frecuencia o fracción de tiempo p , en la cual el hidrógeno permanece como protón, mientras que la fracción restante q , da la permanencia como átomo neutro, con escasa contribución al frenado. Esta descripción como un sistema de dos estados en mutua alternancia se basa en la tendencia natural de transición del estado neutro para alcanzar la ionización y del ión positivo para neutralizarse mediante procesos de pérdida y captura electrónicas respectivamente. El resultado neto es $Z_H^* < 1$. En el caso del helio, éste alternaría mayormente entre los estados He^0 y He^+ (la formación de la partícula alfa propiamente dicha comenzaría a presentarse a velocidades relativamente altas).

Coefficientes de fricción de He y H en el rango metálico

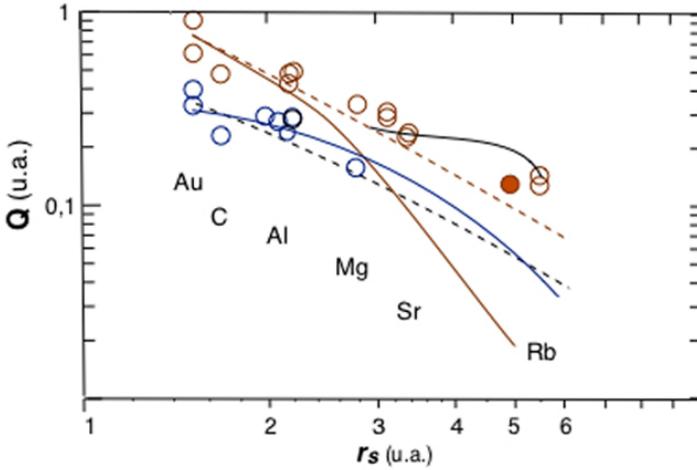
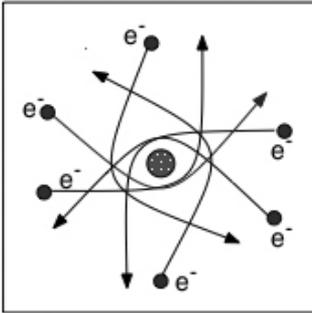


FIGURE 3. Círculos abiertos son valores experimentales. Curvas: punteadas, $F = 1$; sólidas, TFD. Código de colores: rojo para He, azul para H.

Carga efectiva debida a electrones libres dispersados



Mecanismo II: La carga efectiva puede también deberse al “enganche” leve que el protón ejerce sobre los electrones libres de la banda, en estados de dispersión. La posible contribución de este mecanismo a la carga efectiva no aparece en TFD, llevando al anuncio que el protón no captura electrones. Aunque en este caso se esperaría una dependencia marcada con r_s , en razón de la variación

de la carga apantallante que se obtiene de restar de la carga electrónica unitaria, el valor de la carga ligada, tal dependencia fuerte no se observa.

Evidencia adicional en favor de la condición ligante del protón intersticial proviene de un campo muy distinto de la experimentación. Se trata de la espectrometría por aniquilación de positrones. La tasa de aniquilación de positrones en un gas de Fermi ha sido cal-

culada por A. Sommerfeld mediante la ecuación,

$$\Lambda_{\bar{e}} = \frac{12}{r_s^3} 10^9 s^{-1}, \quad (2)$$

mientras que la tasa correspondiente para la aniquilación en el positronio aislado es muy cercana a $2 \times 10^9 s^{-1}$. Es fácil deducir la expresión correspondiente cuando se introduce una carga positiva (ej. un positrón) en un plasma de Fermi⁴. El potencial eléctrico que la carga genera induce una nube de polarización que incrementa la densidad de carga por sobre la densidad del fondo. Se puede afirmar que la densidad de carga neta alrededor de la impureza es la suma de la densidad de carga inducida y la del gas de electrones sin perturbar, por tanto, $\rho = \rho(0) + \rho_0$. Al ser ρ la densidad local neta, se puede determinar el parámetro de densidad correspondiente R_s , cuya relación con el parámetro del gas de Fermi sin perturbar es:

$$R_s^3 \left[\frac{\rho(0)}{\rho_0} + 1 \right] = r_s^3,$$

que llevada a la ecuación de Sommerfeld resulta en la ecuación de aniquilación del positrón en metales:

$$\Lambda_{\bar{e}} = \frac{12}{r_s^3} \left[\frac{\rho(0)}{\rho_0} + 1 \right] 10^9 s^{-1}$$

$\Lambda_{\bar{e}}$: Tasa de aniquilaciones por segundo.

$\rho(0)$: Densidad electrónica alrededor del positrón.

ρ_0 : Densidad electrónica del plasma metálico.

La figura 4 reúne las tasas de aniquilación experimentales para positrones en metales representativos. La curva teórica de comparación M.S. corresponde al cálculo de Sommerfeld.

Las tasas de aniquilación de positrones observadas en metales tenues (alcalinos y alcalino-térreos) es consistente con la presencia mayoritaria del positronio, mientras que la tasa se incrementa incluso por arriba de la predicción para gas de Fermi para metales densos (ver

⁴Al respecto la figura 8 del texto *Introducción a la física del estado sólido* C. Kittel, p. 287, 2a ed. en español, editorial Reverté es sugestiva

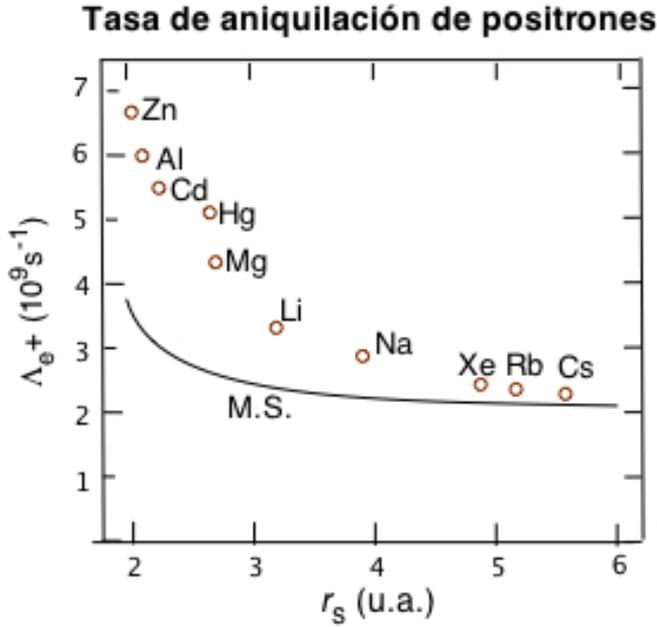


FIGURE 4. Aniquilación de positrones en metales representativos.

figura 4), confirmando un efecto de apilamiento consistente en el incremento de la densidad electrónica cerca al protón superior incluso a la densidad del átomo de hidrógeno [5].

Teniendo en cuenta que la tasa de aniquilación depende de la presencia de electrones en el sitio mismo del positrón y que el modelo atómico básico de átomo Thomas-Fermi predice allí una densidad infinita (además de sus conocidas limitaciones en regiones muy cercanas al núcleo), se debe recurrir a la densidad que registran los textos de física cuántica para átomos hidrogenoides, en el caso del hidrógeno, $\rho_H(0) = 1/\pi$, para el positronio, $\rho(0) = 1/(8\pi)$.

La dificultad del modelo básico de Thomas-Fermi no es fundamental y se supera al imponer la condición de cúspide de Kato [7]. De hecho, el efecto de apilamiento que explica el desmesurado incremento de la tasa de aniquilación por encima del cálculo de Sommerfeld se reproduce de manera precisa, al igual que lo hace TFD. En todo caso los resultados no necesariamente contradicen esta última

teoría, ni rebaten la posible existencia del hidrógeno en la forma del ión H^- , pues TFD asegura que los dos electrones ligados por el potencial efectivo se ubican lejos de la impureza (en el caso del positrón no afectan la tasa de aniquilación) y que ésta interactúa fundamentalmente con electrones libres, itinerantes.

Finalmente, la distribución anisotrópica de la radiación de aniquilación observada seguramente tenga que ver con las simetrías de celda de los metales reales para los que el modelo simple del gas de Fermi no puede dar cuenta.

Conclusión

Se presentan dos mecanismos colisionales que pueden contribuir al origen de la carga efectiva: El “enganche” de electrones libres en estado de dispersión frente a la alternancia entre protón y átomo neutro. La dependencia suave del frenado en función de r_s apoya este último. Por otra parte, los cálculos de TFD avalan la teoría formal de carga efectiva al asegurar que el protón intersticial interactúa como tal en la materia. Sin embargo, la fuerte discrepancia en la predicción de los frenados respecto de la teoría de carga efectiva modificada que muestra buen acuerdo con los experimentos de frenado, y mejor aún con el cociente de frenados R que es la determinación experimental más estable y confiable, abren la posibilidad a esta discusión, de otro modo imposible desde la teoría formal de carga efectiva. Finalmente, aunque el modelo propuesto no incluye el estado de carga H^- en sus predicciones, tampoco descarta la presencia de este anión tal y como lo afirma el resultado central de la TFD.

References

- [1] G. Martínez-Tamayo, J. C. Eckardt, G. H. Lantschner, and N. R. Arista, *Phys. Rev. A* **54**, 3131 (1996).
- [2] B. S. Yarlagadda, J. E. Robinson, and W. Brandt, *Phys. Rev. B* **17**, 3473 (1978).

- [3] W. Brandt, “Atomic collisions in solids: proceedings of the fifth international conference on atomic collisions in solids held in gatlinburg, tennessee, september 24-28, 1973,” (Plenum Press, 1975) pp. 261–288.
- [4] W. Brandt and M. Kitagawa, *Phys. Rev. B* **25**, 5631 (1982).
- [5] P. M. Echenique, R. M. Nieminen, J. C. Ashley, and R. H. Ritchie, *Phys. Rev. A* **33**, 897 (1986).
- [6] M. Bergsmann, P. Hörlsberger, F. Kastner, and P. Bauer, *Phys. Rev. B* **58**, 5139 (1998).
- [7] K. Ladányi, I. Nagy, and B. Apagyi, *Phys. Rev. A* **45**, 2989 (1992).

(Recibido: 01/2010. Aceptado:03/2010)