

Apantallamiento dinámico de una carga moviéndose en un medio material

V. Marconi⁺, M. Menghini⁺ y V.H. Ponce^{++*}

⁺Dpto. de Física - Universidad Nacional del Sur - Avda. Alem 1253 - (8000)- Bahía Blanca

⁺⁺Instituto Balseiro y Centro Atómico Bariloche -(8400)- S.C. de Bariloche

e-mail ponce@cab.cnea.edu.ar

Se ha realizado un estudio de la densidad de carga, el potencial y el campo inducidos por iones moviéndose en un gas de electrones. Se estudia el efecto Stark sobre los estados ligados del proyectil con una corrección no lineal a la respuesta del medio, introducida por el parámetro de von Weiszäcker. Se presentan resultados para diferentes proyectiles en función de su velocidad.

We have studied the charge density, potential and electric field induced by ions moving in an electron gas. We have analyzed the Stark effect on the bound states of the projectile with a non-linear correction in the medium response introduced by the von Weiszäcker parameter. We present illustrative results for different projectile charges vs. velocity.

I. INTRODUCCIÓN

El pasaje de partículas cargadas a través de un medio material es de gran importancia en muchos problemas de materia condensada, como por ejemplo en los procesos de pérdida y captura de electrones por parte del proyectil.

Estudiamos el apantallamiento dinámico de un proyectil con electrones ligados moviéndose en un sólido a una velocidad mayor que la velocidad de Fermi de los electrones del medio. Los electrones del sólido son descritos como un gas de electrones de densidad uniforme, $n_0 = 3/4\pi r_s^3$, el cual se polariza debido a la presencia de la carga externa dando lugar a corrimientos y desdoblamientos de los niveles ligados de la misma.

Calculamos estos corrimientos y desdoblamientos considerando un modelo simple que incorpora una corrección no lineal en la respuesta del medio. Se tiene en cuenta un tratamiento aproximado del scattering coulombiano de corto alcance⁽¹⁾.

II. TEORÍA

Corrección no lineal

El formalismo de respuesta lineal describe a primer orden las correcciones al potencial actuante en el material debidas a la polarización electrónica del mismo. Las transformadas de Fourier del potencial externo y total están relacionadas a través de la función dieléctrica

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) = \varepsilon(\mathbf{q}, \omega) V_{\text{tot}}(\mathbf{q}, \omega) \quad (1)$$

El potencial inducido $V = V_{\text{tot}} - V_{\text{ext}}$ y la densidad de carga de apantallamiento, que dependen de la carga y velocidad del proyectil y de las propiedades del medio

descriptas por la función dieléctrica^(2,3), vienen dados por las siguientes ecuaciones:

$$V(r) = \frac{Z}{\pi v} \int_0^\infty dQ Q J_0(Q\rho) * \int_{-\infty}^\infty d\omega \left(\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} - 1 \right) \frac{e^{i\omega z/v}}{q^2} \quad (2)$$

$$\delta n(r) = \frac{-Z}{4\pi^2 v} \int_0^\infty dQ Q J_0(Q\rho) * \int_{-\infty}^\infty d\omega \left(\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} - 1 \right) e^{i\omega z/v} \quad (3)$$

La función dieléctrica considerada es

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\frac{\lambda}{4} q^4 + \frac{v_F^2}{3} q^2 - \omega^2} \quad (4)$$

donde la velocidad de Fermi, la frecuencia de plasma y el vector de onda q que tiene una componente Q en la dirección ρ , están dadas por

$$v_F = (3\pi^2 n_0)^{1/3} \quad \omega_p = (4\pi n_0)^{1/2}$$

$$q = (Q^2 + \omega^2 / v^2)^{1/2}$$

Esta función respuesta tiene en cuenta la dispersión de plasmones en el término $v_F^2/3$ y los efectos

* Autor a quien se debe enviar la correspondencia.

de las interacciones partícula-partícula en el término de von Weizsäcker $\lambda q^4/4$.

Con el parámetro $\lambda = \lambda(Z, n_0, v)$ se incorpora una corrección no lineal al formalismo de respuesta lineal ya que ahora la función dieléctrica depende del campo externo a través de λ . Este parámetro se determina imponiendo que la densidad de carga inducida sobre el ion sea la que corresponde a la dispersión coulombiana del gas de electrones del material⁽⁴⁾:

$$\delta n(0) = n_0 \left[\frac{-2\pi\eta}{e^{-2\pi\eta} - 1} - 1 \right] \quad (5)$$

$$\eta = Z/v$$

De esta forma vamos mas allá de la descripción en primer orden de Born de la respuesta de los electrones a la excitación externa.

El campo eléctrico inducido que es la derivada del potencial inducido en la posición del proyectil, está dado por la siguiente expresión :

$$\frac{dE}{dz} = \frac{4\pi Z}{v^2} n_0 \ln \left[\frac{q_{max}}{q_{min}} \right] \quad (6)$$

donde q_{min} y q_{max} son las dos raíces reales y positivas de:

$$\frac{\lambda}{4} q^4 + \frac{v_F^2}{3} q^2 + \omega_p^2 = q^2 v^2 \quad (7)$$

Efecto Stark

La presencia del potencial inducido produce un corrimiento y desdoblamiento de los niveles electrónicos ligados al proyectil. Estas correcciones estan descritas por la matriz de acoplamiento en cada nivel n:

$$\begin{aligned} &\langle \varphi_{nlm}(\mathbf{r}) | V(\mathbf{r}) | \varphi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) \rangle \approx \\ &\langle \varphi_{nlm}(\mathbf{r}) | V(0) | \varphi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) \rangle + \\ &\langle \varphi_{nlm}(\mathbf{r}) | \mathbf{E}(0) \cdot \mathbf{r} | \varphi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) \rangle \end{aligned} \quad (8)$$

donde el primer término da cuenta del corrimiento del nivel y el segundo del desdoblamiento en la aproximación Stark lineal, que está justificada siempre que la longitud de onda del potencial ($\beta=2\pi v/\omega_p$) sea mucho mayor que la extensión espacial de los orbitales.

III. DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

Se muestran los resultados obtenidos para la densidad electrónica inducida sobre el ion $\delta n(0)/Z$, en función de la velocidad cuando el proyectil se mueve en un gas de electrones con parámetro de densidad $rs=1.5$

(Fig. 1). En la misma se comparan estos valores para diferentes cargas del proyectil. La corrección no lineal es de mayor importancia a velocidades bajas e intermedias. Este hecho se aprecia en el aumento de la diferencia (10-15%) entre los valores de densidad para diferentes cargas a medida que disminuye la velocidad.

Se realizaron cálculos para diferentes materiales, $rs=2,3,\dots,6$, y se observó que la corrección es de menor importancia cuando la densidad disminuye.

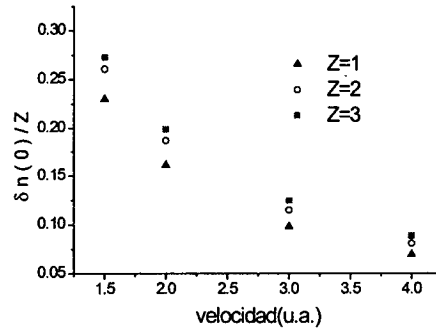


Fig. 1. Densidad inducida sobre el ion por unidad de carga vs. velocidad para un medio con $rs=1.5$.

De los cálculos del potencial inducido sobre el ion se deduce que el parámetro de no linealidad tiene un efecto mucho mas débil que en la densidad (corrección máxima del 1%). Comparando las expresiones (2) y (3) se ve claramente que es debido al factor de peso extra q^2 en la primera.

En las figuras 2 y 3 se presentan los efectos de la corrección al término de colisiones binarias en los cálculos del campo eléctrico inducido sobre la carga y el frenamiento del medio, los cuales solo difieren en un factor Z. De estos gráficos se infieren las mismas conclusiones que en la densidad inducida.

Es importante destacar que en el cálculo de la densidad de carga sobre el ion (5) no se ha tenido en cuenta la distribución de velocidades del gas de electrones puesto que los resultados obtenidos considerando esta distribución difieren en un 0.01%.

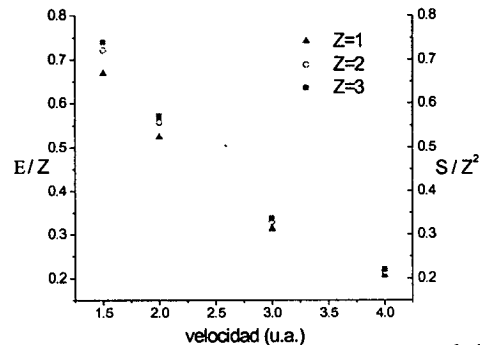


Fig. 2. Campo eléctrico y frenamiento por unidad de carga vs. velocidad para iones en un gas de electrones con $rs=1.5$.

Los valores obtenidos para el parámetro λ aumentan con la velocidad del proyectil, disminuyen con

la la carga del mismo y se mantienen por debajo de la unidad.

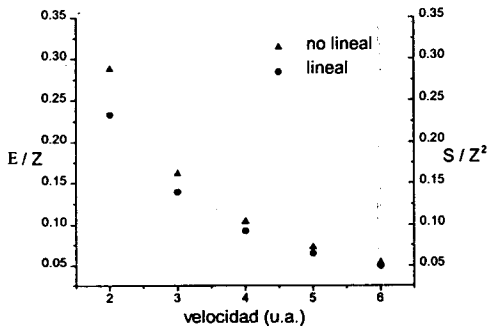


Fig. 3. Campo eléctrico y frenamiento por unidad de carga en función de la velocidad para un ion con $Z=3$ moviéndose en un medio material con $rs=2$: Comparación entre los resultados de las teorías lineal y no lineal.

En la figura 4 se muestran los desdoblamientos de los estados ligados del Li^{++} debido al efecto Stark lineal. Se realizaron los cálculos considerando los niveles $n=2$ y $n=3$ para un material con $rs=2$ (Al).

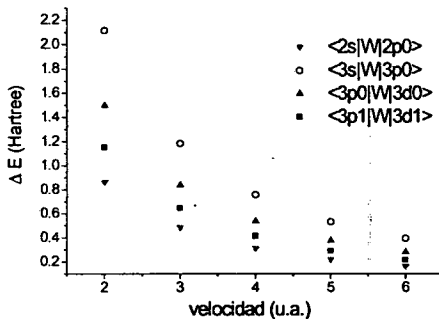


Fig. 4. Desdoblamiento de los estados ligados $n=2$ y $n=3$ del Li^{++} en un material con $rs=2$.

IV. CONCLUSIONES

Se comprobó que un tratamiento adecuado del scattering coulombiano electrón-proyectil es esencial para caracterizar las fluctuaciones de densidad inducida para velocidades del orden de la velocidad de Fermi o mayores, incidiendo esto directamente en los valores de los desdoblamientos de los estados ligados del proyectil. Sin embargo el efecto no lineal se ve disminuido en el cálculo del potencial inducido.

La incorporación de un parámetro de no linealidad como es λ incrementa la validez del modelo de respuesta lineal en el rango de las velocidades $v \sim v_F$.

Referencias

- 1 - A. Faibis, R. Kaim, I. Plesser y Z. Vager, Nucl.Instrum. Methods **170**, 99 (1980).
- 2 - P. M. Echenique, R. H. Ritchie y W. Brandt, Phys. Rev. B **20**, 2567 (1979).
- 3 - P. M. Echenique, F. Flores, y R. H. Ritchie, Solid State Physics (Academic, New York, 1990), Vol. 43, p. 230.
- 4 - I. Nagy, A. Arnau, y P. M. Echenique, Phys. Rev. B **48**, 5650 (1993).