

**UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES**

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

Tema de Tesis

**MECANISMOS DE DECAIMIENTO DE PLASMONES DE  
VOLUMEN EN METALES**

por

**Gisela Anahí Bocan**

Director de tesis

**Dr. Jorge E. Miraglia**

Lugar de trabajo

Grupo de colisiones atómicas

Inst. de Astronomía y Física del Espacio

Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas

Casilla de Correo 67, Sucursal 28, 1428, Buenos Aires, Argentina

Trabajo de Tesis para optar por el título de

Doctora de la Universidad de Buenos Aires.

Noviembre de 2005

**Título:** Mecanismos de decaimiento de plasmones de volumen en metales  
**Autor:** Gisela Anahí Bocan  
**Fecha:** Noviembre 2005  
**Palabras clave:** colisiones ión-sólido, plasmones, primera aproximación de Born.

**Title:** Mechanisms of bulk plasmon decay in metals  
**Author:** Gisela Anahí Bocan  
**Date:** November 2005  
**Key words:** ion-solid collisions, plasmons, Born first approximation.

A mi familia,  
a mis amigos.



# Agradecimientos

Son muchas las personas e instituciones sin las cuales esta tesis no hubiera sido posible. Pidiendo desde ya disculpas por olvidos inmerecidos, quiero agradecer puntualmente

- a Jorge Miraglia, mi director de tesis y consejero de estudios por su dedicación y entusiasmo.
- a María Silvia Gravielle, co-directora de mi beca de doctorado, por su apoyo constante.
- al resto de los integrantes del Grupo de Colisiones Atómicas del Instituto de Astronomía y Física del Espacio: Darío Mitnik, Claudia Montanari, Diego Arbó, Marisa Faraggi, Andrea García y Guillermo Acuña.
- al Instituto de Astronomía y Física del Espacio que me brindó la infraestructura necesaria para trabajar sintiéndome en casa.
- al CONICET y a la ANPCyT, ya que la presente tesis pudo ser realizada gracias a las becas que me otorgaron.
- a mi país, la Argentina, donde todavía defendemos nuestro derecho a una educación pública y de excelencia.



# Resumen

En el marco de colisiones de proyectiles cargados con sólidos metálicos, es un hecho conocido que las interacciones del mencionado proyectil con el gas de electrones de valencia resultarán en diversas excitaciones de este último, destacándose entre las mismas los modos de oscilación colectiva, mejor conocidos como plasmones.

Experimentalmente, la excitación de plasmones se deduce, por ejemplo, de la presencia de un pico resonante en el espectro de energía perdida por el proyectil; mientras que, desde la teoría, estas excitaciones surgen incluso en modelos simples como la RPA.

Como es esperable, en un metal real los plasmones excitados tendrán vida media finita y, luego de cierto tiempo, decaerán transfiriendo su energía y momento a uno o más electrones. En este contexto, es el objetivo de este trabajo de tesis, el lograr una descripción teórica de los mecanismos que limitan la vida media de los plasmones, posibilitando su decaimiento. Estudiamos, en particular, el decaimiento de un plasmón vía la excitación de un electrón de Bloch que realiza una transición interbanda, al que nos referiremos como *NFe* (*nearly free electron*); y el decaimiento de un plasmón vía la excitación de dos electrones interactuantes, que denominaremos *2e* (dos electrones). En ambos casos, consideramos la excitación previa del plasmón por el proyectil.

Los desarrollos presentados, basados en la primera aproximación de Born para la función de onda electrónica y la matriz de transición, son aplicados inicialmente al caso de colisiones protón-Al, obteniéndose curvas de probabilidad y potencia de excitación para los mecanismos de decaimiento considerados, que dan cuenta de un alto porcentaje de los plasmones excitados. Se observa que para altas velocidades del proyectil, *NFe* da la contribución principal al decaimiento mientras que para velocidades menores es *2e* el mecanismo más importante. Además, a partir del estudio de los espectros angulares y de energía de los electrones excitados, se determinan regiones (de

ángulo-energía) favorables a procesos que involucran decaimiento de plasmones.

A continuación, estos desarrollos son adaptados a otros proyectiles (electrones) y posibles blancos ( $Mg$ ,  $Na$  y  $K$ ). Buscamos de esta manera analizar como afectan nuestros resultados características como la estructura cristalina, la densidad electrónica, etc.

Para terminar, presentamos reglas de escaleo tanto para la probabilidad de excitación de plasmones como para la probabilidad de excitación de dos electrones libres interactuantes por decaimiento de plasmones.

# Abstract

Within the frame of projectile-solid collisions, it is a known fact that the interactions between the projectile and the valence electron gas will result in various excitations in the latter among which it is worth mentioning collective oscillations, usually referred to as plasmons.

Experimentally, plasmon excitation is inferred, for example, from the presence of a resonant peak in the projectile's energy loss spectrum; while, theoretically, these excitations are found even in simple models like RPA.

One may expect that, in a real metal, excited plasmons will have a finite lifetime and, after some time, they will decay transferring their energy and momentum to one or more electrons. In this context, it is the aim of this thesis to achieve a theoretical description of the mechanisms that allow these plasmons to decay. In particular, we will study plasmon decay via the excitation of a Bloch electron that performs an interband transition (referred to as  $NFe$  for nearly free electron) and plasmon decay via the excitation of two interacting electrons (referred to as  $2e$  for two electrons). In both cases, we will consider the previous excitation of the plasmon by the projectile.

The model we present, which is based on a first order Born approximation for both the electronic wave function and the transition matrix, is initially applied to proton-Al collisions. We obtain the probability and excitation power as a function of the projectile's velocity for the decay mechanisms considered. Our results account for most of the excited plasmons. It is shown that for high projectile velocities,  $NFe$  gives the main contribution to plasmon decay while for lower velocities, the most important mechanism is  $2e$ . Besides, we study angle and energy spectra for the excited electrons, in order to determine regions (in angle and energy) that favour plasmon involved processes.

After that, our model is extended to other projectiles (electrons) and possible targets ( $Mg$ ,  $Na$  y  $K$ ) as we intend to analyze how target characteristics such as the crystal structure or the electronic density affect our results.

Finally, we present scaling rules for the plasmon creation probability as well as for the probability of plasmon decay via the excitation of two interacting free electrons.

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>I</b>
<b>Abstract</b>	<b>III</b>
<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Motivación</b>	<b>7</b>
<b>2. Consideraciones preliminares</b>	<b>11</b>
2.1. Aproximación de Hartree y modelo del <i>jellium</i> . . . . .	11
2.2. Perturbaciones en el <i>jellium</i> . . . . .	12
2.2.1. Potencia de frenamiento . . . . .	12
2.2.2. Respuesta dieléctrica de Lindhard . . . . .	14
2.2.3. Excitaciones posibles y relación de dispersión . . . . .	15
2.2.4. Respuesta dieléctrica de Mermin-Lindhard . . . . .	16
<b>3. Decaimiento de plasmones por transiciones interbanda en colisiones     protón-aluminio</b>	<b>19</b>
3.1. Hipótesis de trabajo . . . . .	19
3.2. Teoría . . . . .	20
3.2.1. El Hamiltoniano y la matriz de transición . . . . .	20
3.2.2. Desarrollo perturbativo de la función de onda . . . . .	23
3.2.3. La probabilidad por unidad de tiempo . . . . .	25
3.3. Resultados . . . . .	27
3.3.1. Consideraciones generales . . . . .	27
3.3.2. Probabilidad total y potencia de excitación . . . . .	29

3.3.3.	Espectros de primeros diferenciales en ángulo y energía . . . . .	31
3.3.4.	Espectros de segundos diferenciales en ángulo y energía . . . . .	34
<b>4.</b>	<b>Decaimiento de plasmones por excitación de dos electrones interactuantes en colisiones protón-aluminio</b>	<b>39</b>
4.1.	Hipótesis de trabajo . . . . .	39
4.2.	Teoría . . . . .	40
4.2.1.	El Hamiltoniano y la matriz de transición . . . . .	40
4.2.2.	Desarrollo perturbativo para la función de onda del par $e_1 - e_2$ .	43
4.2.3.	Correcciones de Hartree-Fock para la función de onda y para la matriz de transición . . . . .	46
4.2.4.	Probabilidad por unidad de tiempo . . . . .	48
4.3.	Resultados . . . . .	49
4.3.1.	Consideraciones generales . . . . .	49
4.3.2.	Probabilidad de transición y potencia de excitación . . . . .	50
4.3.3.	Espectros de primeros diferenciales en ángulo y energía . . . . .	53
4.3.4.	Espectros de segundos diferenciales en ángulo y energía . . . . .	56
<b>5.</b>	<b>Decaimiento de plasmones en colisiones electrón-aluminio</b>	<b>57</b>
5.1.	Teoría . . . . .	57
5.1.1.	Adaptación de las fórmulas . . . . .	57
5.1.2.	Una observación numérica . . . . .	59
5.2.	Resultados . . . . .	61
5.2.1.	Probabilidad total y potencia de excitación . . . . .	61
5.2.2.	Espectros angulares y de energía . . . . .	64
<b>6.</b>	<b>Mecanismos de decaimiento de plasmones en colisiones protón-metal</b>	<b>67</b>
6.1.	Comentarios previos . . . . .	67
6.2.	Resultados . . . . .	69
6.2.1.	Probabilidad total y potencia de excitación . . . . .	69
6.2.2.	Espectros angulares y de energía . . . . .	74
6.3.	Reglas de escaleo . . . . .	76
6.3.1.	Escaleo para creación de plasmones: probabilidad y potencia de frenamiento . . . . .	76

6.3.2. Escaleo para la contribución $2e$ al decaimiento de plasmones . . .	77
<b>Conclusiones</b>	<b>81</b>
<b>A. Gases de electrones</b>	<b>85</b>
A.1. Hamiltoniano electrónico . . . . .	85
A.2. Comportamiento colectivo . . . . .	86
A.2.1. Apantallamiento . . . . .	86
A.2.2. Oscilaciones colectivas . . . . .	87
<b>B. Función de respuesta dieléctrica</b>	<b>89</b>
B.1. Perturbación que depende del tiempo . . . . .	89
B.2. La respuesta dieléctrica de Lindhard . . . . .	90
<b>C. Definiciones elementales</b>	<b>95</b>
C.1. Unidades atómicas . . . . .	95
C.2. Transformada de Fourier . . . . .	96
<b>D. Teoría de <i>Scattering</i></b>	<b>97</b>
D.1. Formulación independiente del tiempo . . . . .	97
D.1.1. Ecuación de Lippmann-Schwinger . . . . .	97
D.1.2. Series de Born . . . . .	98
D.2. Formulación dependiente del tiempo . . . . .	99
D.2.1. La representación de interacción . . . . .	100
D.2.2. Probabilidad de transición . . . . .	101
<b>E. Serie de Born e interacción efectiva</b>	<b>103</b>
<b>F. Estructuras cristalinas</b>	<b>109</b>
F.1. Redes de Bravais . . . . .	109
F.2. Estructura cristalina: Redes con base . . . . .	111
F.3. Estructura cristalina y constantes de red para los elementos utilizados .	112
F.4. La red recíproca . . . . .	113

---

<b>G. Potenciales Modelo</b>	<b>115</b>
G.1. Teoría . . . . .	115
G.2. Resultados . . . . .	116
G.3. Obtención de los $\tilde{V}_{\mathbf{Q}}/\sqrt{\Omega}$ . . . . .	117
G.3.1. Aluminio . . . . .	117
G.3.2. Sodio y Potasio . . . . .	118
G.3.3. Magnesio . . . . .	118
<b>Bibliografía</b>	<b>121</b>

# Introducción

Un proyectil cargado que viaja en el interior de un sólido metálico, producirá en el mismo variedad de fenómenos entre los que podemos mencionar la excitación de modos vibracionales de la red cristalina (fonones), la ionización de electrones de las capas internas y las excitaciones posibles del gas de electrones de valencia.

En este último grupo encontraremos excitaciones binarias, en que algún electrón es excitado por el proyectil (creación de pares electrón-hueco), y también excitaciones colectivas o plasmones, en que son excitados simultáneamente muchos electrones debido al largo alcance de las interacciones coulombianas [1–4] (Ver apéndice A). De hecho, la excitación de plasmones provee una importante contribución al espectro de energía perdida por el proyectil no solamente para el caso mencionado de colisiones ion-sólido metálico, sino también para colisiones de iones con superficies metálicas [5–31]. Es más, sorprendentemente, también hay evidencia de excitación de plasmones en semiconductores y aislantes [32–43]; y más recientemente en *clusters* [44–54] y cables cuánticos [55–64], por citar solamente algunos ejemplos.

Volviendo al caso de colisiones ión-metal, la forma más simple de modelar la respuesta del gas de electrones de conducción a la perturbación generada por el proyectil es la aproximación de fase aleatoria o *RPA* (*random phase approximation*). Las excitaciones posibles del gas de electrones se resumen en una *respuesta dieléctrica* cuya forma funcional fue hallada por Lindhard [65–73] (Ver apéndice B). En la misma, la excitación de plasmones está asociada al comportamiento deltiforme que se produce para ciertas transferencias de energía-momento  $(\omega, q)$  localizadas a lo largo de la llamada *línea de plasmón*. La respuesta dieléctrica de Lindhard fue más tarde modificada por Mermin que suavizó el comportamiento singular de esta línea de plasmones introduciendo un ancho finito  $\gamma$  de modo de asegurar la conservación de la cantidad local

de electrones [74].

A finales de los años '50 DuBois [75,76] mostró que, a mínimo orden perturbativo y utilizando el modelo RPA, no había mecanismos disponibles que limitaran la vida media de los plasmones. Esta falta de mecanismos de atenuación (decaimiento) resultaba poco realista por lo que DuBois sugirió que, dadas las altas densidades electrónicas características de los metales, las interacciones de tres o más partículas, no contenidas en la RPA, debían ser importantes y un plasmón podía, por lo tanto, decaer transfiriendo su energía y momento a dos o más electrones interactuantes.

DuBois reconoció sin embargo [77], que estos procesos no lograban explicar ciertos resultados experimentales que obtenían una atenuación finita (ancho no nulo de la línea de plasmón) para  $q \rightarrow 0$ , contrariamente al comportamiento tipo  $q^2$  predicho por Nozières y Pines [71]. Estos autores observaban, además, que manteniéndose dentro del marco de la RPA, los plasmones podían sufrir atenuación debido al potencial periódico de la red de iones, ya que existían transiciones interbanda en el rango de energía requerido.

Más recientemente, resultados experimentales de Platzman [78] confirmaron la existencia de fuertes correlaciones no RPA en líquidos de electrones. Además algunos trabajos teóricos buscaron incluir procesos que involucran la excitación de dos o más electrones [79, 80]. La primera descripción cuantitativa de decaimiento de plasmones vía la excitación de un electrón de Bloch que realiza una transición interbanda se debe a Chung y Everhart [81] que mostraron que este mecanismo representaba una importante fuente de electrones secundarios de baja energía en metales cuyos electrones respondían al modelo de electrones casi libres (*nearly free electron gas*, NFEG) o modelo de Bloch. Su trabajo fue continuado por Rösler y colaboradores [82–88], que desarrollaron la mayor parte de la teoría actualmente disponible sobre decaimiento de plasmones y su contribución al espectro de electrones emitidos. Es importante destacar que, en estos trabajos, la interacción entre un electrón de Bloch y la red de iones se describe utilizando los potenciales modelo de Heine, Abarenkov y colaboradores [89–98].

El primer intento de incluir tanto la excitación de un electrón de Bloch como la excitación de dos electrones interactuantes en el cálculo del ancho de la línea de plasmón (y por lo tanto de considerar ambos mecanismos de decaimiento de plasmones en conjunto), se debe, creemos, a Sturm y Oliveira [99] que obtuvieron que las transiciones interbanda constituían el principal mecanismo de decaimiento de plasmones.

En esta tesis nos proponemos lograr una descripción de los dos mecanismos de decaimiento mencionados, dentro del marco de la teoría de colisiones atómicas. El modelo propuesto está basado en la primera aproximación de Born (primer orden perturbativo), los potenciales modelo de Animalu *et al.* para describir el potencial de la red de iones, y la respuesta dieléctrica de Lindhard, corregida por Mermin, como una forma simple de considerar la atenuación de la vida media de los plasmones.

Mencionemos, en relación con esta última, que, en algunos metales, la estructura de la ‘línea de plasmón’ puede ser bastante más complicada que la aquí supuesta [100–104].

En el Cap. 1, se presentan recientes resultados experimentales que motivan esta tesis.

En el Cap. 2, se introducen las ideas y modelos conocidos relativos a la descripción teórica de sólidos metálicos. En particular se define el modelo del *jellium*, la aproximación de Hartree y la respuesta dieléctrica de Lindhard, mostrando como esta última contiene la posibilidad de excitaciones colectivas resonantes (plasmones).

En el Cap. 3, trabajamos con colisiones protón-aluminio, desarrollando un modelo para describir el mecanismo por el cual los plasmones excitados por el proyectil, decaen transfiriendo su energía y momento a un electrón de Bloch que realiza una transición interbanda. La función de onda de este electrón es aproximada con una serie de Born de primer orden en el potencial electrón-red, considerando a la onda plana como función de onda no perturbada. La interacción entre el proyectil y el electrón, en presencia del gas de electrones, se describe con un potencial efectivo que depende de la respuesta dieléctrica, y la matriz de transición se aproxima con una serie de Born de primer orden en el potencial proyectil-electrón.

Se presentan resultados para la probabilidad por unidad de tiempo y la potencia de excitación que se comparan con cálculos para la excitación de plasmones y con otros mecanismos de excitación de electrones que no involucran plasmones como interacciones binarias o ionización de electrones de las capas internas.

Con la idea de identificar qué zonas de ángulo-energía son más favorables para encontrar electrones excitados por plasmones, analizamos los espectros de primeros y segundos diferenciales en estas variables.

En el Cap. 4, para el mismo sistema de protón viajando en el interior de aluminio, estudiamos el mecanismo por el cual los plasmones excitados decaen transfiriendo su energía-momento a un par de electrones interactuantes. Nuevamente, la función de

onda del par de electrones se aproxima con una serie de Born, ahora de primer orden en la interacción efectiva (tipo Yukawa) electrón-electrón. Tomamos como función de onda no perturbada un producto de ondas planas como corresponde al resto de los electrones del gas. El desarrollo de la serie de Born para el operador de transición nos permite pensar en un sistema simplificado con interacciones efectivas entre el proyectil y cada uno de los electrones que se expresan en función de la respuesta dieléctrica. Sobre este sistema se consideran, además, correcciones tipo Hartree-Fock ya que los dos electrones son partículas idénticas.

Los resultados que se obtienen para las probabilidades y potencias de excitación, se agregan a los calculados en el Cap. 3 y se observa que ambos mecanismos en conjunto logran dar cuenta de aproximadamente el 65 % de los plasmones excitados. Además, la pendiente de la curva de excitación es reproducida en forma satisfactoria. Se observa que la importancia relativa de cada mecanismo varía de acuerdo a la velocidad del proyectil considerada.

El análisis de los espectros de energía y angulares nos permite nuevamente identificar regiones favorables para la excitación de electrones vía plasmones. También podemos reconocer qué mecanismo de decaimiento de plasmones estuvo involucrado. En particular, las zonas de baja energía y con momento paralelo a la velocidad inicial del proyectil resultan favorables a la excitación de dos electrones interactuantes vía decaimiento de plasmones. Los electrones de Bloch, por otro lado, cuando son excitados por este tipo de procesos, constituyen la fuente primaria de electrones con momentos antiparalelos a la velocidad inicial del proyectil con energías cercanas a la unidad atómica.

En el Cap. 5, consideramos colisiones electrón-aluminio, en particular aquellas en que el proyectil (ahora un electrón) excita a un electrón del gas vía un plasmón. Se estudian los mecanismos presentados en los capítulos previos, extendiendo el formalismo de modo que sea válido para proyectiles livianos. Estas modificaciones se traducen en complicaciones numéricas que discutimos brevemente. Se presentan probabilidad, potencia de excitación y espectros de primeros diferenciales que se comparan con los obtenidos en los capítulos 3 y 4 para protones, observándose diferente velocidad umbral pero comportamiento cualitativamente semejante para ambos proyectiles. En particular, se observa que los mecanismos de decaimiento presentados dan cuenta de un porcentaje de los plasmones excitados muy similar al caso de protones.

En el Cap. 6, volvemos al caso de protones pero consideramos colisiones con distintos metales simples como magnesio, sodio y potasio. Estudiamos como las distintas características de los mismos afectan los resultados para los dos mecanismos de excitación que involucran plasmones. En particular, consideramos la influencia de las diferentes estructuras cristalinas, densidades electrónicas y anchos de la línea de plasmón. Obtenemos gráficos de probabilidades, potencias de excitación y espectros de primeros diferenciales.

Para terminar presentamos reglas de escaleo aproximadas para la probabilidad de excitación de plasmones y para el proceso de excitación de dos electrones interactuantes vía un plasmón (estudiado en el Cap. 4).



# Capítulo 1

## Motivación

En años recientes, diversos trabajos experimentales han presentado espectros de electrones emitidos por superficies de distinta clase, sobre las cuales inciden proyectiles cargados; en particular Baragiola *et al* [25, 26] y Lacombe *et al* [31] han estudiado colisiones rasantes de protones a alta velocidad sobre superficies metálicas, mientras De Ferrariis [43] ha presentado espectros para colisiones rasantes de electrones rápidos sobre LiF (aislante). En ambos casos, un mecanismo importante por el cual el proyectil cede energía al sólido es la excitación de plasmones que, en metales, se interpretan como oscilaciones colectivas del gas de electrones de valencia y, en aislantes, están asociados a oscilaciones del vector de polarización.

Los plasmones excitados por el pasaje del proyectil tienen vida media finita y decaen transfiriendo su energía y momento a electrones que son emitidos por la superficie, con cierta energía característica. Experimentalmente, sin embargo, se dificulta distinguir estos electrones de aquellos emitidos, en ese mismo rango de energía, como consecuencia de procesos no plasmónicos.

Un espectro de energía electrónica típico, para colisiones rasantes de protones sobre una superficie de aluminio se muestra en la Fig. 1.1. El decaimiento de plasmones se asocia en estos casos, a la presencia de un punto de inflexión, más fácilmente detectable analizando la derivada  $dN(E)/dE$  del conteo de electrones  $N(E)$ .

Curiosamente, para el caso de colisiones rasantes de electrones sobre una superficie aislante, el pico de decaimiento de plasmones se observa con mayor claridad, como se muestra en la Fig. 1.2.

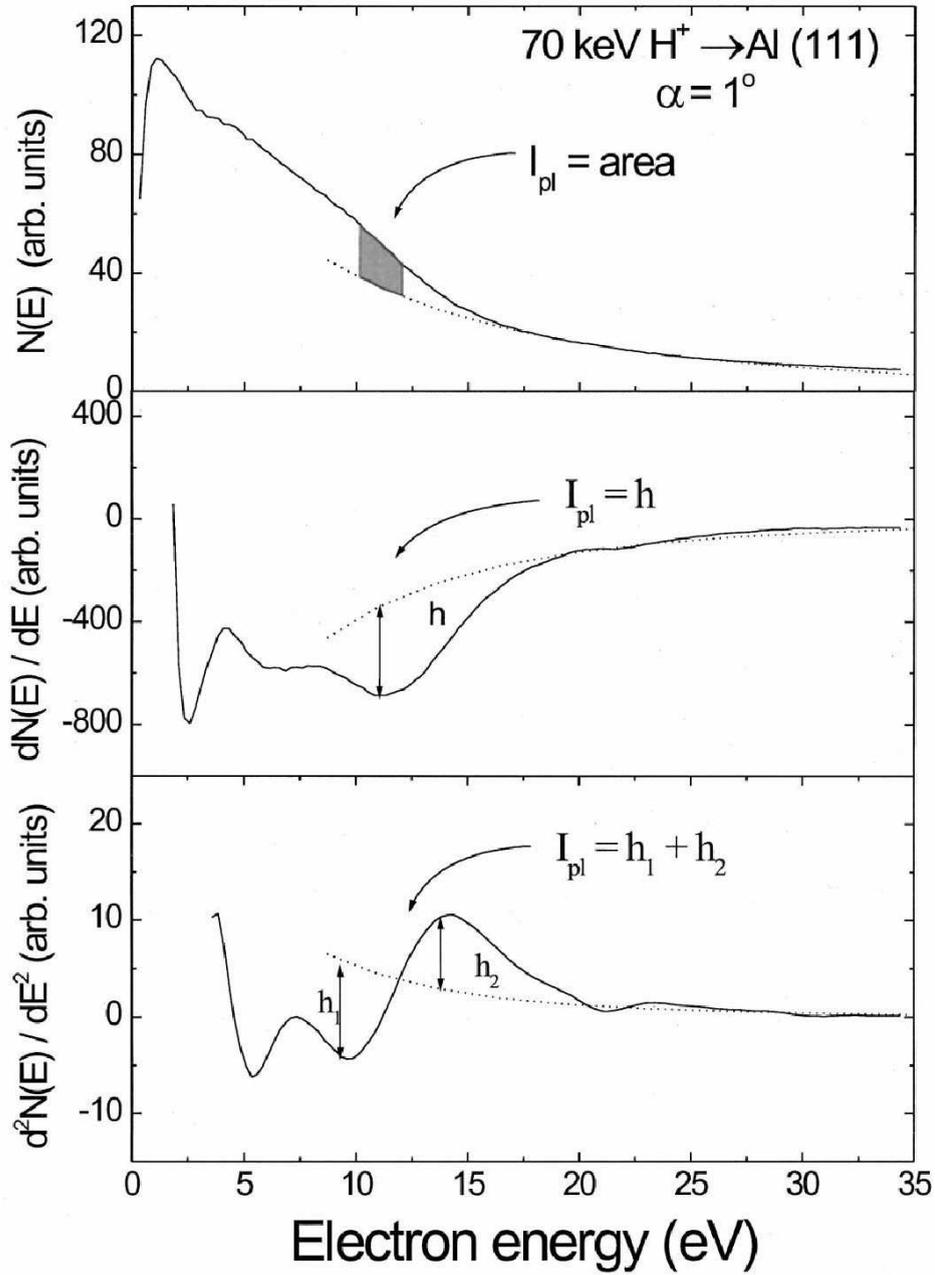


Figura 1.1: Espectro de electrones emitidos típico para colisiones de protones de 70 keV sobre Al (111) a  $1^\circ$ . Se presentan tres formas utilizadas por Sánchez *et al* [26] para estimar la intensidad de electrones debidos a decaimiento de plasmones,  $I_{pl}$ .

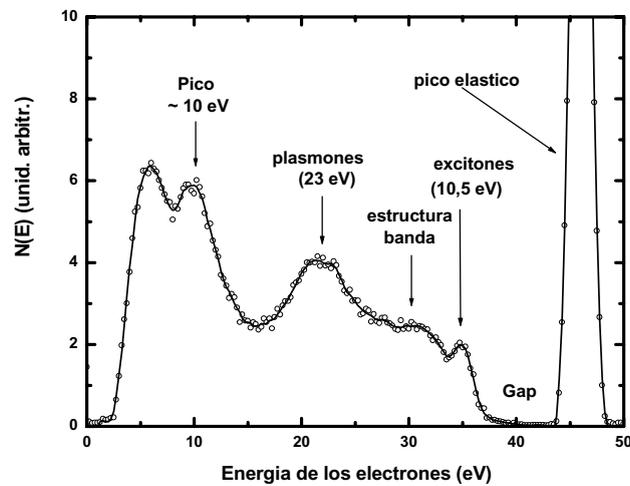


Figura 1.2: Espectro de energía perdida por el proyectil para colisiones de electrones de 45.5 eV sobre LiF a  $1^\circ$  [43].

Una teoría que pretenda reproducir los picos de plasmones de volumen presentados en las figuras previas, debería poder describir analíticamente:

- Los mecanismos por los que los plasmones excitados en el interior del sólido decaen transfiriendo su energía y momento a uno o más electrones.
- El transporte de esos electrones hasta la superficie.
- La emisión de los mismos y el rol que juegan las características de la superficie en este proceso.

Este esquema es por demás complicado e implica la resolución de la ecuación de transporte y la consideración de múltiples procesos secundarios, ya que los electrones excitados por el decaimiento de los plasmones excitarán a su vez otros plasmones y/o electrones; observemos que tanto el transporte como la superficie modificarán el espectro original de excitaciones que, en general, será diferente del espectro final de emisión.

La presente tesis está motivada por los resultados experimentales precedentes y busca describir, desde la teoría de colisiones, los mecanismos que permiten el decaimiento de plasmones. Para lograrlo, vamos a abordar este problema considerando el

caso más simple: obtendremos espectros de excitación (no de emisión) electrónica para el caso de un proyectil que viaja en el interior de un metal.

La eliminación de la superficie y de los procesos secundarios asociados al transporte es una simplificación necesaria para obtener información útil sobre el ya suficientemente complicado fenómeno de decaimiento. Quedan como proyectos a futuro tanto la adaptación de los desarrollos que presentaremos para el caso de superficies, como el reemplazo del blanco metálico por uno aislante.

# Capítulo 2

## Consideraciones preliminares

### 2.1. Aproximación de Hartree y modelo del *jellium*

Un sólido cristalino puede describirse como un arreglo periódico de iones positivos, en cuyo potencial se mueven los electrones de valencia. Los iones están formados por los núcleos atómicos más los electrones de las capas internas. Estos electrones permanecen fuertemente unidos a sus núcleos respectivos, a diferencia de los electrones de valencia que se mueven relativamente libres de la influencia de los mismos.

En una representación de un electrón, como la de Hartree-Fock, las interacciones de los electrones de valencia, tanto con la red de iones como entre sí, se aproximan por una energía potencial de campo medio  $v_i^{HF}$  que se obtiene, junto con una base de autofunciones monoeléctricas  $\{\phi_i(x)\}$  (y sus autovalores  $\varepsilon_i$ ), a partir de un cálculo autoconsistente [105, 106]. Si despreciamos los términos de intercambio del hamiltoniano, llegamos a la aproximación de Hartree en que las funciones de onda para un sistema con  $N$  electrones se construyen como productos de  $N$  funciones de la base monoeléctrica  $\{\phi_i(x)\}$ .

En el marco de esta aproximación, la descripción de un sólido se simplifica aún más trabajando en el modelo del *jellium* o gas de electrones libres (*FEG*), en que el arreglo de iones es reemplazado por un fondo uniforme de carga positiva que asegure la neutralidad eléctrica del conjunto. El hamiltoniano para el sistema (electrones de valencia + fondo) resulta entonces invariante traslacional y, si suponemos interacciones independientes del spin, encontramos que las autofunciones orbitales  $\{\phi_i(\mathbf{r})\}$  se reducen

a ondas planas y las contribuciones a la energía debidas a interacciones (e-e, e-fondo y fondo-fondo) se compensan de modo que la energía del conjunto es puramente cinética.

Resumiendo, la combinación de la aproximación de Hartree y el modelo del *jellium* nos lleva, esencialmente, a un sistema de partículas no interactuantes [105, 106].

De esta manera, pensando que tenemos  $N$  electrones en un volumen  $\Omega$ , podemos armar, por ejemplo, el estado fundamental del gas, ocupando los autoestados monoeléctricos de menor energía, de forma consistente con el principio de exclusión de Pauli. Los vectores de onda  $\mathbf{k}$ , que determinan los estados a menos del spin, están distribuidos en el espacio recíproco (o espacio  $\mathbf{k}$ ) llenando un volumen que podemos aproximar por una esfera. Esta es la esfera de Fermi cuyo volumen es  $4\pi k_F^3/3$ , siendo  $k_F$  el módulo del vector de onda asociado a un estado que se ubica en el nivel de mayor energía o nivel de Fermi. La densidad de estados en el espacio  $\mathbf{k}$  está dada por  $\Omega/(2\pi)^3$ . El total de estados es entonces

$$\frac{4\pi k_F^3}{3} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} = \frac{k_F^3 \Omega}{6\pi^2}. \quad (2.1)$$

Dado que en cada estado  $\mathbf{k}$  es posible colocar dos electrones con spins opuestos, la cantidad total de electrones es

$$N = \frac{2k_F^3 \Omega}{6\pi^2}, \quad (2.2)$$

que nos permite llegar a las siguientes expresiones para la densidad de electrones y para el volumen por partícula (que pensamos como una esfera de radio  $r_s$ )

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{N}{\Omega} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}, \\ v &= \frac{1}{\eta} = \frac{4\pi r_s^3}{3}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

## 2.2. Perturbaciones en el *jellium*

### 2.2.1. Potencia de frenamiento

Las similitudes entre un sólido descrito desde el modelo Hartree+*jellium* y un sistema de partículas libres son circunstanciales como puede observarse si se introduce

en el primero, una perturbación en la densidad de carga  $\rho^{ext}(\mathbf{r}, t)$ . Esta perturbación no solamente producirá excitaciones de electrones individuales sino que se observarán, además, manifestaciones de comportamiento organizado, consecuencia de las interacciones entre los electrones del gas. Nos referimos puntualmente a los fenómenos de apantallamiento (*screening*) y de excitaciones colectivas (plasmones) discutidos en el apéndice A.

Dado un proyectil clásico de carga  $Z_P$  y velocidad  $\mathbf{v}_i$ , se define la potencia de frenamiento (o *Stopping Power*)  $S_t$  como la energía  $U$  que entrega el proyectil al gas por unidad de tiempo (se considera  $S_t > 0$  cuando el gas recibe energía). Es decir,

$$\begin{aligned} S_t &\equiv \frac{dU}{dt} = -Z_P \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{E}^{ind}(\mathbf{r}, t) = -\frac{Z_P \mathbf{v}_i}{(2\pi)^2} \int \tilde{\mathbf{E}}^{ind}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} d\mathbf{k} d\omega, \\ &= \frac{i Z_P}{(2\pi)^2} \int \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{k} \tilde{\phi}^{ind}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} d\mathbf{k} d\omega, \\ &= \frac{i Z_P}{(2\pi)^2} \int \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{k} \left( \frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)} - 1 \right) \frac{4\pi}{k^2} \tilde{\rho}^{ext}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} d\mathbf{k} d\omega, \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde usamos la Ec. (B.9) del apéndice B siendo  $\epsilon(\mathbf{k}, \omega)$  la respuesta dieléctrica del gas de electrones, y pudiendo  $\rho^{ext}$  asociarse a una trayectoria lineal, es decir

$$\rho^{ext}(\mathbf{r}, t) = Z_P \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}_i t) \rightarrow \tilde{\rho}^{ext}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{Z_P}{2\pi} \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i - \omega). \quad (2.5)$$

Teniendo en cuenta ahora que  $d\mathbf{k} = k^2 \sin\theta dk d\theta d\varphi$  (donde tomamos la dirección de  $\mathbf{k}$  respecto de la dirección de  $\mathbf{v}_i$ , es decir que  $\theta$  mide el ángulo entre  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{v}_i$ ) y que el medio es isótropo (por lo que  $\epsilon(\mathbf{k}, \omega) = \epsilon(k, \omega)$ ), podemos reemplazar la Ec. (2.5) en la Ec. (2.4) e integrar en  $\omega$  y en  $\varphi$ , para encontrar

$$S_t = \frac{i Z_P^2 4\pi}{(2\pi)^3} 2\pi \int \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i \left( \frac{1}{\epsilon(k, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_i)} - 1 \right) \sin\theta dk d\theta. \quad (2.6)$$

Cambiando de variables, hacemos  $\omega = v_i k \cos\theta \rightarrow d\omega = -v_i k \sin\theta d\theta$  y llegamos a

$$\begin{aligned} S_t &= \frac{i Z_P^2}{\pi} \int_0^{+\infty} \int_{-v_i k}^{v_i k} \omega \left( \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - 1 \right) \frac{1}{v_i k} d\omega dk, \\ &= \frac{i Z_P^2}{\pi v_i} \int_0^{+\infty} \frac{1}{k} \left[ \int_0^{v_i k} \omega \left( \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - \frac{1}{\epsilon^*(k, \omega)} \right) d\omega \right] dk, \end{aligned} \quad (2.7)$$

donde hemos usado que  $\epsilon(k, -\omega) = \epsilon^*(k, \omega)$ .

El resultado final es entonces

$$S_t = -\frac{2Z_P^2}{\pi v_i} \int_0^{+\infty} \int_0^{kv_i} \frac{\omega}{k} \text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right) d\omega dk, \quad (2.8)$$

del cual puede inferirse que la probabilidad por unidad de tiempo  $P_t$  de que el proyectil interactúe (ceda momento y energía) de alguna manera con el gas, está dada por:

$$P_t = -\frac{2Z_P^2}{\pi v_i \hbar} \int_0^{+\infty} \int_0^{kv_i} \frac{1}{k} \text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right) d\omega dk. \quad (2.9)$$

Notemos aquí que, en las Ecs. (2.8) y (2.9), las cantidades  $\hbar \mathbf{k}$  y  $\hbar \omega$  representan respectivamente, el momento y la energía cedidos al gas por el proyectil.

### 2.2.2. Respuesta dieléctrica de Lindhard

El comportamiento del gas de electrones ante el pasaje del proyectil puede resumirse en una función de respuesta dieléctrica  $\epsilon(k, \omega)$  que da cuenta tanto del apantallamiento (Ec. (B.7), Apéndice B) como de las distintas clases de excitaciones.

Realizando un desarrollo perturbativo a primer orden en la carga del proyectil  $Z_P$  (Born 1), a partir del modelo de Hartree+*jellium*, puede obtenerse una expresión analítica para la respuesta dieléctrica (la deducción completa se muestra en el apéndice B). El resultado, expresado en unidades atómicas (ver apéndice C) es

$$\begin{aligned} \epsilon_L(\mathbf{k}, \omega) = & 1 + \frac{4k_F}{\pi k^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{k_F}{4k} \right. \\ & \left. \times \left[ (1 - A^2) \ln \left| \frac{1 + A}{1 - A} \right| + (1 - B^2) \ln \left| \frac{1 + B}{1 - B} \right| \right] \right\}, \quad (2.10) \end{aligned}$$

con

$$A = \frac{k}{2k_F} + \frac{\omega + i0^+}{k_F k}, \quad B = \frac{k}{2k_F} - \frac{\omega + i0^+}{k_F k}.$$

Esta es la *respuesta dieléctrica de Lindhard*.

Se puede mostrar que esta función tiene las siguientes propiedades:

- Es causal. Es decir, que el gas reacciona *con posterioridad* a la introducción de la perturbación. Imponer esta condición de contorno sobre  $\epsilon(k, \omega)$  se traduce en

que la función  $1/\epsilon(k, \omega)$  resulta analítica en el semiplano superior de  $\omega$  complejo (cuando  $Im(\omega) > 0$ ). Esto a su vez implica la conservación del número de partículas a través de la siguiente regla de suma (*f-sum-rule*):

$$\int_0^\infty \left[ Im \left( \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right) \right] \omega d\omega = -\frac{\pi}{2} \omega_P^2, \quad (2.11)$$

donde  $\omega_P^2 = 4\pi n e^2 / m$  es la frecuencia de plasmones correspondiente a las ya mencionadas oscilaciones colectivas.

- Para altas frecuencias, presenta el siguiente comportamiento asintótico

$$\epsilon(k, \omega) \xrightarrow{\omega \rightarrow +\infty} 1 - \frac{\omega_P^2}{\omega^2}. \quad (2.12)$$

### 2.2.3. Excitaciones posibles y relación de dispersión

Continuemos estudiando las perturbaciones introducidas en un sólido, en el interior del cual viaja un proyectil cargado. A partir de las expresiones (2.8) y (2.10), es fácil ver que el mencionado proyectil, generará excitaciones en el gas de electrones solamente si  $Im(1/\epsilon) \neq 0$ . Notemos que

$$Im \left( \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} \right) = -\frac{Im(\epsilon(k, \omega))}{|\epsilon(k, \omega)|^2}, \quad (2.13)$$

por lo que solamente serán posibles las excitaciones que involucren valores de  $(k, \omega)$  tales que

- $Im(\epsilon) \neq 0 \rightarrow$  excitaciones binarias,
- $Re(\epsilon) = Im(\epsilon) = 0 \rightarrow$  excitaciones colectivas (plasmones).

El primer tipo de excitaciones es, tal vez, el único esperable en un modelo de un electrón como el de Hartree. La aparición, además, de resonancias asociadas a modos de oscilación colectiva o plasmones resulta sorprendente en alguna medida y es consecuencia del largo alcance de las interacciones coulombianas entre los electrones del gas, que, debido al pasaje del proyectil, ya no son totalmente compensadas por el fondo uniforme de carga positiva.

Pasemos a unidades atómicas y consideremos un evento en que el proyectil cede momento  $p$  y energía  $\omega$  a un electrón del gas. Para que este proceso sea posible, debe conservar momento y energía del sistema, es decir

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{p} &= \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i \\ \omega &= \frac{k_f^2}{2} - \frac{k_i^2}{2} \end{aligned} \right\} \rightarrow \omega = \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{p} + \frac{p^2}{2} = k_i p \cos\theta + \frac{p^2}{2}, \quad (2.14)$$

siendo  $\mathbf{k}_i$  y  $\mathbf{k}_f$  los momentos inicial y final del electrón y llamando  $\theta$  al ángulo entre  $\mathbf{k}_i$  y  $\mathbf{p}$ . Notar que en los instantes inicial y final el proyectil está lo suficientemente lejos como para que el gas pueda considerarse no perturbado por el proyectil y viceversa.

Pidiendo que, inicialmente, el gas se encuentre en su estado fundamental, tenemos que  $k_i \leq k_F$  y, por lo tanto

$$\omega^-(p) \leq \omega \leq \omega^+(p), \quad (2.15)$$

con

$$\omega^-(p) = \frac{p^2}{2} - pk_F, \quad \omega^+(p) = \frac{p^2}{2} + pk_F. \quad (2.16)$$

Una inspección más detallada de la respuesta dieléctrica  $\epsilon_L$ , nos permite observar que las resonancias asociadas a excitación de plasmones implican que  $Im(1/\epsilon) \rightarrow -\infty$  y que este comportamiento deltiforme ocurre a lo largo de una curva  $\omega_P(p)$ .

Toda esta información puede resumirse graficando la relación de dispersión para  $Im(1/\epsilon_L)$ , como se observa en la Fig. 2.1.

Es interesante observar que, desde esta figura, se recuperan las características comentadas en el apéndice A para un *jellium* en la aproximación de fase aleatoria o RPA, equivalente a la combinación Hartree+*jellium*+Born1, como se discute en el apéndice B. Para procesos de alta longitud de onda ( $p \ll p_c$ ), el gas se comporta colectivamente y se excitarán predominantemente plasmones, mientras que, para procesos de baja longitud de onda ( $p \gg p_c$ ) las excitaciones serán predominantemente binarias. Los casos de borde  $p \sim p_c$ , presentarán los dos aspectos (binarios y colectivos) combinados y será difícil independizar uno del otro.

#### 2.2.4. Respuesta dieléctrica de Mermin-Lindhard

El comportamiento deltiforme de la línea de plasmón está relacionado con la falta, en el modelo utilizado, de mecanismos de atenuación. Un electrón del *FEG* no puede

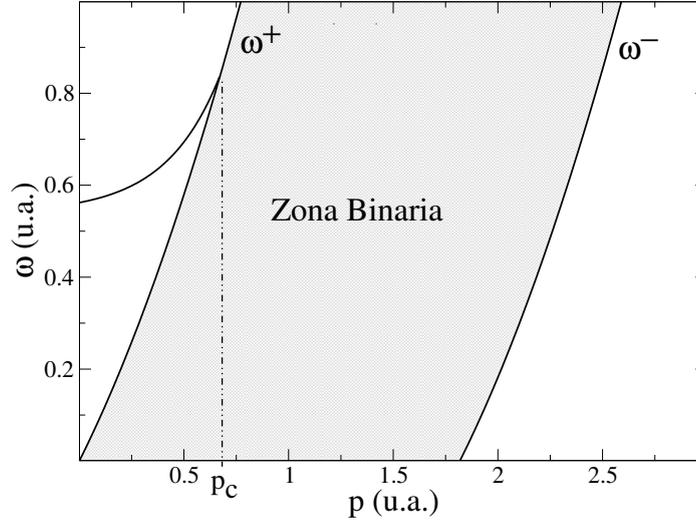


Figura 2.1: Relación de dispersión para la respuesta dieléctrica de Lindhard. A la izquierda de la zona binaria, se observa la curva que corresponde a excitación de plasmones. Se utilizó el  $k_F$  del Al.

recibir un par  $(p, \omega)$  exterior a la zona binaria (No se conservarían energía y/o momento) por lo que *la vida media de los plasmones excitados es infinita*. Este resultado en particular es poco realista y, si estamos interesados en estudiar qué ocurre con los plasmones una vez que son excitados, será necesario buscar cómo incluir en este desarrollo, algún mecanismo que permita el decaimiento de los mismos.

Una manera ingenua de agregar atenuación a la respuesta dieléctrica de Lindhard, es realizar en la misma el reemplazo  $\omega \rightarrow \omega + i\gamma$ . Sin embargo la expresión resultante no conserva la cantidad total de partículas, Ec. (2.11). Una forma de extender Lindhard, incluyendo efectos de colisiones en el gas de electrones fue hallada por Mermin [74]. La respuesta dieléctrica de Mermin-Lindhard se expresa como sigue:

$$\epsilon_{ML}(p, \omega, \gamma) = 1 + \frac{(1 + i\gamma/\omega)(\epsilon_L(p, \omega + i\gamma) - 1)}{1 + (i\gamma/\omega)(\epsilon_L(p, \omega + i\gamma) - 1)/(\epsilon_L(p, 0) - 1)}. \quad (2.17)$$

Esta expresión verifica la *f-sum rule* y su relación de dispersión no es muy distinta de la de Lindhard. La única diferencia importante es que la región de excitación de plasmones ya no es de ancho nulo e incluye, por lo tanto, la posibilidad de decaimiento de los mismos. En la Fig. 2.2 mostramos cortes a  $p = cte$  sobre  $Im(1/\epsilon_{ML})$  en la

zona de plasmones. En particular, la cantidad  $\gamma$  es el ancho completo a media altura (FWHM, *full width at half maximum*) de la ‘línea’ de plasmones para momento nulo.

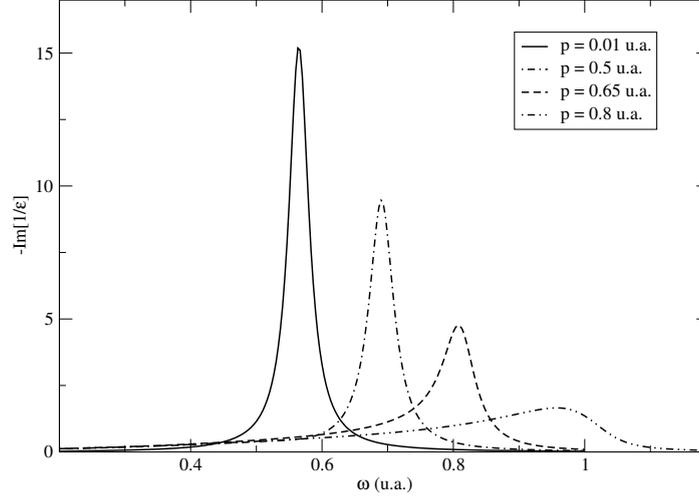


Figura 2.2: Cortes a  $Im(1/\epsilon_{ML})$  para  $p = cte$ . Se utilizan los valores de  $k_F$  y  $\gamma$  corespondientes al Al.

En el caso de Lindhard, la intersección entre la línea de plasmón y la zona binaria ocurre, para el Al, en  $p_c \approx 0.67$  u.a. En la Fig. 2.2 puede observarse como, a medida que aumenta  $p$ , las curvas van perdiendo simetría. Esto se debe a las excitaciones binarias, que comienzan a contaminar la resonancia asociada a la excitación colectiva. En particular, la curva correspondiente a  $p = 0.8$  u.a.  $> p_c$ , tiene una estructura esencialmente binaria.

# Capítulo 3

## Decaimiento de plasmones por transiciones interbanda en colisiones protón-aluminio

### 3.1. Hipótesis de trabajo

Un proyectil cargado que viaja a alta velocidad ( $v_i \gg v_F$ ) en el interior de un sólido metálico, será capaz de excitar en el gas de electrones modos de oscilación colectiva, mejor conocidos como plasmones.

Por brevedad, nos referiremos al modelo presentado en el capítulo previo como *FEG* (*free electron gas*). En el mismo, los plasmones excitados por el pasaje de un proyectil, tendrán vida media infinita debido a la falta de mecanismos de atenuación.

Una forma de mejorar nuestro modelo para incluir la posibilidad de decaimiento de plasmones, es reemplazar el fondo uniforme positivo por un, más realista, arreglo periódico de iones en cuyo débil potencial se mueven los electrones (gas de electrones casi libres, *NFEG* (*nearly free electron gas*), o gas de electrones de Bloch).

Las excitaciones posibles en un *NFEG* incluyen la posibilidad de transiciones intra- e interbanda. Las primeras son muy similares a las excitaciones en un *FEG* pero las segundas se encuentran en rangos de energía del orden de las energías de excitación de plasmones. Esto implica que *un plasmón podrá decaer transfiriendo su momento y energía a un electrón de Bloch que realizará una transición interbanda.*

En este capítulo, pretendemos describir este mecanismo de decaimiento de plasmones a partir de realizar las mínimas correcciones posibles en el modelo del *FEG*, descrito en el capítulo anterior. Trabajaremos con las siguientes hipótesis:

- Consideraremos como electrón de Bloch *solamente* al que de hecho realizará la transición interbanda. El resto de los electrones seguirá siendo modelado como un *FEG*.
- El potencial periódico débil será tratado perturbativamente.
- No tendremos en cuenta la posibilidad de excitación de modos vibracionales (fonones) en la red de iones (Modelo de red estática).
- Asumiremos que la respuesta dieléctrica apropiada para nuestro modelo es la de Mermin-Lindhard, Ec. (2.17), obteniéndose el ancho  $\gamma$  a partir de ajustes sobre espectros experimentales [101, 107].
- Trabajaremos en un formalismo independiente del tiempo, suponiendo una sucesión constante de proyectiles en el gas de electrones (régimen estacionario).

Como sistema de trabajo elegiremos protones que viajan en el interior de aluminio. Estudiaremos el par de procesos por el cual un protón excita un plasmón en el *FEG* y este plasmón decae transfiriendo su momento y energía a un electrón de Bloch (identificado como  $e_1$ ). Esquemáticamente:

$$\begin{aligned} Z_{P_{\mathbf{k}_i}} + FEG &\rightarrow Z_{P_{\mathbf{k}_f}} + FEG^*, \\ FEG^* + e_{\mathbf{k}_{1i}} + RED_i &\rightarrow FEG + e_{\mathbf{k}_{1f}} + RED_f, \end{aligned} \quad (3.1)$$

donde  $Z_{P_{\mathbf{k}_{i,f}}}$ ,  $e_{\mathbf{k}_{1i,f}}$  y  $RED_{i,f}$  representan, respectivamente, el estado inicial (final) del proyectil, el electrón 1 y la red de iones. Además, con  $FEG^*$  notamos la excitación de un plasmón en el *FEG*.

## 3.2. Teoría

### 3.2.1. El Hamiltoniano y la matriz de transición

Nuestro sistema de trabajo es, de acuerdo al esquema (3.1), el conjunto  $P + FEG + e_1 + RED$ . Como se mostró en el capítulo previo, el gas de electrones no perturbado

se comporta aproximadamente (desde un modelo de un electrón) como un sistema de partículas no interactuantes (Hartree+*jellium*). El hamiltoniano puede expresarse entonces como  $H = H_0 + V^{tot}$ , donde  $V^{tot}$  incluye tanto la interacción del proyectil con cada uno de los electrones como las interacciones entre electrones, inducidas por el pasaje del proyectil. Podemos escribir así :

$$\begin{aligned}
H_0 &= -\frac{1}{2M_P}\nabla_{\mathbf{R}}^2 + H_1 - \frac{1}{2}\sum_{j\geq 2}\nabla_{\mathbf{r}_j}^2, \\
&= -\frac{1}{2M_P}\nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 + V_1^{(S)} - \frac{1}{2}\sum_{j\geq 2}\nabla_{\mathbf{r}_j}^2, \\
V^{tot} &= V^{(P)} + V^{(e)}, \\
&= \sum_{j\geq 2}(V_{Pj}) + V_{P1} + \sum_{j\geq 2}\left(V_j^{(e)}\right) + V_1^{(e)},
\end{aligned} \tag{3.2}$$

donde  $H_1$  es el hamiltoniano no perturbado del electrón 1,  $V_1^{(S)}$  es la interacción de este electrón con la red de iones,  $V_{P\alpha} = -Z_P/|\mathbf{R} - \mathbf{r}_\alpha|$  es la atracción coulombiana entre el proyectil y un electrón ( $\alpha \geq 1$ ),  $V_1^{(e)} = \sum_{j\geq 2}(1/|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_1|)$  es la suma de las interacciones del electrón 1 con cada uno de los electrones del *FEG*, y  $V_j^{(e)} = \frac{1}{2}\sum'_{l\geq 2}V_{lj} = \frac{1}{2}\sum'_{l\geq 2}(1/|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j|)$  es el total de la repulsión coulombiana para el electrón  $j$  debida a sus interacciones con el resto del *FEG*. Las coordenadas  $\mathbf{R}$  y  $\mathbf{r}_\alpha$  representan las posiciones del proyectil y del electrón  $\alpha$ , respectivamente.

Los estados inicial y final para este sistema son

$$\begin{aligned}
\Psi_i &= \Phi_{\mathbf{K}_i}\xi_{\mathbf{k}_{1i}}\prod_{j\geq 2}\phi_{\mathbf{k}_{ji}}, \\
\Psi_f &= \Phi_{\mathbf{K}_f}\xi_{\mathbf{k}_{1f}}\prod_{j\geq 2}\phi_{\mathbf{k}_{jf}},
\end{aligned} \tag{3.3}$$

donde  $\Phi_{\mathbf{K}_{i,f}}$  es la función de onda del proyectil (onda plana) normalizada a la  $\delta$  de Dirac, las funciones  $\phi_{\mathbf{k}_{ji,f}}$  son ondas planas correspondientes a los electrones del *FEG*, y  $\xi_{\mathbf{k}_{1i}}$  y  $\xi_{\mathbf{k}_{1f}}$  representan, respectivamente, el estado inicial y final del electrón de Bloch ( $e_1$ ). Observemos que, al ser autofunciones de  $H_1$ ,  $\xi_{\mathbf{k}_{1i}}$  y  $\xi_{\mathbf{k}_{1f}}$  satisfacen la ecuación de Schrödinger siguiente:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 + V_1^{(S)} - \varepsilon_{i,f}^1\right]\xi_{\mathbf{k}_{1(i,f)}} = 0, \tag{3.4}$$

con  $\varepsilon_{i,f}^1$  la energía de  $e_1$ .

Por otro lado, el operador de transición  $T$ , puede expresarse como una serie de Born que involucra al operador de energía potencial  $V^{tot}$  y al propagador de Green  $G_0^+ = [E - H_0 + i0^+]^{-1}$  (ver apéndice D) siendo  $E$  la energía del sistema. Es decir,

$$T = V^{tot} + V^{tot}G_0^+V^{tot} + V^{tot}G_0^+V^{tot}G_0^+V^{tot} + \dots, \quad (3.5)$$

y la matriz de transición conectando los estados inicial y final se escribe entonces

$$T_{if} = \langle \Psi_f | T | \Psi_i \rangle = \langle \Psi_f | V^{tot} + V^{tot}G_0^+V^{tot} + V^{tot}G_0^+ \dots | \Psi_i \rangle. \quad (3.6)$$

Si olvidamos, por un momento, las interacciones que involucran a electrones del *FEG*, resulta que, a primer orden en la carga del proyectil, la expresión anterior se reduce a

$$\begin{aligned} T_{if}^{(0)} &\approx \langle \Psi_f | V_{P1} | \Psi_i \rangle, \\ &= \int \dots \int \Phi_{\mathbf{K}_f}^*(\mathbf{R}) \xi_{\mathbf{k}_{1f}}^*(\mathbf{r}_1) \prod_{j \geq 2} \phi_{\mathbf{k}_{jf}}^*(\mathbf{r}_j) V_{P1}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}) \Phi_{\mathbf{K}_i}(\mathbf{R}) \xi_{\mathbf{k}_{1i}}(\mathbf{r}_1) \\ &\quad \times \prod_{j \geq 2} \phi_{\mathbf{k}_{ji}}(\mathbf{r}_j) d\mathbf{R} d\mathbf{r}_1 \prod_{j \geq 2} d\mathbf{r}_j, \end{aligned} \quad (3.7)$$

donde podemos integrar directamente las coordenadas del *FEG* ( $j \geq 2$ ) para obtener las deltas de Dirac  $\prod_{j \geq 2} \delta(\mathbf{k}_{jf} - \mathbf{k}_{ji})$  que implican que el mismo no cambia de estado debido a la transición. Haciendo uso de la transformada de Fourier, podemos mostrar que

$$T_{if}^{(0)} \approx \frac{\tilde{V}_{P1}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \langle \xi_{\mathbf{k}_{1f}} | e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1} | \xi_{\mathbf{k}_{1i}} \rangle, \quad (3.8)$$

donde  $\mathbf{p} = \mathbf{K}_i - \mathbf{K}_f$  y  $\tilde{V}_{P1}$  es la transformada de Fourier de la interacción  $P - e_1$  en ausencia del *FEG*.

Volvamos ahora a la Ec. (3.6). Puede mostrarse (ver apéndice E) que, manteniendo nuestro cálculo siempre a primer orden en la carga del proyectil, y pidiendo que el *FEG* no cambie de estado, esta expresión se transforma en

$$T_{if} \approx \frac{\tilde{V}_{P1}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2} \epsilon_L(p, \omega)} \langle \xi_{\mathbf{k}_{1f}} | e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1} | \xi_{\mathbf{k}_{1i}} \rangle = \frac{T_{if}^{(0)}}{\epsilon_L(p, \omega)}. \quad (3.9)$$

Es interesante observar que este resultado nos permite pensar en un problema simplificado en que la energía potencial  $V^{tot}$  se reemplaza por:

$$V^{tot} \sim V_{P1}^{eff} \quad \text{con} \quad \tilde{V}_{P1}^{eff} = \frac{\tilde{V}_{P1}}{\epsilon_L(p, \omega)}, \quad (3.10)$$

siendo  $\tilde{V}_{P1}$  la transformada de Fourier de la interacción desnuda (sin el *FEG*) entre el proyectil y  $e_1$ . Pensamos así en una interacción efectiva  $P - e_1$  en presencia del *FEG*.

En nuestro caso, y por los motivos discutidos en el Cap. 2, reemplazaremos la respuesta dieléctrica de Lindhard por la de Mermin-Lindhard dada por la Ec. (2.17).

En esta representación del problema, podemos pensar que nuestro sistema está formado por el par  $P + e_1$ , y que la presencia del *FEG* se traduce en una interacción no puramente coulombiana entre ambos, que contempla, implícitamente, el par de procesos esquematizados en la expresión (3.1).

El hamiltoniano para este sistema simplificado puede expresarse como  $H = H_0 + V$ , con

$$\begin{aligned} H_0 &= -\frac{1}{2M_p} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + H_1 = -\frac{1}{2M_p} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{r}_1}^2 + V_1^{(S)}, \\ V &= V_{P1}^{eff}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

es decir que el sistema {electrón de Bloch + proyectil libre} será perturbado por su interacción efectiva (en presencia del *FEG*).

### 3.2.2. Desarrollo perturbativo de la función de onda

Partimos ahora de la Ec. (3.9) con la respuesta dieléctrica corregida y los estados inicial y final ya expresados como estados perturbados  $\xi_{\mathbf{k}_1 f}^-$  y  $\xi_{\mathbf{k}_1 i}^+$ , es decir

$$T_{if} = \frac{\tilde{V}_{P1}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2} \epsilon_{M-L}(p, \omega, \gamma)} \left\langle \xi_{\mathbf{k}_1 f}^- \left| e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1} \right| \xi_{\mathbf{k}_1 i}^+ \right\rangle. \quad (3.12)$$

De esta expresión, recuperamos el resultado colisional binario [108] (sin plasmones) si tomamos como funciones de onda  $\xi(\mathbf{r})^\pm$  a las ondas planas. Por otro lado, si la interacción entre  $e_1$  y la red de iones es lo suficientemente débil, las funciones de onda  $\xi_{\mathbf{k}_1}^\pm(\mathbf{r}_1)$  serán muy similares a esas ondas planas  $\phi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_1)$ . Realizamos entonces un

tratamiento perturbativo (Serie de Born) a primer orden en  $V_1^{(S)}$ , sobre estas funciones de onda [109]

$$\begin{aligned}\xi_{\mathbf{k}_{1i}}^+(\mathbf{r}_1) &\approx \phi_{\mathbf{k}_{1i}}(\mathbf{r}_1) + \int G_0^+(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) V_1^{(S)}(\mathbf{r}'_1) \phi_{\mathbf{k}_{1i}}(\mathbf{r}'_1) d\mathbf{r}'_1, \\ \xi_{\mathbf{k}_{1f}}^-(\mathbf{r}_1) &\approx \phi_{\mathbf{k}_{1f}}(\mathbf{r}_1) + \int G_0^-(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) V_1^{(S)}(\mathbf{r}'_1) \phi_{\mathbf{k}_{1f}}(\mathbf{r}'_1) d\mathbf{r}'_1.\end{aligned}\quad (3.13)$$

donde la función de Green  $G_0^\pm(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)$  verifica

$$\left(\varepsilon_1 + \frac{\nabla_{\mathbf{r}_1}^2}{2} \pm i0^+\right) G_0^\pm(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1). \quad (3.14)$$

Dado que el potencial de la red de iones es periódico, es posible expresarlo utilizando una serie de Fourier,

$$V_1^{(S)}(\mathbf{r}'_1) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{Q}} V_{\mathbf{Q}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}'_1}, \quad (3.15)$$

donde  $\Omega$  es el volumen de la celda unidad del cristal iónico y los momentos  $\mathbf{Q}$  corresponden a puntos de la red recíproca. Reemplazando las Ecs. (3.14) y (3.15) en la Ec. (3.13) encontramos, para el estado inicial

$$\xi_i^+(\mathbf{r}_1) \approx \frac{e^{i\mathbf{k}_{1i}\cdot\mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} + \sum_{\mathbf{Q}} \frac{1}{\varepsilon_1 + \frac{\nabla_{\mathbf{r}_1}^2}{2} + i0^+} \frac{\tilde{V}_{\mathbf{Q}}}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_1} \frac{e^{i\mathbf{k}_{1i}\cdot\mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}}, \quad (3.16)$$

y operando obtenemos

$$\xi_i^+(\mathbf{r}_1) \approx \frac{e^{i\mathbf{k}_{1i}\cdot\mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} + \sum_{\mathbf{Q}} g(\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{Q}, 0^+) \frac{e^{i(\mathbf{k}_{1i}+\mathbf{Q})\cdot\mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\tilde{V}_{\mathbf{Q}}}{\sqrt{\Omega}}, \quad (3.17)$$

con

$$g(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \beta) \equiv \frac{1}{\frac{k^2}{2} - \frac{(\mathbf{k}+\mathbf{q})^2}{2} + i\beta}, \quad (3.18)$$

donde usamos que las energías inicial  $\varepsilon_{1i}$  y final  $\varepsilon_{1f}$  de  $e_1$ , pueden aproximarse por las de una partícula libre (Notemos, además, que esta función  $g$  está relacionada con la transformada de Fourier de la función de Green).

Análogamente, para  $\xi_f^-$ , resulta

$$\xi_f^-(\mathbf{r}_1) \approx \frac{e^{i\mathbf{k}_{1f}\cdot\mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} + \sum_{\mathbf{Q}'} g(\mathbf{k}_{1f}, \mathbf{Q}', -0^+) \frac{e^{i(\mathbf{k}_{1f}+\mathbf{Q}')\cdot\mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\tilde{V}_{\mathbf{Q}'}}{\sqrt{\Omega}}. \quad (3.19)$$

Si reemplazamos ahora estas expresiones en la Ec. (3.12) encontramos

$$\begin{aligned} \langle \xi_{\mathbf{k}_{1f}}^- | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1} | \xi_{\mathbf{k}_{1i}}^+ \rangle &\approx \int \left[ \frac{e^{-i\mathbf{k}_{1f}\cdot\mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} + \sum_{\mathbf{Q}'} g^*(\mathbf{k}_{1f}, \mathbf{Q}', -0^+) \frac{e^{-i(\mathbf{k}_{1f}+\mathbf{Q}')\cdot\mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\tilde{V}_{\mathbf{Q}'}}{\sqrt{\Omega}} \right] e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1} \\ &\times \left[ \frac{e^{i\mathbf{k}_{1i}\cdot\mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} + \sum_{\mathbf{Q}} g(\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{Q}, 0^+) \frac{e^{i(\mathbf{k}_{1i}+\mathbf{Q})\cdot\mathbf{r}_1}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\tilde{V}_{\mathbf{Q}}}{\sqrt{\Omega}} \right] d\mathbf{r}_1, \end{aligned} \quad (3.20)$$

donde, si distribuimos, el producto de ondas planas corresponde a excitaciones binarias y, reteniendo términos hasta primer orden en  $\tilde{V}_{\mathbf{Q}}$  (compatible con las aproximaciones realizadas en las Ecs. (3.13)), las transiciones que involucran plasmones corresponden a los productos cruzados. Entonces, usando que  $g^*(\mathbf{k}, \mathbf{q}, -0^+) = g(\mathbf{k}, \mathbf{q}, 0^+)$ , realizando en el primer corchete el cambio de variables  $\mathbf{Q}' \rightarrow -\mathbf{Q}$  y usando que la energía potencial es real y, por lo tanto,  $\tilde{V}_{-\mathbf{Q}}^* = \tilde{V}_{\mathbf{Q}}$ , podemos integrar para obtener

$$\langle \xi_{\mathbf{k}_{1f}}^- | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1} | \xi_{\mathbf{k}_{1i}}^+ \rangle \approx \sum_{\mathbf{Q}} \frac{\tilde{V}_{\mathbf{Q}}}{\sqrt{\Omega}} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{1f} + \mathbf{k}_{1i} + \mathbf{Q}) [g(\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{Q}, 0^+) + g(\mathbf{k}_{1f}, -\mathbf{Q}, 0^+)], \quad (3.21)$$

y la Ec. (3.12) queda

$$T_{if} = \frac{\tilde{V}_{P_1}^{eff}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{\tilde{V}_{\mathbf{Q}}}{\sqrt{\Omega}} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{1f} + \mathbf{k}_{1i} + \mathbf{Q}) [g(\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{Q}, 0^+) + g(\mathbf{k}_{1f}, -\mathbf{Q}, 0^+)]. \quad (3.22)$$

La expresión (3.22) presenta polos siempre que  $|\mathbf{k}_{1i}| = |\mathbf{k}_{1i} + \mathbf{Q}|$  o  $|\mathbf{k}_{1f}| = |\mathbf{k}_{1f} - \mathbf{Q}|$ . Esto ocurre cuando  $\mathbf{k}_{1i}$  o  $\mathbf{k}_{1f}$  se encuentran en el plano de Bragg determinado por  $\mathbf{Q}$  [106, 110]. En esta situación tenemos dos niveles degenerados y la matriz de transición diverge. Esta divergencia es resuelta por el potencial periódico que levanta la degeneración. Es, por lo tanto, apropiado hacer la siguiente corrección en la función  $g$ :  $g(\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{Q}, 0^+) \rightarrow g(\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{Q}, |\tilde{V}_{\mathbf{Q}}|/\sqrt{\Omega})$  [84, 106].

### 3.2.3. La probabilidad por unidad de tiempo

Consideremos una dada transición  $\mathbf{k}_{1i} \rightarrow \mathbf{k}_{1f}$  de  $e_1$ , inducida por el pasaje de un proyectil con velocidad  $\mathbf{v}_i$  que cede momento  $\mathbf{p}$ . De acuerdo a la Ec. (D.23), la

probabilidad por unidad de tiempo de que esta transición ocurra es

$$\frac{dP_t}{d\mathbf{p}d\mathbf{k}_{1i}d\mathbf{k}_{1f}} = 2\pi\delta(E_i - E_f) |T_{if}|^2. \quad (3.23)$$

El factor  $|T_{if}|^2$ , parece tener una estructura complicada, al ser cuadrado de una suma. Sin embargo, las combinaciones de deltas de Dirac producen mucha cancelación y finalmente vale que

$$\begin{aligned} |T_{if}|^2 &= \frac{|\tilde{V}_{P1}^{eff}(\mathbf{p})|^2}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{|\tilde{V}_{\mathbf{Q}}|^2}{\Omega} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{1f} + \mathbf{k}_{1i} + \mathbf{Q}) \\ &\times \left| g(\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{Q}, |\tilde{V}_{\mathbf{Q}}|/\sqrt{\Omega}) + g(\mathbf{k}_{1f}, -\mathbf{Q}, |\tilde{V}_{\mathbf{Q}}|/\sqrt{\Omega}) \right|^2. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Por otro lado, la conservación de la energía indica

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{\mathbf{k}_{1f}^2}{2} - \frac{\mathbf{k}_{1i}^2}{2} = \frac{\mathbf{K}_i^2}{2M_P} - \frac{\mathbf{K}_f^2}{2M_P} = \frac{\mathbf{K}_i^2}{2M_P} - \frac{(\mathbf{K}_i - \mathbf{p})^2}{2M_P} = \frac{\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{p}}{M_P} - \frac{p^2}{2M_P}, \\ &= \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p} - \frac{p^2}{2M_P} \approx \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

donde usamos que  $M_P \gg 1$ . De esta ecuación, obtenemos que  $\delta(E_i - E_f) = \delta(\omega - \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p})$ , y entonces, de la Ec. (3.23) resulta

$$\begin{aligned} P_t &= 2\pi \int 2 \delta(\omega - \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p}) |T_{if}|^2 \Theta(k_F - k_{1i}) \Theta(k_{1f} - k_F) \\ &\times \left[ 1 - \Theta(\omega^+(p) - \omega(p)) \Theta(\omega(p) - \omega^-(p)) \right] d\mathbf{p} d\mathbf{k}_{1i} d\mathbf{k}_{1f}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

donde agregamos un factor 2 por consideraciones de spin, las funciones escalón  $\Theta(k_F - k_{1i})$  y  $\Theta(k_{1f} - k_F)$  dado que inicialmente el gas de electrones está en su estado fundamental (y  $e_1$  es un electrón del gas), y  $e_1$  debe ser excitado a un estado permitido (no ocupado) y, por último, el factor entre corchetes para excluir contribuciones binarias. En relación con este factor, las funciones  $\omega^\pm(p)$  están definidas en la Ec. (2.16).

Para terminar, en el Cap. 2, definimos junto con la probabilidad, la potencia de frenamiento  $S_t$ , relacionada con la energía que el proyectil cede al gas de electrones. Este es un nombre apropiado si estudiamos el sólido en tanto ente que le quita energía al proyectil, ‘frenándolo’. En nuestro caso, sin embargo, estamos interesados, en el ‘después’ del proyectil, en el gas capaz de excitar electrones, tanto por interacción

directa con el proyectil como por decaimiento de los plasmones excitados por el mismo. Desde este punto de vista, definiremos, a partir de la expresión (3.26), la *potencia de excitación*  $X_t$  como sigue:

$$X_t = 2\pi \int 2 \delta(\omega - \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p}) \omega |T_{if}|^2 \Theta(k_F - k_{1i}) \Theta(k_{1f} - k_F) \\ \times \left[ 1 - \Theta(\omega^+(p) - \omega(p)) \Theta(\omega(p) - \omega^-(p)) \right] d\mathbf{p} d\mathbf{k}_{1i} d\mathbf{k}_{1f}. \quad (3.27)$$

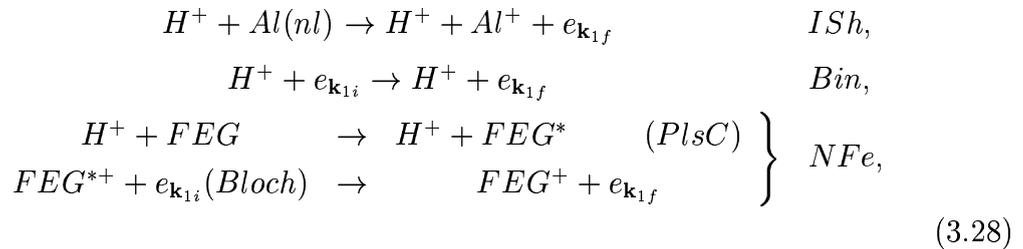
La misma resulta numéricamente igual a la potencia de frenamiento ya que ambas se refieren a la energía  $\omega$  que pierde el proyectil y absorbe (en forma directa o vía un plasmón)  $e_1$ .

### 3.3. Resultados

#### 3.3.1. Consideraciones generales

Un proyectil cargado que viaja en el interior de un metal puede generar diversas excitaciones. En la sección anterior obtuvimos una expresión para la probabilidad de que el proyectil excite un electrón de Bloch vía la excitación y decaimiento de un plasmón. Denotaremos este proceso con la sigla *NFe* (nearly free electron). Otros procesos que involucran al proyectil y a un electrón del metal son la excitación binaria (creación de un par electrón-hueco) y la ionización de un electrón de las capas internas, que notaremos, respectivamente, como *Bin* e *ISh* (inner shell).

Para el caso considerado en este capítulo de colisiones protón-Al policristalino, tenemos, esquemáticamente



donde a la primera parte del proceso *NFe*, correspondiente a la excitación de un plasmón, la notaremos *PlsC*.

En esta sección pretendemos:

- Estimar la efectividad del proceso  $NFe$  como mecanismo de decaimiento de plasmones. Para esto queremos comparar nuestros resultados de probabilidad y potencia de frenamiento para este proceso, con los que se obtienen a partir de la Ec. (2.9) restringida de modo que incluya solamente excitaciones de plasmones ( $PlsC$ ).
- Intentar distinguir un electrón que fue excitado por un proceso  $NFe$ , de uno que fue excitado en forma directa por el proyectil ( $Bin$  o  $Ish$ , sin plasmón intermediario), mediante el estudio de espectros angulares y de energía.

En los cálculos se utilizó que el momento de Fermi del Al es  $k_F = 0.909$  u.a. [106], y que un plasmón de momento nulo tiene energía  $\omega_P = 0.565$  u.a., ( $\omega_P^2 = 4k_F^3/(3\pi)$ ) y ancho de la línea de plasmón  $\gamma = 0.037$  u.a. [101, 107].

Para los coeficientes de Fourier de la interacción electrón-red  $|\tilde{V}_{\mathbf{Q}}|$ , se utilizaron los resultados obtenidos por Animalu *et al.* [92, 94], citados y utilizados por Rösler *et al.* [82–88]. Los mismos se obtienen a partir de un potencial modelo, explicado brevemente en el apéndice G. En relación con los vectores  $\mathbf{Q}$ , recordemos que están asociados a puntos de la red recíproca y que representan las contribuciones de la red de iones al balance de momentos. El mínimo valor de  $\mathbf{Q}$  corresponderá entonces a la distancia entre primeros vecinos de la red recíproca, el segundo menor valor de  $\mathbf{Q}$  a segundos vecinos, etc. En el caso del aluminio (Red recíproca BCC, ver apéndice F), los pares  $(\mathbf{Q}, |\tilde{V}_{\mathbf{Q}}|/\sqrt{\Omega})$  son

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{Q}_1| &= 1.425 \text{ u.a. (ocho vecinos)}, & |\tilde{V}_{\mathbf{Q}_1}|/\sqrt{\Omega} &= 0.0089 \text{ u.a.}, \\
 |\mathbf{Q}_2| &= 1.645 \text{ u.a. (seis vecinos)}, & |\tilde{V}_{\mathbf{Q}_2}|/\sqrt{\Omega} &= 0.0281 \text{ u.a.}, \\
 |\mathbf{Q}_3| &= 2.327 \text{ u.a. (doce vecinos)}, & |\tilde{V}_{\mathbf{Q}_3}|/\sqrt{\Omega} &= 0.0271 \text{ u.a.}, \quad (3.29)
 \end{aligned}$$

donde los factores  $\sqrt{\Omega}$  se agregan para ajustar diferentes definiciones de transformada entre la tabla presentada por Harrison [94] y esta tesis.

La estructura policristalina fue conseguida considerando los dos ángulos de Euler que describen la orientación relativa entre la velocidad del proyectil y la red como variables aleatorias con distribución uniforme. Técnicas numéricas basadas en el método MonteCarlo fueron utilizadas para integrar las probabilidades diferenciales  $dP_i/(d\mathbf{p}d\mathbf{k}_{1i}d\mathbf{k}_{1f})$ .

En todas las figuras a continuación utilizamos los siguientes acrónimos

- PlsC*  $\longleftrightarrow$  Excitación de un plasmón en el FEG, por el proyectil  
*NFe*  $\longleftrightarrow$  Excitación de un electrón de Bloch (nearly free electron)  
 por el proyectil, vía la excitación y decaimiento de un plasmón  
*Bin*  $\longleftrightarrow$  Excitación binaria de un electrón libre (creación de par  
 electrón-hueco) por el proyectil (sin plasmón intermediario)  
*ISh*  $\longleftrightarrow$  Excitación de un electrón de la capa interna (1s, 2s o 2p)  
 por el proyectil. Calculos realizados con la CDW-EIS (ondas  
 distorsionadas en los canales inicial y final) [111,112]

### 3.3.2. Probabilidad total y potencia de excitación

En la Fig. 3.1, mostramos  $dP_t^{NFe}$  y  $dX_t^{NFe}$  (ie. la probabilidad por unidad de tiempo y la potencia de excitación para un proceso *NFe*), como función de la velocidad del proyectil  $v_i$ . Se grafican, además, los respectivos resultados para excitación de plasmones ( $dP_t^{PlsC}$  y  $dS_t^{PlsC}$ ), excitación binaria (Bin) e ionización de electrones de las capas internas (ISh) [111].

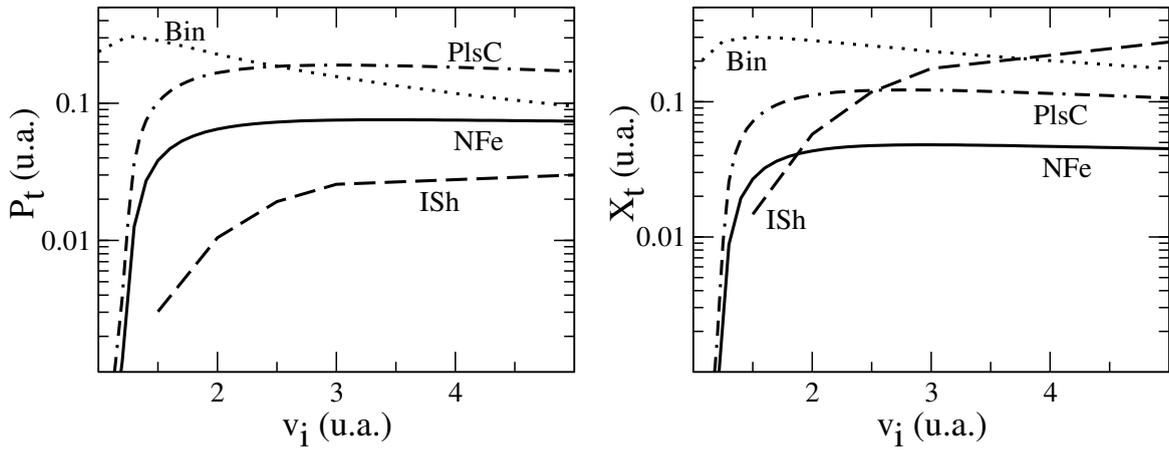


Figura 3.1: Probabilidad por unidad de tiempo y potencia de excitación como funciones de la velocidad inicial del proyectil para los tres procesos considerados.

Los resultados que obtenemos para  $dP_t^{NFe}$  y  $dX_t^{NFe}$  son del orden de la probabilidad

de excitación de plasmones  $dP_t^{PlsC}$  y la potencia de frenamiento  $dS_t^{PlsC}$ , y reproducen razonablemente la forma de la curva de excitación.

Es importante discutir la sensibilidad de las curvas obtenidas ante modificaciones de los parámetros utilizados, a saber las contribuciones de momento de la red consideradas (vecinos de la red recíproca), los coeficientes del potencial modelo  $\tilde{V}_{\mathbf{Q}}$ , y el ancho de la línea de plasmón para momento nulo,  $\gamma$ .

En relación con el potencial modelo, calculamos la contribución de los cuartos vecinos en la red recíproca que resultó despreciable. Esto es razonable dado el comportamiento de  $V(Q)$  que presenta oscilaciones de amplitud decreciente (Ver apéndice G). Es esperable, sin embargo, que modificaciones en los vecinos de menor orden generen diferencias más apreciables. Los valores utilizados por nosotros son los mismos que toma Rösler [86] aunque no coinciden exactamente con los que se obtienen del ajuste sobre la tabla de Harrison presentado en el apéndice G.

Por otro lado, hay una fuerte dependencia de los resultados de  $NFe$  con el ancho  $\gamma$ , sobre el que hay poco acuerdo en la literatura. Rösler [86] toma  $\gamma = 0.018$  u.a., y Baragiola [24] usa  $\gamma = 0.074$  u.a. Nosotros seguimos a Arista [101, 107], que obtiene  $\gamma = 0.037$  u.a., a partir de ajustes sobre espectros experimentales con la respuesta de Mermin-Lindhard.

La utilización de esta respuesta dieléctrica es una hipótesis fuerte de nuestro modelo. La misma implica un ancho de la línea de plasmón que depende del momento  $p$  de modo de conservar la cantidad de partículas (*f-sum-rule*), de manera que  $0.037 \text{ u.a.} \leq \gamma(p) \leq \gamma(p_c = 0.67 \text{ u.a.}) \sim 0.075 \text{ u.a.}$

Con todas las consideraciones mencionadas, nuestros resultados dan cuenta, a altas velocidades (donde funciona mejor la primera aproximación de Born), de aproximadamente la mitad de los plasmones excitados pudiendo explicarse parte de la subestimación a la existencia de otros mecanismos de decaimiento.

Volviendo a la Fig. 3.1, se observa en la misma que la velocidad del proyectil debe superar cierta velocidad umbral (threshold)  $v_{th}$  para que sea posible la excitación directa de plasmones. La existencia de este umbral se explica fácilmente. La conservación de la energía, Ec. (3.25), indica que  $\omega = v_i p \cos\theta$  y, por lo tanto,  $\omega \leq v_i p$ . Si graficamos esta función en la relación de dispersión como se muestra en la Fig. 3.2, se observará que los pares de momento y energía  $(p, \omega \leq v_i p)$  que el proyectil puede ceder al gas, se encuentran por debajo de la curva  $\omega = v_i p$ . Encontramos que solamente para

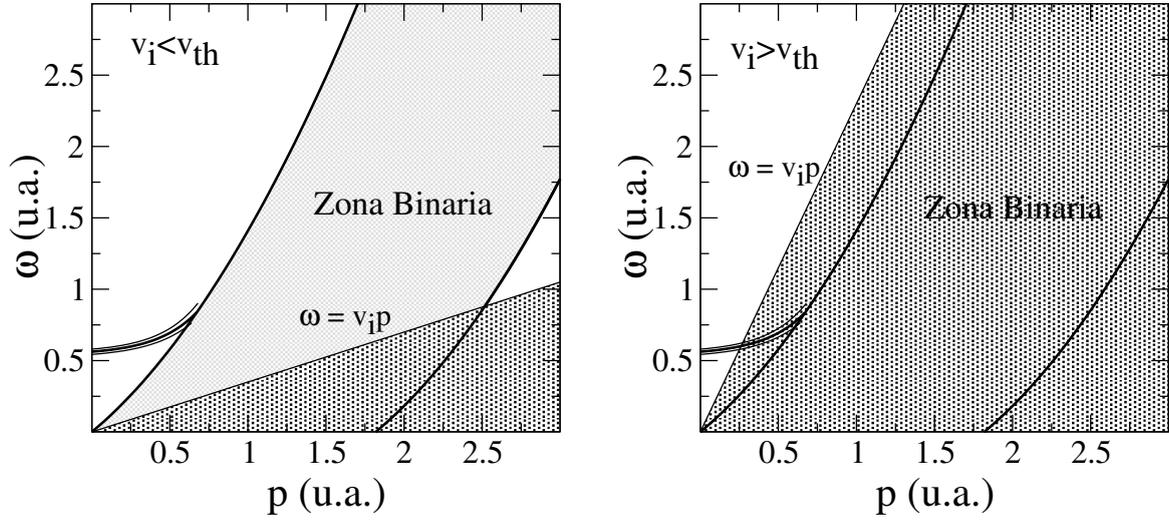


Figura 3.2: Relación de dispersión donde se muestra la existencia de una velocidad umbral para excitación directa de plasmones. La intersección entre la región sombreada por debajo de la recta  $\omega = v_i p$  y el conjunto (línea de plasmones + zona binaria) indica las excitaciones posibles.

$v_i > v_{th}$  hay intersección no nula entre esta región y la que corresponde a excitación de plasmones. Para protones en aluminio tenemos  $v_{th} = 1.24$  u.a. Un proyectil con esta velocidad solamente puede excitar un plasmón con energía  $\omega = \omega_c \sim 0.83$  u.a. y vida media  $[\gamma(q_c) = 0.075 \text{ u.a.}]^{-1}$ . A medida que  $v_i$  aumenta otros plasmones con  $\omega < \omega_c$  y mayores vidas medias (menores valores de  $\gamma$ ) son excitados también y contribuyen a la probabilidad total incrementando por lo tanto  $dP_t^{NFe}$ . Alrededor de  $v_i \sim 3.0$  u.a., encontramos que  $dP_t^{NFe}$  satura aproximadamente.

### 3.3.3. Espectros de primeros diferenciales en ángulo y energía

Nos concentraremos ahora en protones de velocidad  $v_i = 3$  u.a. (225 keV), donde la probabilidad de excitación de un electrón de Bloch por decaimiento de plasmones alcanza su máximo. Esperamos que el espectro de decaimiento no varíe mucho para velocidades mayores.

La primeras diferenciales en la energía final del electrón  $dP_t/d\varepsilon_{1f}$ , se muestran en la Fig. 3.3. Para obtener estos resultados se consideró  $\varepsilon_{1f} = k_f^2/2$ , consistentemente con aproximaciones previas. En la Fig. 3.3 a se discriminan las contribuciones de momento

de la red, debidas a los primeros, segundos y terceros vecinos en la red recíproca. En el rango de energías considerado, la contribución de  $Q_1$  es despreciable y el perfil de la curva total está determinado principalmente por  $Q_2$  y  $Q_3$ , siendo esta última contribución importante solamente para energías medias y altas.

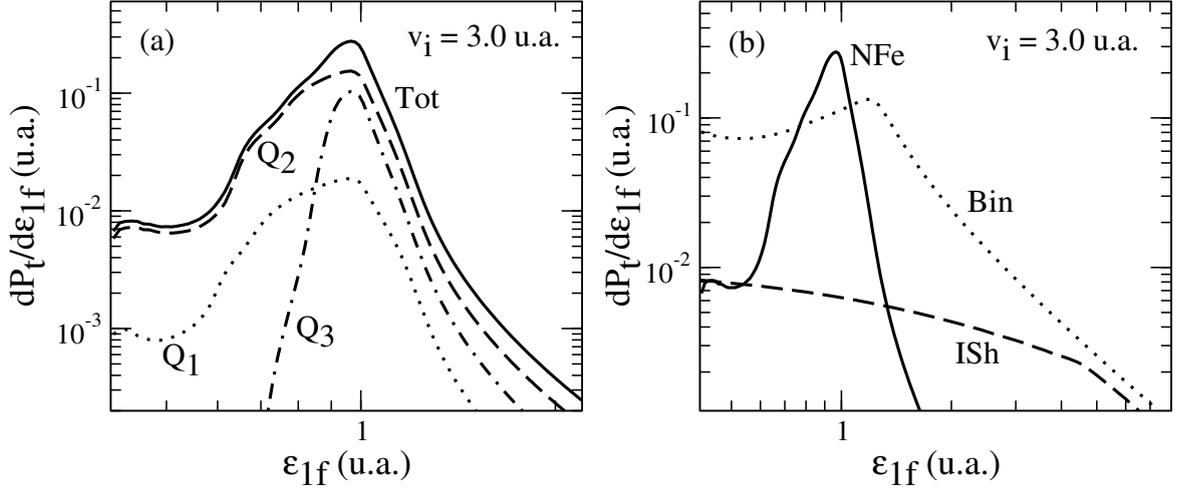


Figura 3.3: Primeros diferenciales en energía para un electrón excitado al continuo en función de su energía final, medida desde el fondo de la banda. a) Contribuciones de distintos valores de  $Q$ . b) Espectros de energía para los tres procesos considerados.

La probabilidad de un proceso  $NFe$  presenta un claro pico centrado en  $\varepsilon_{1f} \sim 0.97$  u.a. Este valor es razonable si consideramos que la energía inicial del electrón excitado  $\varepsilon_{1i}$  está en el intervalo  $0 < \varepsilon_{1i} < \varepsilon_F \sim 0.41$  u.a. y que la energía del plasmón  $\omega_P$  es  $0.565$  u.a.  $< \omega_P < 0.83$  u.a. Como la energía final del electrón excitado  $\varepsilon_{1f}$  está dada por  $\varepsilon_{1f} = \varepsilon_{1i} + \omega_P$ , encontramos que

$$0.565 \text{ u.a.} < \varepsilon_{1f} < 1.24 \text{ u.a.} \quad (3.30)$$

Esto sugiere que los electrones provienen esencialmente del nivel de Fermi y que los plasmones que observamos son aquellos con mayores vidas medias ya que  $0.41$  u.a.  $+ 0.565$  u.a.  $= 0.97$  u.a. Estos resultados son similares a los obtenidos por Rösler *et al.* [84]. Además, la posición del pico de plasmón en  $\omega_P = 0.56$  u.a., coincide con resultados experimentales en que los plasmones son excitados por proyectiles en colisión rasante con una superficie metálica y decaen provocando la emisión de un electrón [24–31].

En la Fig. 3.3 b se muestran los espectros de energía para los tres procesos considerados que excitan un electrón al continuo, a saber, procesos de decaimiento de plasmones (*NFe*), binarios (*Bin*) y de capa interna (*ISh*). Se observa que en las cercanías del pico de plasmón, hay una contribución importante al espectro de electrones excitados, proveniente de procesos binarios mientras que la contribución de electrones de capa interna es despreciable.

Son interesantes también los resultados para los espectros angulares que se muestran en la Fig. 3.4, donde  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ , y graficamos la probabilidad diferencial  $dP_t/d\Omega_{1f}$  como función de  $\theta_{1f}$ , midiéndose este ángulo respecto del sentido de la velocidad inicial del proyectil.

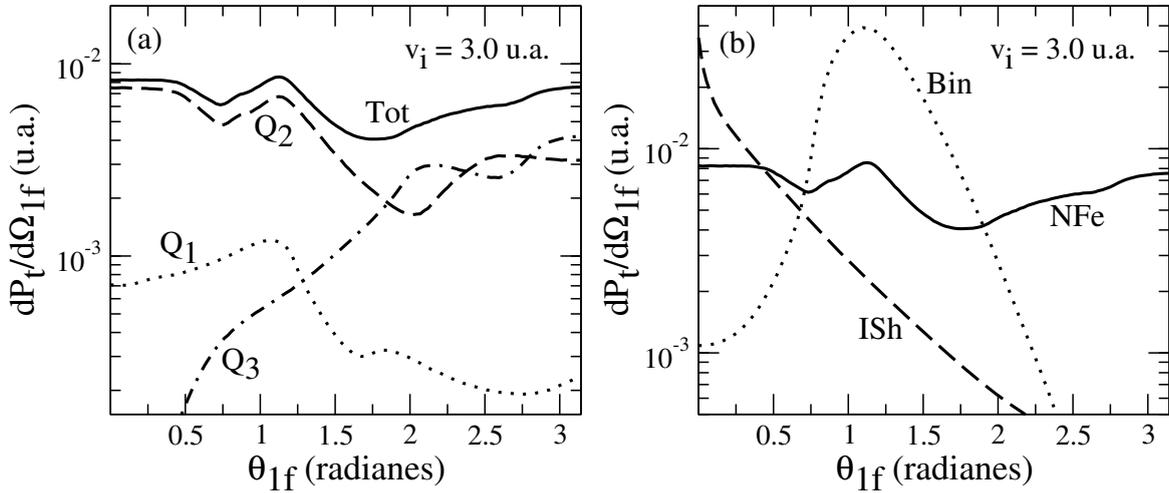


Figura 3.4: Primeros diferenciales en ángulo sólido para un electrón excitado al continuo en función de su dirección  $\theta_{1f}$ , medida respecto del sentido de  $\mathbf{v}_i$ . a) Contribuciones de distintos valores de  $Q$ . b) Espectros angulares para los tres procesos considerados.

Se observa en la Fig. 3.4 a que, para ángulos  $\theta < \pi/2$ , las contribuciones de  $Q_1$  y  $Q_3$  son despreciables y  $Q_2$  es la contribución dominante, determinando la forma de la curva. En cambio, para ángulos  $\theta > \pi/2$ , las contribuciones de  $Q_2$  y  $Q_3$  son comparables, resultando aquí también despreciable la contribución de  $Q_1$ .

En la Fig. 3.4 b, se muestran las probabilidades diferenciales angulares para los tres tipos de excitaciones,  $dP_t^{NFe}$ ,  $dP_t^{Bin}$  y  $dP_t^{ISh}$ . Mientras los procesos *ISh* se concentran principalmente en la dirección paralela a la velocidad del proyectil y los procesos *Bin* lo hacen en la dirección perpendicular a la misma,  $dP_t^{NFe}$  presenta una simetría

relativamente esférica y por lo tanto resulta ser la contribución más importante en la dirección antiparalela a la velocidad del proyectil donde las contribuciones de  $\mathbf{Q}_2$  y  $\mathbf{Q}_3$  son del mismo orden.

### 3.3.4. Espectros de segundos diferenciales en ángulo y energía

A partir de los resultados de primeros diferenciales mostrados en las Figs. 3.3 y 3.4, es interesante plantearse lo siguiente: supongamos que ‘detectamos’ un electrón con energía  $\varepsilon_{1f} \sim 1.0$  u.a. Sabemos que para esa energía, son comparables las contribuciones NFe y Bin. ¿ Hay alguna forma de saber cuál de los dos mecanismos generó la excitación? Intentando responder este tipo de preguntas, obtuvimos espectros de energía para direcciones  $\theta_{1f}$  específicas y espectros angulares para valores particulares de la energía final electrónica  $\varepsilon_{1f}$ .

La Fig. 3.5 muestra los espectros de energía final electrónica para tres ángulos fijos. En los gráficos de  $\mathbf{Q}$  discriminados (Figs. a, c y e) se observa que  $\mathbf{Q}_2$  y  $\mathbf{Q}_3$  constituyen las contribuciones principales excepto en la cola de muy baja energía. En la dirección opuesta a la de la velocidad  $v_i$  (Fig. e) encontramos que la contribución de  $\mathbf{Q}_3$  se torna dominante a altas energías mientras que  $\mathbf{Q}_2$  domina en la región media y  $\mathbf{Q}_1$  lo hace a muy bajas energías. Notemos que dos picos de plasmones pueden ser reconocidos aquí. El primero es un pico de  $\mathbf{Q}_2$  y el segundo lo es de  $\mathbf{Q}_3$ . En las Figs. b, d y f, las contribuciones totales de decaimiento de plasmones se grafican junto con las contribuciones binaria y de capa interna. Observamos que, en las direcciones paralela y perpendicular a  $v_i$ , los procesos de capa interna y binarios son dominantes (respectivamente) dejando al decaimiento de plasmones como el mecanismo más importante de excitación de electrones en la dirección antiparalela a  $v_i$ . Es interesante volver a la Fig. 3.4 a la luz de estos resultados. Para ángulos  $\theta_{1f}$  pequeños, la contribución de capa interna es más de tres veces mayor que la de decaimiento de plasmones, sin embargo, los electrones de uno y otro proceso no tienen la misma energía característica. De acuerdo a la Fig. 3.5, los electrones excitados por plasmones se concentran alrededor de  $\varepsilon_{1f} \sim 0.97$  u.a. donde la contribución de capa interna es un orden menor que la correspondiente al proceso NFe. Por otro lado, en la Fig. 3.4, la dirección normal está dominada por los electrones binarios. Si miramos el espectro de energía para esta dirección (Figs. 3.5 c)-d)), vemos que, en la región energética de mayor concentración de electrones exci-

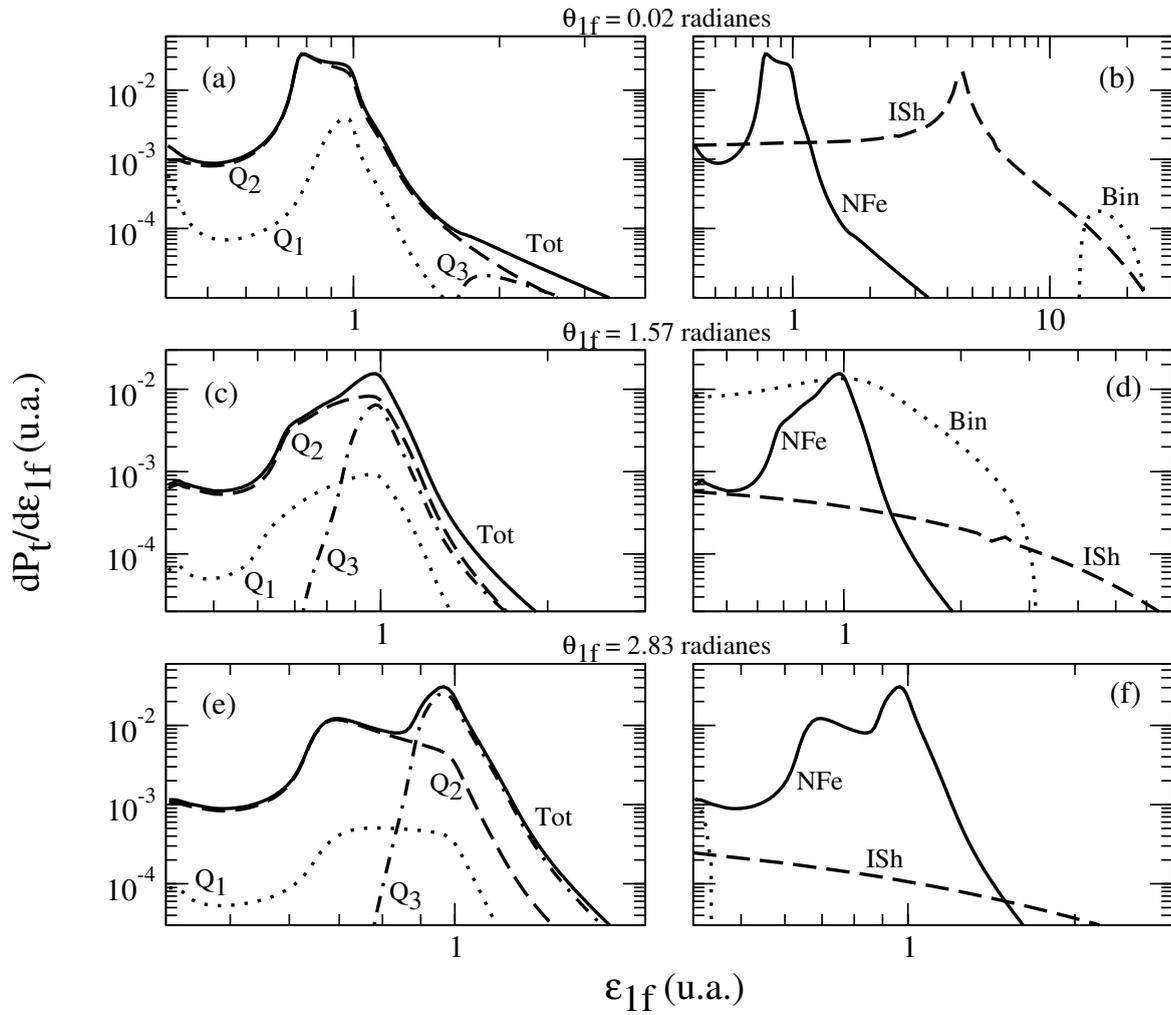


Figura 3.5: Segundos diferenciales en energía para un electrón excitado al continuo en función de su energía final  $\varepsilon_{1f}$ , medida respecto del fondo de banda. Mostramos los espectros para tres direcciones de salida:  $\theta_{1f} = 0.02$  rad,  $\theta_{1f} = 1.57$  rad y  $\theta_{1f} = 2.83$  rad radianes. a)-c)-e) Contribuciones de distintos valores de  $Q$ . b)-d)-f) Espectros de energía para los tres procesos considerados.

tados por plasmones, hay una contribución equivalente de electrones *Bin* por lo que, en este caso, no es posible saber cual fue el proceso responsable de la excitación.

Es importante destacar, que el transporte de los electrones hasta la superficie y su posterior emisión a través de la barrera de potencial superficial modificará las distribuciones de energía y momento. Los espectros angulares y de energía de electrones emitidos, que pueden ser comparados con datos experimentales, no serán los mismos que los aquí considerados. Notemos, además, que la contribución de  $\mathbf{Q}_1$  no podría ser detectada ya que los otros dos procesos son mucho más importantes en la región de baja energía como se observa en la Fig. 3.5 f. Por otro lado, las contribuciones de  $\mathbf{Q}_2$  y  $\mathbf{Q}_3$  pueden ser claramente separadas. Esta puede ser una región interesante para estudiar la influencia de la red.

En la Fig. 3.6 se muestran espectros angulares como función del ángulo  $\theta_{1f}$  (orientación del momento final del electrón respecto de  $v_i$ ) para dos valores de la energía final del electrón. Estos valores son  $\varepsilon_{1f} = 0.5$  u.a.  $\gtrsim \varepsilon_{\min}$  (dado por la Ec. (3.30)) y  $\varepsilon_{1f} = 1.0$  u.a. (alrededor de la posición del pico de decaimiento de plasmones). En ambos casos, Figs. 3.6 b)-d), se observa que  $dP_t^{ISh}$  da la contribución mayor en la dirección paralela a  $v_i$  y  $dP_t^{Bin}$  está concentrada en la dirección perpendicular donde domina el espectro. Por lo tanto, como  $dP_t^{NFe}$  muestra una distribución esencialmente uniforme, resulta dominante en la dirección antiparalela. Comparando con la Fig. 3.3, vemos que para bajas energías, los electrones *Bin* son muchos más que los *NFe* y los *ISh*, estos últimos comparables entre sí. Sin embargo podemos estar seguros de detectar un electrón *NFe* si  $\theta_{1f} \sim \pi$  donde las otras contribuciones son despreciables (Fig. 3.6b)). De igual manera, en energías  $\varepsilon_{1f} \sim 0.97$  u.a., hay tanto electrones *Bin* como *NFe*. Sin embargo, fuera de la dirección normal (Fig. 3.6 d)), hay una clara predominancia de este último.

Para ambas energías el decaimiento de plasmones constituye la contribución principal en dirección antiparalela. Observemos además, que para  $\varepsilon_{1f} = 0.5$  u.a., *NFe* está determinado mayormente por  $\mathbf{Q}_2$  (Fig.(3.6 a)) mientras que para  $\varepsilon_{1f} = 1.0$  u.a.,  $\mathbf{Q}_3$  determina *NFe* en la dirección antiparalela.

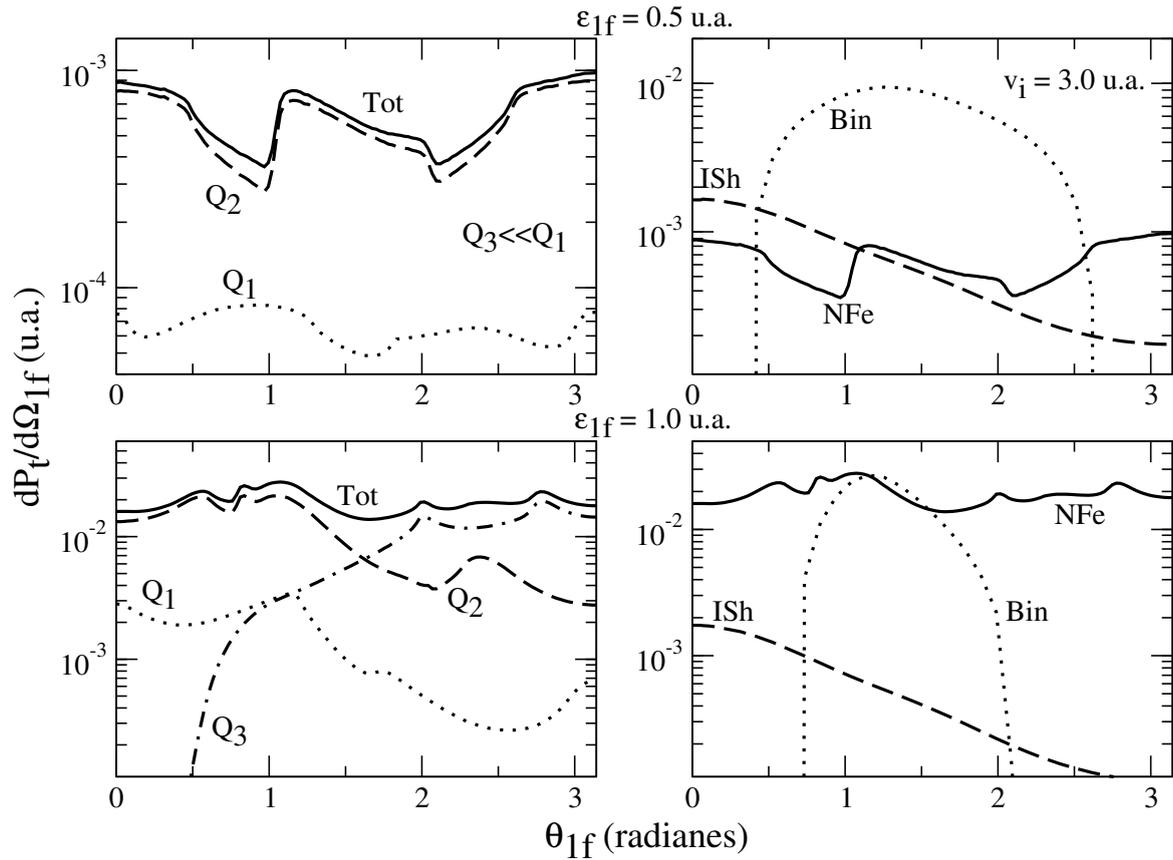


Figura 3.6: Segundos diferenciales angulares para un electr3n excitado al continuo en funci3n de su direcci3n final de movimiento  $\theta_{1f}$ , medida respecto de  $\mathbf{v}_i$ . Mostramos los espectros para dos valores de  $\epsilon_{1f}$ :  $\epsilon_{1f} = 0.5$  u.a. y  $\epsilon_{1f} = 1.0$  u.a. a)-c) Contribuciones de distintos valores de  $Q$ . b)-d) Espectros angulares para los tres procesos considerados.



# Capítulo 4

## Decaimiento de plasmones por excitación de dos electrones interactuantes en colisiones protón-aluminio

### 4.1. Hipótesis de trabajo

Consideremos un sólido formado por un gas de electrones sumergido en el potencial periódico de un arreglo de iones. En el capítulo previo, observamos que un plasmón excitado en el gas por el pasaje de un proyectil cargado, puede decaer excitando un electrón que realiza una transición interbanda. Mencionamos también, que puede lograrse una buena descripción de las excitaciones intrabanda del gas de electrones, reemplazando la red iónica por un fondo uniforme de carga positiva. En este modelo simplificado, encontramos un nuevo mecanismo de decaimiento de plasmones ya que aunque no es posible que un electrón libre absorba la energía y momento de un plasmón, sí puede ocurrir que el plasmón decaiga excitando dos electrones interactuantes.

Es importante aclarar a qué nos referimos con ‘dos electrones interactuantes’. En principio, en el modelo de Hartree+*jellium*, las interacciones entre electrones se compensan exactamente con las interacciones fondo-fondo y las electrón-fondo. De ahí que, por brevedad, llamemos a éste, modelo del *FEG*. Sin embargo, el pasaje del proyectil

perturba este sistema induciendo interacciones entre los electrones que ya no son compensadas por el fondo. Es a dos electrones que interactúan de este modo, a quienes puede excitar un plasmón, dos electrones cuya función de onda no es simplemente un producto de ondas planas.

En este capítulo, trabajaremos con las siguientes hipótesis, análogas a las utilizadas en el capítulo previo:

- Consideraremos como electrones interactuantes (en el sentido recién explicado) solamente a los dos electrones que de hecho serán excitados por el plasmón. El resto seguirá siendo modelado como un *FEG*.
- La interacción entre los electrones etiquetados  $e_1$  y  $e_2$  será tratada perturbativamente.
- Usaremos la función dieléctrica de Mermin-Lindhard para modelar la respuesta del gas de electrones al pasaje del proyectil.
- Trabajaremos en un formalismo independiente del tiempo, suponiendo una sucesión constante de proyectiles en el *FEG* (régimen estacionario).

Nuestro sistema de trabajo será entonces el conjunto  $P + FEG + e_1 + e_2$ . Consideraremos colisiones protón-aluminio para estudiar el par de procesos por el cual un protón excita un plasmón en el *FEG* y este plasmón decae transfiriendo su momento y energía a  $e_1$  y  $e_2$ . Esquemáticamente:

$$\begin{aligned} Z_{P_{\mathbf{k}_i}} + FEG &\rightarrow Z_{P_{\mathbf{k}_f}} + FEG^*, \\ FEG^{*++} + e_{\mathbf{k}_{1i}} + e_{\mathbf{k}_{2i}} &\rightarrow FEG^{++} + e_{\mathbf{k}_{1f}} + e_{\mathbf{k}_{2f}}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

donde  $Z_{P_{\mathbf{k}_{i,f}}}$ ,  $e_{\mathbf{k}_{1i,f}}$  y  $e_{\mathbf{k}_{2i,f}}$  son los estados inicial (final) del proyectil,  $e_1$  y  $e_2$ , respectivamente y  $FEG^*$  representa la excitación de un plasmón en el *FEG*.

## 4.2. Teoría

### 4.2.1. El Hamiltoniano y la matriz de transición

El hamiltoniano completo para el sistema  $P + FEG + e_1 + e_2$  puede escribirse como  $H = H_0 + V^{tot}$ , donde, como en el Cap. 3,  $V^{tot}$  incluye tanto las interacciones del

proyectil con los electrones, como las interacciones entre electrones inducidas por el proyectil. Es decir:

$$\begin{aligned}
H_0 &= -\frac{1}{2M_P}\nabla_{\mathbf{R}}^2 + H_{12} - \frac{1}{2}\sum_{j\geq 3}\nabla_{\mathbf{r}_j}^2 \\
&= -\frac{1}{2M_P}\nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_2}^2 + V_{12}^{eff} - \frac{1}{2}\sum_{j\geq 3}\nabla_{\mathbf{r}_j}^2, \\
V^{tot} &= V^{(P)} + V^{(e)}, \\
&= \sum_{j\geq 3}V_{Pj} + V_{P1} + V_{P2} + \sum_{j\geq 3}V_j^{(e)} + V_1^{(e)} + V_2^{(e)}, \tag{4.2}
\end{aligned}$$

donde  $H_{12}$  es el hamiltoniano no perturbado del par electrónico,  $V_{P\alpha} = -Z_P/|\mathbf{R} - \mathbf{r}_\alpha|$  es la atracción coulombiana entre el proyectil y el electrón  $\alpha$  (con  $\alpha = 1, 2, j$ ),  $V_{1(2)}^{(e)} = \sum_{j\geq 3}(1/|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{1(2)}|)$  es la interacción del electrón 1 o 2 con los electrones del *FEG*,  $V_j^{(e)} = \frac{1}{2}\sum'_{l\geq 3}V_{lj} = \frac{1}{2}\sum'_{l\geq 3}(1/|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_j|)$  es la repulsión coulombiana entre electrones para el electrón  $j$  debida a su interacción con el resto del *FEG*, las coordenadas  $\mathbf{R}$  y  $\mathbf{r}_\alpha$  representan las posiciones del proyectil y el electrón  $\alpha$ , respectivamente, la suma primada implica  $l \neq j$  y  $V_{12}^{eff}$  es la energía potencial debida a la interacción entre  $e_1$  y  $e_2$  en presencia del *FEG* que modelaremos como una interacción de Yukawa. Es decir

$$V_{12}^{eff}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) = e^2 \frac{e^{-\lambda|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} \quad \rightarrow \quad \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{q}) = e^2 \frac{4\pi}{(2\pi)^{3/2}(q^2 + \lambda^2)}, \tag{4.3}$$

donde  $e^2$  es el producto de las cargas electrónicas ( $e = -1$  en u.a.) y  $\lambda = \sqrt{3}\omega_P/k_F$  es el momento de Thomas-Fermi (cuya inversa da la longitud a partir de la cual el apantallamiento debido al *FEG* es efectivo) con  $\omega_P$  la energía de plasmón y  $k_F$  el momento de Fermi.

En forma análoga a lo realizado en el Cap. 3, planteamos productos de Hartree para ciertos estados orbitales inicial y final:

$$\begin{aligned}
\Psi_i^H &= \Phi_{\mathbf{K}_i} F_{\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{k}_{2i}} \phi_{\mathbf{k}_{3i}} \phi_{\mathbf{k}_{4i}} \dots, \\
\Psi_f^H &= \Phi_{\mathbf{K}_f} F_{\mathbf{k}_{1f}, \mathbf{k}_{2f}} \phi_{\mathbf{k}_{3f}} \phi_{\mathbf{k}_{4f}} \dots, \tag{4.4}
\end{aligned}$$

donde  $\Phi_{\mathbf{K}_{i,f}}$  y  $\phi_{\mathbf{k}_{j,i,f}}$  son, respectivamente, la función de onda del proyectil y la función de onda de un electrón del *FEG*, ambas ondas planas normalizadas a la  $\delta$  de Dirac, y  $F_{\mathbf{k}_{1i(f)}, \mathbf{k}_{2i(f)}}$  es la función de onda combinada de  $e_1$  y  $e_2$  para el estado inicial (final)

que satisface la ecuación de Schrödinger siguiente:

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_2}^2 + V_{12}^{eff} - \varepsilon_{i,f}^{1+2} \right] F_{\mathbf{k}_1(i,f), \mathbf{k}_2(i,f)} = 0, \quad (4.5)$$

donde  $\varepsilon_{i,f}^{1+2}$  es la energía del par de electrones.

El operador de transición  $T$  es

$$T = V^{tot} + V^{tot}G_0^+V^{tot} + V^{tot}G_0^+V^{tot}G_0^+V^{tot} + \dots, \quad (4.6)$$

con  $G_0^+ = [E - H_0 + i0^+]^{-1}$  el operador de Green para partículas libres. La matriz de transición entre ciertos estados inicial y final  $T_{if}$  resulta

$$T_{if} = \langle \Psi_f | V^{tot} + V^{tot}G_0^+V^{tot} + V^{tot}G_0^+V^{tot}G_0^+V^{tot} + \dots | \Psi_i \rangle. \quad (4.7)$$

Pidiendo que el proyectil y el par  $e_1 - e_2$  cambien de estado, el primer término de esta serie resulta equivalente a despreciar los efectos del *FEG*, es decir que tenemos

$$\begin{aligned} T_{if}^{(0)} &= \langle \Psi_f | V_{P1} + V_{P2} | \Psi_i \rangle \\ &= \frac{\tilde{V}_{P1}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \langle F_f | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1} | F_i \rangle + \frac{\tilde{V}_{P2}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \langle F_f | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_2} | F_i \rangle, \end{aligned} \quad (4.8)$$

siendo  $\mathbf{p} = \mathbf{K}_i - \mathbf{K}_f$  el momento entregado por el proyectil al par de electrones.

Si consideramos la suma de todos los términos de la Ec. (4.7), conservando sólo términos a primer orden en la carga del proyectil, y pedimos que el estado final del gas coincida con su estado inicial y fundamental, encontramos, como se muestra en el apéndice E, que

$$T_{if} \approx \frac{\tilde{V}_{P1}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}\epsilon_L(p, \omega)} \langle F_f | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1} | F_i \rangle + \frac{\tilde{V}_{P2}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}\epsilon_L(p, \omega)} \langle F_f | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_2} | F_i \rangle, \quad (4.9)$$

donde, una vez más, reemplazaremos la respuesta dieléctrica de Lindhard  $\epsilon_L$  por la de Mermin-Lindhard  $\epsilon_{ML}$ , dada por la Ec. (2.17), con un ancho de la línea de plasmón  $\gamma = 0.037 u.a.$  tomado de ajustes sobre espectros experimentales [101, 107].

A partir de la ec. (4.9), podemos definir energías potenciales efectivas  $V_{P1}^{eff}$  y  $V_{P2}^{eff}$  tales que

$$\tilde{V}_{P1}^{eff} = \frac{\tilde{V}_{P1}}{\epsilon_{ML}(p, \omega, \gamma)} \quad \tilde{V}_{P2}^{eff} = \frac{\tilde{V}_{P2}}{\epsilon_{ML}(p, \omega, \gamma)}, \quad (4.10)$$

y entonces, el hamiltoniano del sistema  $H = H_0 + V$ , puede reducirse a la forma simplificada:

$$\begin{aligned} H_0 &= -\frac{1}{2M_p}\nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_2}^2 + V_{12}^{eff}, \\ V &= V_{P1}^{eff} + V_{P2}^{eff}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Es decir que pensamos en un sistema compuesto por dos electrones interactuantes (en presencia del *FE*) y un proyectil libre que es perturbado por las interacciones  $P - e$ .

#### 4.2.2. Desarrollo perturbativo para la función de onda del par

$e_1 - e_2$

Las funciones de onda del par  $e_1 - e_2$ ,  $F_{\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{k}_{2i}}$  y  $F_{\mathbf{k}_{1f}, \mathbf{k}_{2f}}$  pueden ser expresadas como ondas planas corregidas por factores  $u_{i,f}$ , esto es

$$\begin{aligned} F_{\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{k}_{2i}} &= \phi_{\mathbf{k}_{1i}}(\mathbf{r}_1)\phi_{\mathbf{k}_{2i}}(\mathbf{r}_2) u_i(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1), \\ F_{\mathbf{k}_{1f}, \mathbf{k}_{2f}} &= \phi_{\mathbf{k}_{1f}}(\mathbf{r}_1)\phi_{\mathbf{k}_{2f}}(\mathbf{r}_2) u_f(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Realizaremos ahora el siguiente cambio de variables sobre el par electrónico:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, & \rho &= \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \\ \mathbf{k} &= \frac{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1}{2}, & \kappa &= \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_1, \end{aligned} \quad (4.13)$$

siendo  $(\rho, \mathbf{r})$  las posiciones del centro de masa y relativa del conjunto  $e_1 - e_2$ , y  $(\kappa, \mathbf{k})$  los momentos correspondientes.

En este sistema de coordenadas, la Ec. (4.5) se expresa

$$\left[ -\nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{1}{4}\nabla_{\rho}^2 + V_{12}^{eff} - \varepsilon_{(i,f)} \right] F_{\kappa_{(i,f)}, \mathbf{k}_{(i,f)}} = 0, \quad (4.14)$$

y las funciones de onda combinadas son

$$\begin{aligned} F_{\kappa_i, \mathbf{k}_i} &= \phi_{\kappa_i}(\rho)\phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}) \equiv \phi_{\kappa_i}(\rho)\psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}), \\ F_{\kappa_f, \mathbf{k}_f} &= \phi_{\kappa_f}(\rho)\phi_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}) u_f(\mathbf{r}) \equiv \phi_{\kappa_f}(\rho)\psi_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Elegimos trabajar con este último sistema de coordenadas ya que facilitará el desarrollo que sigue.

Volvemos a la Ec. (4.9) y reemplazamos  $\tilde{V}_P(\mathbf{p}) = \tilde{V}_{P1}(\mathbf{p}) = \tilde{V}_{P2}(\mathbf{p})$  para obtener

$$T_{if}^H \approx \frac{\tilde{V}_P(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2} \epsilon_{ML}(p, \omega, \gamma)} \langle F_f^- | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_2} | F_i^+ \rangle, \quad (4.16)$$

donde hacemos explícitos los hechos de que estamos trabajando en la aproximación de Hartree (sin efectos de intercambio) y de que vamos a utilizar un desarrollo perturbativo para las funciones de onda del par electrónico. Utilizando la Ec. (4.15) y observando que  $\mathbf{r}_1 = \rho - \mathbf{r}/2$  y que  $\mathbf{r}_2 = \rho + \mathbf{r}/2$ , tenemos que

$$\begin{aligned} T_{if}^H &\approx \frac{\tilde{V}_P(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2} \epsilon_{ML}(p, \omega, \gamma)} \\ &\times \int \int \frac{e^{-i\kappa_f \cdot \rho}}{(2\pi)^{3/2}} \psi_{\mathbf{k}_f}^{-*}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{p}\cdot\rho} [e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/2} + e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/2}] \frac{e^{i\kappa_i \cdot \rho}}{(2\pi)^{3/2}} \psi_{\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r}) d\mathbf{r} d\rho, \end{aligned} \quad (4.17)$$

e integrando en  $\rho$  llegamos a

$$T_{if}^H \approx \frac{\tilde{V}_P^{eff}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \delta(\kappa_i - \kappa_f + \mathbf{p}) \int \psi_{\mathbf{k}_f}^{-*}(\mathbf{r}) [e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/2} + e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/2}] \psi_{\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (4.18)$$

A primer orden perturbativo en  $V_{12}^{eff}$ , la función de onda puede aproximarse por

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r}) &\approx \phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) + \frac{1}{k_i^2 + \nabla_{\mathbf{r}}^2 + i0^+} V_{12}^{eff}(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}), \\ \psi_{\mathbf{k}_f}^-(\mathbf{r}) &\approx \phi_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}) + \frac{1}{k_f^2 + \nabla_{\mathbf{r}}^2 - i0^+} V_{12}^{eff}(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}_f}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4.19)$$

donde  $[k^2 + \nabla_{\mathbf{r}}^2 \pm i0^+]^{-1}$  es la función de Green no perturbada, en la representación  $\{\mathbf{r}\}$ , que corresponde al grado de libertad relativo.

Expresando la energía potencial  $V_{12}^{eff}$  en términos de su transformada de Fourier, tenemos, para el estado inicial

$$\psi_{\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r}) \approx \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} + \frac{1}{k_i^2 + \nabla_{\mathbf{r}}^2 + i0^+} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{q} \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}}, \quad (4.20)$$

y operando,

$$\psi_{\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r}) \approx \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{k}_i, \mathbf{q}, 0^+) \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} d\mathbf{q}, \quad (4.21)$$

con  $g(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \beta) = [k^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 + i\beta]^{-1}$ , muy similar a la definida en la Ec. (3.18). Haciendo uso de transformadas de Fourier en el primer término llegamos a

$$\psi_{\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \left[ \delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{q}) + g(\mathbf{k}_i, \mathbf{q}, 0^+) \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{q}) \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} \right] e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{q}. \quad (4.22)$$

Análogamente, para el estado final tenemos

$$\psi_{\mathbf{k}_f}^-(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \left[ \delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{q}') + g(\mathbf{k}_f, \mathbf{q}', -0^+) \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{q}') \frac{e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} \right] e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{q}', \quad (4.23)$$

y reemplazando en la Ec. (4.18)

$$\begin{aligned} T_{if}^H &\approx \frac{\tilde{V}_P^{eff}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \delta(\kappa_i - \kappa_f + \mathbf{p}) \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int \int e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}} \\ &\times \left[ \delta^*(\mathbf{k}_f - \mathbf{q}') + g(\mathbf{k}_f, \mathbf{q}', 0^+) \tilde{V}_{12}^{*eff}(\mathbf{q}') \frac{e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} \right] [e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/2} + e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/2}] \\ &\times \left[ \delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{q}) + g(\mathbf{k}_i, \mathbf{q}, 0^+) \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{q}) \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} \right] d\mathbf{q}' d\mathbf{q} d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Si consideramos en esta ecuación, el término de orden cero en  $\tilde{V}_{12}^{eff}$ , encontramos que uno de los electrones no realiza transición alguna por lo que la contribución para decaimiento de plasmones del mismo será nula. La contribución de primer orden en  $\tilde{V}_{12}^{eff}$  está dada por los productos cruzados. Hacemos

$$\begin{aligned} T_{if}^H &\approx \frac{\tilde{V}_P^{eff}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \delta(\kappa_i - \kappa_f + \mathbf{p}) \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int \int e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}} \\ &\times \left[ \delta^*(\mathbf{k}_f - \mathbf{q}') [e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/2} + e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/2}] g(\mathbf{k}_i, \mathbf{q}, 0^+) \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{q}) \frac{e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} \right] + e^{i(\mathbf{q}'-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} \\ &\times \left[ \delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{q}') [e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/2} + e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/2}] g(\mathbf{k}_f, \mathbf{q}, 0^+) \tilde{V}_{12}^{*eff}(\mathbf{q}') \frac{e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} \right] d\mathbf{q}' d\mathbf{q} d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (4.25)$$

donde en el segundo término invertimos las variables  $\mathbf{q} \leftrightarrow \mathbf{q}'$ . Resolvemos ahora estas

integrales, para encontrar

$$\begin{aligned}
T_{if}^H \approx & \frac{\tilde{V}_P^{eff}(\mathbf{p})}{(2\pi)^3} \delta(\kappa_i - \kappa_f + \mathbf{p}) \left[ g(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i + \mathbf{p}/2, 0^+) \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i + \mathbf{p}/2) \right. \\
& + g(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f - \mathbf{p}/2 - \mathbf{k}_i, 0^+) \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{k}_f - \mathbf{p}/2 - \mathbf{k}_i) \\
& + g(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i - \mathbf{p}/2 - \mathbf{k}_f, 0^+) \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{k}_i - \mathbf{p}/2 - \mathbf{k}_f) \\
& \left. + g(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i + \mathbf{p}/2 - \mathbf{k}_f, 0^+) \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{k}_i + \mathbf{p}/2 - \mathbf{k}_f) \right], \tag{4.26}
\end{aligned}$$

donde usamos que el potencial es real por lo que vale que  $\tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{q}) = \tilde{V}_{12}^{*eff}(-\mathbf{q})$ . Dado que, además,  $\tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{q})$  es una función par y que

$$\begin{aligned}
\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i + \frac{\mathbf{p}}{2} &= \frac{\mathbf{k}_{f2} - \mathbf{k}_{f1}}{2} - \frac{\mathbf{k}_{i2} - \mathbf{k}_{i1}}{2} + \frac{\mathbf{k}_{f2} + \mathbf{k}_{f1} - \mathbf{k}_{i2} - \mathbf{k}_{i1}}{2} = \mathbf{k}_{f2} - \mathbf{k}_{i2} \equiv \mathbf{p}_2, \\
\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i - \frac{\mathbf{p}}{2} &= \frac{\mathbf{k}_{f2} - \mathbf{k}_{f1}}{2} - \frac{\mathbf{k}_{i2} - \mathbf{k}_{i1}}{2} - \frac{\mathbf{k}_{f2} + \mathbf{k}_{f1} - \mathbf{k}_{i2} - \mathbf{k}_{i1}}{2} = -\mathbf{k}_{f1} + \mathbf{k}_{i1} \equiv -\mathbf{p}_1, \tag{4.27}
\end{aligned}$$

llegamos al resultado final para la matriz de transición

$$\begin{aligned}
T_{if}^H &= \frac{\tilde{V}_P^{eff}(\mathbf{p})}{(2\pi)^3} \delta(\kappa_i - \kappa_f + \mathbf{p}) \\
&\times \left[ \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{p}_2) \left( g(\mathbf{k}_i, \mathbf{p}_2, 0^+) + g(\mathbf{k}_f, -\mathbf{p}_2, 0^+) \right) \right. \\
&\left. + \tilde{V}_{12}^{eff}(-\mathbf{p}_1) \left( g(\mathbf{k}_i, -\mathbf{p}_1, 0^+) + g(\mathbf{k}_f, \mathbf{p}_1, 0^+) \right) \right]. \tag{4.28}
\end{aligned}$$

### 4.2.3. Correcciones de Hartree-Fock para la función de onda y para la matriz de transición

El hecho de que estamos tratando con partículas idénticas es fácilmente añadido al formalismo previo. Los estados inicial y final para el par de electrones consisten de una parte orbital y otra de spin debiendo ambas tener simetría definida. En particular, la parte orbital de la función de onda combinada debe ser totalmente simétrica ( $F^S$ )

o totalmente antisimétrica ( $F^A$ ). En las coordenadas del centro de masa y relativas definidas en la Ec. (4.13), esto implica que la Ec. (4.15) debe ser reemplazada por

$$\begin{aligned} (F_{\kappa_i, \mathbf{k}_i}^+)^{S/A}(\rho, \mathbf{r}) &= \frac{\phi_{\kappa_i}(\rho)(\psi_{\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r}) \pm \psi_{-\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r}))}{\sqrt{2}}, \\ (F_{\kappa_f, \mathbf{k}_f}^-)^{S/A}(\rho, \mathbf{r}) &= \frac{\phi_{\kappa_f}(\rho)(\psi_{\mathbf{k}_f}^-(\mathbf{r}) \pm \psi_{-\mathbf{k}_f}^-(\mathbf{r}))}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Por otro lado, dado que el hamiltoniano conmuta con los operadores  $S^2$  y  $S_z$ , los cuatro posibles estados de spin son el triplete de estados simétricos  $|s = 1, m = \pm 1, 0\rangle$  y el singlete antisimétrico  $|s = 0, m = 0\rangle$ . Tenemos entonces que la función de onda spin-orbital del par de electrones puede ser

$$|(F_{\kappa, \mathbf{k}}^\pm)^S\rangle |s = 0, m = 0\rangle, \quad \text{o} \quad |(F_{\kappa, \mathbf{k}}^\pm)^A\rangle |s = 1, m = \pm 1, 0\rangle. \quad (4.30)$$

Además, como las interacciones de Coulomb son independientes del spin, el estado de spin para el par de electrones no se modifica. Se sigue de esto que la simetría de la parte orbital debe también permanecer constante.

A partir de esto tenemos que, si consideramos efectos de intercambio para el par de electrones, la Ec. (4.16) se transforma en

$$\begin{aligned} T_{if} &= \langle s_f, m_f | s_i, m_i \rangle \frac{\tilde{V}_P(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2} \epsilon_{ML}(p, \omega, \gamma)} \\ &\times \langle (F_f^-)^{S/A} | e^{i\mathbf{p}\cdot\rho} (e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/2} + e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/2}) | (F_i^+)^{S/A} \rangle, \end{aligned} \quad (4.31)$$

que nos lleva a

$$\begin{aligned} T_{if}(s, m) &= \frac{\tilde{V}_P(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2} \epsilon_{ML}(p, \omega, \gamma)} \delta(\kappa_i - \kappa_f + \mathbf{p}) \\ &\times \int \frac{\psi_{\mathbf{k}_f}^{-*}(\mathbf{r}) \pm \psi_{-\mathbf{k}_f}^{-*}(\mathbf{r})}{\sqrt{2}} [e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/2} + e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/2}] \frac{\psi_{\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r}) \pm \psi_{-\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r})}{\sqrt{2}} d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (4.32)$$

donde las sumas corresponden a  $T_{if}(s = 0, m = 0)$  y las restas a  $T_{if}(s = 1, m = \pm 1, 0)$ , de acuerdo a la Ec. (4.30). Dado que las contribuciones a  $T_{if}$  provenientes de los

productos  $\psi_{\mathbf{k}_f}^{-*}(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r})$  y  $\psi_{-\mathbf{k}_f}^{-*}(\mathbf{r})\psi_{-\mathbf{k}_i}^+(\mathbf{r})$  son iguales entre sí y lo mismo ocurre con las contribuciones cruzadas, la Ec. (4.32) es equivalente a:

$$\begin{aligned}
T_{if}(s, m) = & \frac{\tilde{V}_P^{eff}(\mathbf{p})}{(2\pi)^3} \delta(\kappa_i - \kappa_f + \mathbf{p}) \left[ \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{p}_2) \left( g(\mathbf{k}_i, \mathbf{p}_2, 0^+) + g(\mathbf{k}_f, -\mathbf{p}_2, 0^+) \right) \right. \\
& + \tilde{V}_{12}^{eff}(-\mathbf{p}_1) \left( g(\mathbf{k}_i, -\mathbf{p}_1, 0^+) + g(\mathbf{k}_f, \mathbf{p}_1, 0^+) \right) \\
& \pm \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{k}_{2f} - \mathbf{k}_{1i}) \times \left( g(\mathbf{k}_i, -\mathbf{k}_{2f} + \mathbf{k}_{1i}, 0^+) + g(\mathbf{k}_f, -\mathbf{k}_{2f} + \mathbf{k}_{1i}, 0^+) \right) \\
& \left. \pm \tilde{V}_{12}^{eff}(-\mathbf{k}_{1f} + \mathbf{k}_{2i}) \times \left( g(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_{1f} - \mathbf{k}_{2i}, 0^+) + g(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_{1f} - \mathbf{k}_{2i}, 0^+) \right) \right], \tag{4.33}
\end{aligned}$$

y, nuevamente, las sumas corresponden a  $s = 0$  y las restas a  $s = 1$ .

#### 4.2.4. Probabilidad por unidad de tiempo

Haciendo las mismas consideraciones que en el capítulo anterior en relación con la zona binaria, su definición y el mantener nuestros cálculos fuera de ella para evitar la inclusión de excitaciones de pseudo-plasmones que son reabsorbidos por el *FEG* y no constituyen modos independientes, nos concentramos ahora en llegar a la expresión para la probabilidad.

De acuerdo a la regla de oro de Fermi sabemos que la probabilidad diferencial por unidad de tiempo para un dado estado de spin  $P_t(s, m)$  de que dos electrones sean excitados desde  $(\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{k}_{2i})$  hasta  $(\mathbf{k}_{1f}, \mathbf{k}_{2f})$  por un proyectil que pierde momento  $\mathbf{p}$  y energía  $\omega = \epsilon_{1f} + \epsilon_{2f} - \epsilon_{1i} - \epsilon_{2i}$  vía la excitación y decaimiento de un plasmón está dada por

$$\begin{aligned}
dP_t(s, m) = & 2\pi \delta(\epsilon_{1f} + \epsilon_{2f} - \epsilon_{1i} - \epsilon_{2i} - \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p}) |T_{if}(s, m)|^2 \\
& \times \Theta(k_F - k_{1i}) \Theta(k_F - k_{2i}) \Theta(-k_F + k_{1f}) \Theta(-k_F + k_{2f}) \\
& \times \left[ 1 - \Theta(\omega^+(p) - \omega(p)) \Theta(\omega(p) - \omega^-(p)) \right] d\mathbf{p} d\mathbf{k}_{1i} d\mathbf{k}_{2i} d\mathbf{k}_{1f} d\mathbf{k}_{2f}, \tag{4.34}
\end{aligned}$$

y la probabilidad total por unidad de tiempo es

$$P_t = \sum_{s=0}^1 \sum_{m=-s}^s dP_t(s, m) \quad (4.35)$$

que puede escribirse como

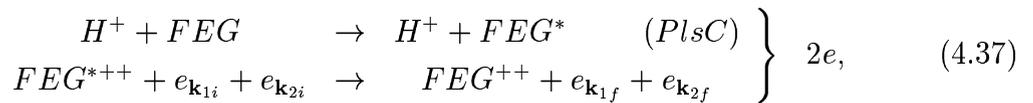
$$\begin{aligned} P_t = & \int 2\pi\delta(\omega - \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p}) (|T_{if}(s=0, m=0)|^2 + 3|T_{if}(s=1, m)|^2) \\ & \times \Theta(k_F - k_{1i})\Theta(k_F - k_{2i})\Theta(-k_F + k_{1f})\Theta(-k_F + k_{2f}) \\ & \times \left[ 1 - \Theta(\omega^+(p) - \omega(p))\Theta(\omega(p) - \omega^-(p)) \right] d\mathbf{p}d\mathbf{k}_{1i}d\mathbf{k}_{2i}d\mathbf{k}_{1f}d\mathbf{k}_{2f}, \end{aligned} \quad (4.36)$$

con  $\omega = \epsilon_{1f} + \epsilon_{2f} - \epsilon_{1i} - \epsilon_{2i}$ . Observemos, para terminar, que los dos electrones considerados son de hecho electrones del *FEG*, que fueron singularizados con la notación. Sus estados iniciales y finales son tales que  $\epsilon_{1i,2i} < \epsilon_F$  y  $\epsilon_{1f,2f} > \epsilon_F$ , es decir que el *FEG* está inicialmente en su estado fundamental.

## 4.3. Resultados

### 4.3.1. Consideraciones generales

Como en el capítulo previo, vamos a estudiar colisiones protón-aluminio. El proceso que nos ocupa puede esquematizarse como sigue:



donde la primera parte corresponde a la excitación del plasmón en el *FEG*.

En esta sección pretendemos:

- Estimar la efectividad del proceso  $2e$  como mecanismo de decaimiento de plasmones y compararlo con *NFe* y *PlsC*.

- Intentar distinguir un electrón excitado por un plasmón ( $2e$  o  $NFe$ ) de uno que fue excitado en forma directa, mediante el estudio de los espectros angulares y de energía.

Los valores de las constantes ( $k_F$  y  $\gamma$ ) se tomaron como en el capítulo precedente. Técnicas numéricas basadas en el método de MonteCarlo fueron utilizadas para integrar las probabilidades diferenciales.

Los siguientes acrónimos serán utilizados a partir de ahora para referirnos a los distintos mecanismos de excitación de un electrón del gas:

$PlsC$	$\longleftrightarrow$	Excitación de un plasmón en el FEG, por el proyectil
$NFe$	$\longleftrightarrow$	Excitación de un electrón de Bloch por el proyectil vía la excitación y decaimiento de un plasmón
$2e$	$\longleftrightarrow$	Excitación de dos electrones libres interactuantes por el proyectil vía la excitación y decaimiento de un plasmón
$Bin$	$\longleftrightarrow$	Excitación binaria de un electrón libre por el proyectil (sin plasmón intermediario)
$ISh$	$\longleftrightarrow$	Excitación de un electrón de la capa interna (1s, 2s o 2p) por el proyectil

### 4.3.2. Probabilidad de transición y potencia de excitación

En la Fig. 4.1, se grafican la probabilidad por unidad de tiempo  $P_t$  y la potencia de excitación  $X_t$ , en función de la velocidad del proyectil  $v_i$  para los mecanismos  $NFe$  y  $2e$ . Se agregan las curvas correspondientes a la suma de ambos y a la probabilidad de excitación de plasmones  $PlsC$ .

Se observa, para la probabilidad, que los dos mecanismos en conjunto dan cuenta, para altas velocidades, de aproximadamente el 65 % de los plasmones excitados. De igual modo, se explica aproximadamente el 70 % de la energía de excitación, encontrándose en ambos casos que la inclusión de los procesos de dos electrones ( $2e$ ) nos permite reproducir correctamente la pendiente de la curva de excitación.

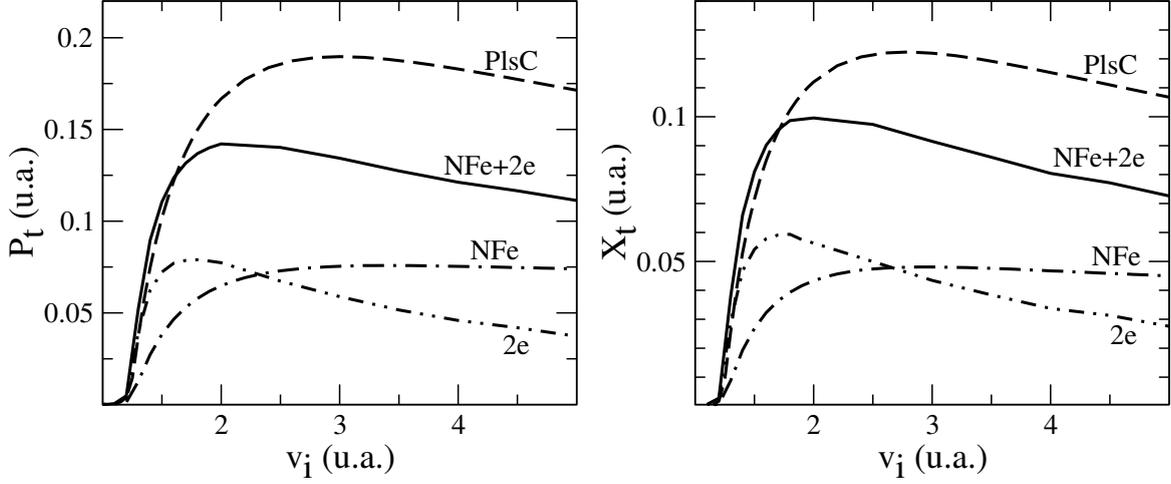


Figura 4.1: Probabilidad por unidad de tiempo y potencia de excitación como funciones de la velocidad inicial del proyectil para los procesos  $NFe$ ,  $2e$  y  $PlsC$ .

En relación con la importancia relativa de los dos mecanismos considerados, podemos decir que  $NFe$  da la contribución dominante a altas velocidades mientras que  $2e$  es el mecanismo principal para velocidades bajas. Si recordamos que para velocidades del proyectil cercanas a la velocidad umbral ( $v_i \gtrsim v_{th}$ ) y de acuerdo a la Fig. 3.2, los plasmones excitados son los de mayor energía y momento no nulo, más cercanos a la zona binaria, podemos inferir de la Fig. 4.1, que estos plasmones decaen preferentemente vía  $2e$ . Este resultado es razonable si volvemos a la Fig. 3.2. Recordemos que la zona binaria indica los pares de energía y momento que puede absorber un electrón libre. Si consideramos el punto ( $p = 0, \omega = \omega_P$ ), está claro que es necesario que alguien provea el momento necesario para que un electrón pueda absorber esa energía. Ese alguien es la red, con una contribución de momento típica dada por  $Q_2 = 1.6$  u.a. En cambio si consideramos un par ( $p, \omega$ ) cercano a la intersección con la zona binaria ( $p_c, \omega_c$ ), el momento y/o la energía requerido/a es mucho menor y puede ser provisto por un segundo electrón. Es ilustrativo en relación con esta discusión, observar la Fig. 4.2, donde se grafican las curvas  $NFe/PlsC$ ,  $2e/PlsC$  y  $(NFe+2e)/PlsC$  en función de  $v_i$ . A pesar de sobre-estimaciones para velocidades muy cercanas a la velocidad umbral, se verifica que, a velocidades bajas, el mecanismo  $2e$  explica prácticamente la totalidad de los plasmones, decayendo su importancia rápidamente con la velocidad. En cuanto al mecanismo  $NFe$ , presenta una variación mucho más suave resultando

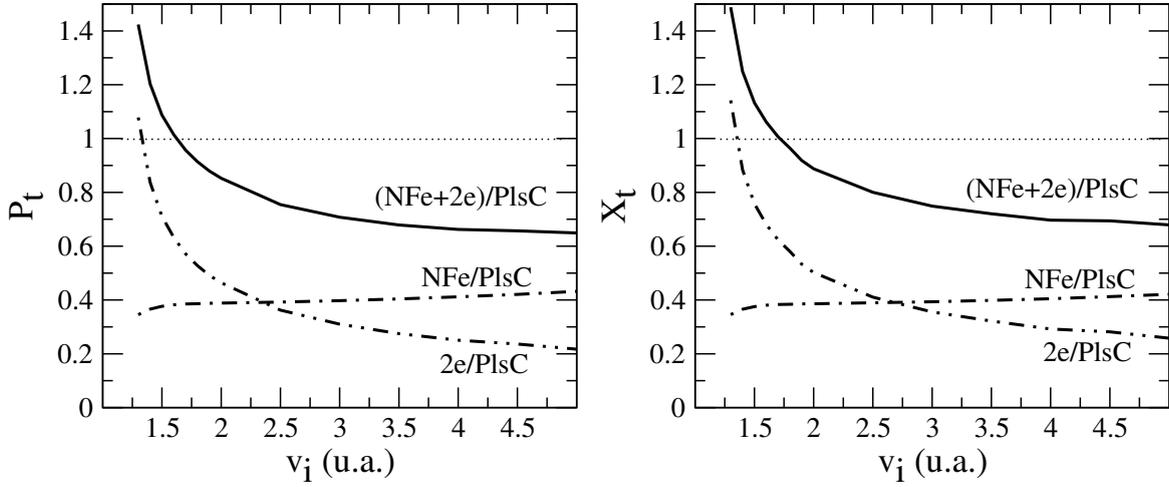


Figura 4.2: Se grafican los cocientes  $NFe/PlsC$ ,  $2e/PlsC$  y  $(NFe + 2e)/PlsC$  en función de  $v_i$  para la probabilidad por unidad de tiempo y la potencia de excitación.

favorecido a velocidades altas.

Por otro lado, mencionemos que la importancia relativa de los procesos considerados puede ser diferente para otros elementos. Por ejemplo, si consideramos un elemento hipotético con igual  $\gamma$  que el aluminio (misma vida media de los plasmones) pero con un mayor volumen por partícula ( $r_s = 3$  u.a. en vez de  $r_s = 2.09$  u.a., correspondiente al aluminio), encontramos que la eficacia del mecanismo  $2e$  disminuye. Concluimos que una mayor densidad electrónica favorece el mecanismo  $2e$ .

Volviendo ahora al aluminio real, y pensando en las razones de la subestimación de nuestros resultados, es importante tener en cuenta que estamos trabajando dentro de las posibilidades de la respuesta dieléctrica de Mermin-Lindhard y es allí donde, creemos, reside la mayor limitación del modelo. Sin embargo, mejoras en este sentido implicarían la utilización de una respuesta dieléctrica tal que el ancho de la línea de plasmón para un momento dado  $\gamma(p)$  dependiera del mecanismo considerado. El desarrollo necesario para obtener esa función  $\gamma(p)$  no es trivial y va más allá de las posibilidades de esta tesis.

Finalmente, notemos que los resultados para  $2e$  fueron obtenidos anulando la parte imaginaria de las funciones de Green en la Ec. (4.33). En relación con esta elección, comentamos que tanto la probabilidad de transición como la potencia de excitación son muy sensibles a cambios de este parámetro. Hay implícita una operación de límite en

esta ecuación. Es usual, por cuestiones de conveniencia numérica asignar un valor finito a este parámetro. En la Fig. 4.3 graficamos la probabilidad de transición y la potencia de excitación para dos electrones interactuantes que son excitados por el proyectil vía un plasmón, como función de la velocidad del proyectil  $v_i$ . Consideramos distintos posibles valores para el parámetro  $0^+$  y encontramos que no solamente el límite existe y es bien comportado sino que además podemos fijar el valor del parámetro igual a cero desde el principio ya que el integrando (la probabilidad total) no tiene complicaciones numéricas en la región considerada. Cada uno de los denominadores debe ser distinto de cero para asegurar que ambos electrones sufran una transición. Notemos que es en el límite  $0^+ \sim 0$  que la pendiente de la curva de excitación es reproducida correctamente.

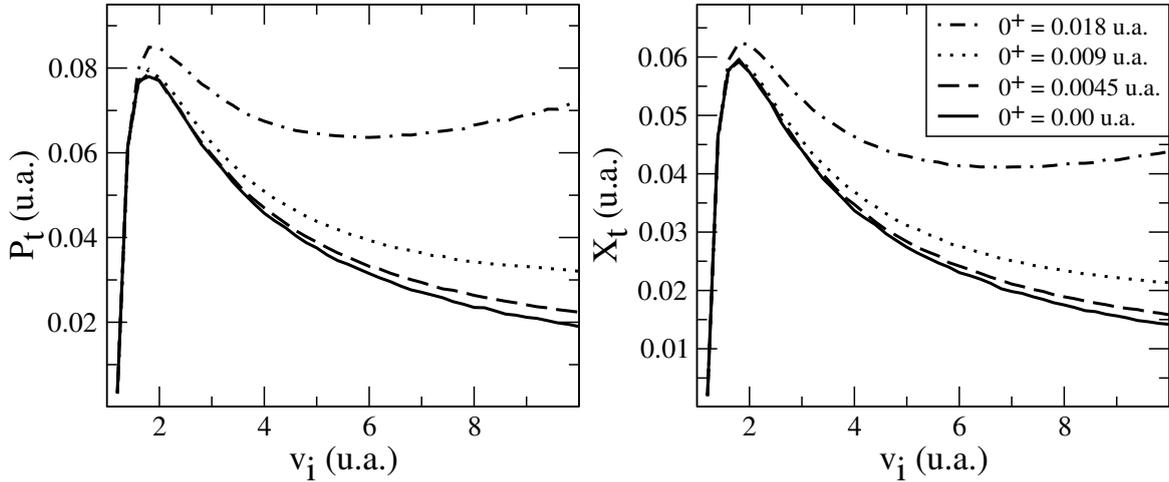


Figura 4.3: Se muestran la probabilidad de transición y la potencia de excitación, ambas por unidad de tiempo, como funciones de la velocidad inicial del proyectil  $v_i$  para la contribución  $2e$ . Se consideran distintos valores para la parte imaginaria de los denominadores de las funciones de Green.

### 4.3.3. Espectros de primeros diferenciales en ángulo y energía

En esta subsección y la siguiente pretendemos, a partir del estudio de los espectros angulares y de energía, poder diferenciar un electrón que fue excitado por el decaimiento de un plasmón ( $NFe$  o  $2e$ ) de uno que interactuó directamente con el proyectil ( $Bin$  o  $ISh$ ).

La velocidad del proyectil se fija en  $v_i = 3.0$  a.u., en parte porque esa fue la velocidad elegida en el capítulo anterior (Figs. 3.3 y 3.4) y en parte porque, para la misma, tenemos disponibles los datos de *ISh* [111]. En la Fig. 4.4 a, se reproduce la Fig. 3.3 a la que se agrega la contribución de  $2e$ . Podemos observar que, mientras  $NFe$  es la contribución principal de plasmones en la región  $\epsilon_{1f} \sim 1$  u.a., para energías más bajas ( $\epsilon_{1f} \gtrsim \epsilon_F \sim 0.41$  u.a.), es  $2e$  el término dominante. Es decir que electrones excitados por decaimiento de plasmones se concentran en diferentes regiones de energía dependiendo de cuál fue el mecanismo de decaimiento involucrado en la excitación. Notemos, sin embargo, que en todo el rango de energía considerado, hay una contribución apreciable de electrones *Bin* de modo que una cierta energía final no es garantía de excitación por decaimiento de plasmón.

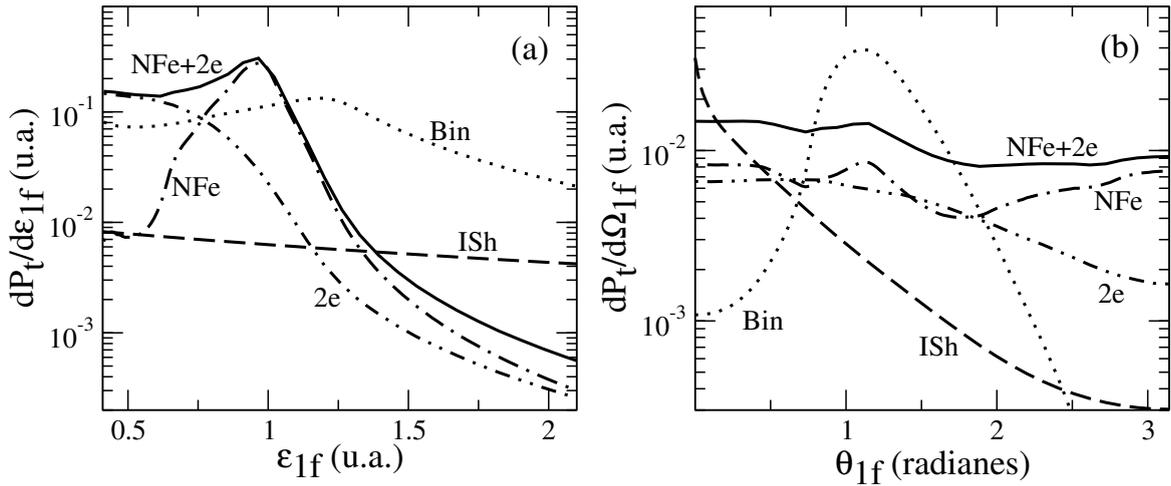


Figura 4.4: (a) Primeros diferenciales de las probabilidades de transición como funciones de la energía final  $\epsilon_{1f}$  de un electrón excitado, medida desde el fondo de la banda. (b) Primeros diferenciales de las probabilidades de transición como funciones de la orientación del momento final del electrón  $\theta_{1f}$  respecto de  $v_i$ . En ambos casos se consideró  $v_i = 3$  a.u.

Análogamente, realizamos el análisis de los espectros de primeros diferenciales angulares en la Fig. 4.4 b, donde  $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$  identifica el diferencial de ángulo sólido. Se observa que  $2e$  es solamente una corrección para direcciones antiparalelas al proyectil pero es del mismo orden que  $NFe$  tanto en dirección paralela como perpendicular. La región más favorable para encontrar un electrón excitado por  $2e$

es la correspondiente a ángulos pequeños, sin embargo, resulta que allí hay muchos electrones *ISh*. Nuevamente, no hay garantías.

El hecho de que el mecanismo *NFe* presente un pico en el espectro de energía y el *2e* no, se relaciona con el hecho de que en este último caso los dos electrones comparten la energía del plasmón que decae. En relación con esta idea es ilustrativo observar, para el caso del aluminio, espectros de energía  $\omega$  cedida por el proyectil. Consideramos los casos de  $v_i = 1.3$  u.a.  $\gtrsim v_{th}$  y de  $v_i = 5.0$  u.a.  $\gg v_{th}$ .

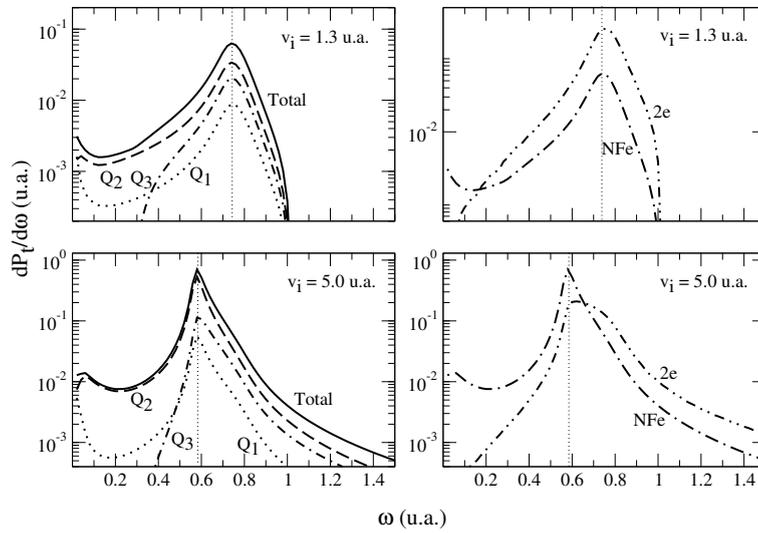


Figura 4.5: Se muestran los espectros de energía  $\omega$  para Al. Se trabajó con  $v_i = 1.3$  u.a. y  $v_i = 5.0$  u.a. Las energías se miden desde el fondo de la banda. Las curvas *Total* a la izquierda se corresponden con las *NFe* a la derecha.

Vemos en todos los casos la presencia de un pico cuya posición depende de la velocidad del proyectil. Esta dependencia reproduce la relación de dispersión para excitación de plasmones. Observemos que para altas velocidades la posición del pico tiende a coincidir con  $\omega_P(0) \simeq 0.56$  u.a.

Encontramos que el mecanismo *2e* es más fuerte a bajas velocidades (más allá de sobre-estimaciones en esta región) como así también a altas velocidades y altas energías transferidas mientras que en la zona del pico, *NFe* constituye el proceso principal.

#### 4.3.4. Espectros de segundos diferenciales en ángulo y energía

Si miramos la Fig. 4.4 a, es natural preguntarse como compiten  $2e$  y  $Bin$  en la región de baja energía y si es posible distinguirlos entre sí. Para responder estas preguntas analizamos el espectro de segundos diferenciales en función del ángulo  $\theta_{1f}$  para  $\varepsilon_{1f} = 0.5$  a.u., como se muestra en la Fig. 4.6 a. Resulta que los electrones binarios ( $Bin$ ) se concentran en la dirección perpendicular mientras que los  $2e$  se mueven en su mayoría en la dirección paralela a  $v_i$ . Así que podemos decir si un electrón de baja energía provino del decaimiento de un plasmón o no, de acuerdo a su dirección de movimiento.

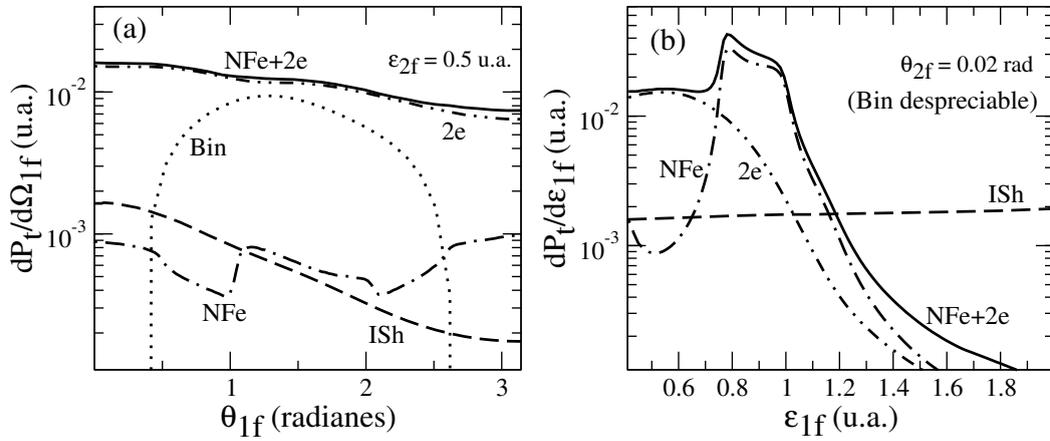


Figura 4.6: (a) Doble diferencial de la probabilidad de transición como función de  $\theta_{1f}$  (Orientación del momento final del electrón respecto de  $v_i$ ). La energía final del electrón es  $\varepsilon_{1f} = 0.5$  a.u. (b) Doble diferencial de la probabilidad de transición como función de  $\varepsilon_{1f}$ . La dirección de movimiento  $\theta_{1f}$  fue fijada en 0.02 radianes. En ambos casos tomamos  $v_i = 3.0$  u.a.

De igual forma, la Fig. 4.4 b lleva al análisis de espectros de segundos diferenciales. Consideramos la dirección paralela al proyectil ( $\theta_{1f} = 0.02$  radianes), donde  $2e$  e  $ISh$  son las contribuciones dominantes y  $2e$  toma sus valores más altos. Vemos en la Fig. 4.6 b que  $ISh$  se reparte muy uniformemente en el rango de energía considerado mientras que la contribución de  $2e$  está localizada en la región de energías intermedias y bajas. Notemos que, para  $\varepsilon_{1f} \gtrsim \varepsilon_F = 0.41$  a.u.,  $2e$  es casi un orden de magnitud mayor que  $ISh$ . Por lo tanto, en la dirección paralela a  $v_i$  podemos saber si un electrón fue excitado por un plasmón o no de acuerdo a su energía.

# Capítulo 5

## Decaimiento de plasmones en colisiones electrón-aluminio

### 5.1. Teoría

#### 5.1.1. Adaptación de las fórmulas

En este capítulo, queremos estudiar los dos mecanismos presentados de decaimiento de plasmones para el caso en que el proyectil es un electrón.

La primera diferencia con el caso de protones, la encontramos en la conservación de la energía,  $\delta(E_i - E_f)$ , que se muestra en la Ec. (3.25). Tenemos

$$\begin{aligned}\omega &= \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p} - \frac{p^2}{2M_P} = \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p} - \frac{p^2}{2}, \\ \delta(E_i - E_f) &= \delta\left(\omega - \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p} - \frac{p^2}{2}\right),\end{aligned}\tag{5.1}$$

ya que, en este caso,  $M_P = 1$  y no podemos despreciar el término cuadrático en  $p$  como hicimos para el caso de protones.

Además, es necesario que el estado final del proyectil no esté ya ocupado por un electrón del gas, es decir

$$\begin{aligned}\frac{K_f^2}{2} \geq \frac{k_F^2}{2}, \quad \text{y como} \quad \omega = \frac{K_i^2}{2} - \frac{K_f^2}{2} = \frac{v_i^2}{2} - \frac{K_f^2}{2}, \\ \implies \omega \leq \frac{v_i^2}{2} - \frac{k_F^2}{2}.\end{aligned}\tag{5.2}$$

La probabilidad por unidad de tiempo, obtenida en el Cap. 3, de que un protón y un electrón de Bloch interactúen vía la excitación y decaimiento de un plasmón de volumen (Ecs. (3.26) y (3.24)) puede ser, con estas consideraciones, extendida para el caso en que el proyectil es un electrón de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
P_t^{NFe} &= 2\pi \int 2\delta\left(\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p} - \frac{p^2}{2} - \omega\right) |T_{if}|^2 \Theta(k_F - k_i) \Theta(-k_F + k_f) \\
&\quad \times \{1 - \Theta[\omega^+(p) - \omega(p)] \Theta[\omega(p) - \omega^-(p)]\} \\
&\quad \times \Theta\left(\frac{v_i^2 - k_F^2}{2} - \omega\right) d\mathbf{p} dk_i dk_f,
\end{aligned} \tag{5.3}$$

donde el factor 2 da cuenta de consideraciones de spin,  $\mathbf{p}$  es el momento que pierde el proyectil,  $\omega = \varepsilon_{1f} - \varepsilon_{1i} = k_{1f}^2/2 - k_{1i}^2/2$  es la energía que recibe  $e_1$  (y la que entrega el proyectil),  $v_i$  es la velocidad inicial del proyectil,  $k_F$  es el momento de Fermi del gas, el término entre llaves mantiene el cálculo fuera de la zona binaria (ver Ec. (2.16)) y la matriz de transición  $T_{if}$  está dada por la Ec. (3.24), esto es:

$$\begin{aligned}
|T_{if}|^2 &= \frac{|\tilde{V}_{P1}^{eff}(\mathbf{p})|^2}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{Q}} \frac{|\tilde{V}_{\mathbf{Q}}|^2}{\Omega} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{1f} + \mathbf{k}_{1i} + \mathbf{Q}) \\
&\quad \times \left|g(\mathbf{k}_{1i}, \mathbf{Q}, |\tilde{V}_{\mathbf{Q}}|/\sqrt{\Omega}) + g(\mathbf{k}_{1f}, -\mathbf{Q}, |\tilde{V}_{\mathbf{Q}}|/\sqrt{\Omega})\right|^2
\end{aligned} \tag{5.4}$$

con  $\tilde{V}_{P1}^{eff}(\mathbf{p}) = 4\pi / [(2\pi)^{3/2} p^2 \epsilon_{ML}(p, \omega, \gamma)]$ , el potencial proyectil-blanco en el espacio de momentos, la función  $g(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \beta)$  definida según la Ec. (3.18),  $\tilde{V}_{\mathbf{Q}}$  la transformada de Fourier del potencial periódico débil de la red,  $\Omega$  el volumen de la celda unidad y  $\epsilon_{ML}(p, \omega, \gamma)$  la respuesta dieléctrica de Mermin-Lindhard siendo  $\gamma$  el ancho de la línea de plasmón en  $p = 0$ .

La probabilidad por unidad de tiempo, obtenida en el Cap. 4, para que un proyectil excite un par de electrones interactuantes vía la excitación y decaimiento de un plasmón de volumen (Ecs. (4.36) y (4.33)) puede extenderse al caso en que el proyectil

es un electrón de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
P_t^{2e} &= \int 2\pi \delta \left( \omega - \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p} + \frac{p^2}{2} \right) \left( |T_{if}(s=0, m=0)|^2 + 3 |T_{if}(s=1, m)|^2 \right) \\
&\quad \times \Theta(k_F - k_{1i}) \Theta(k_F - k_{2i}) \Theta(-k_F + k_{1f}) \Theta(-k_F + k_{2f}) \Theta \left( \frac{v_i^2 - k_F^2}{2} - \omega \right) \\
&\quad \times \left[ 1 - \Theta \left( \omega^+(p) - \omega(p) \right) \Theta \left( \omega(p) - \omega^-(p) \right) \right] d\mathbf{p} d\mathbf{k}_{1i} d\mathbf{k}_{2i} d\mathbf{k}_{1f} d\mathbf{k}_{2f},
\end{aligned} \tag{5.5}$$

y  $T_{if}(s, m)$  tiene la misma expresión que para protones (Ec. (4.33)), es decir

$$\begin{aligned}
T_{if}(s, m) &= \frac{\tilde{V}_P^{eff}(\mathbf{p})}{(2\pi)^3} \delta(\kappa_i - \kappa_f + \mathbf{p}) \left[ \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{p}_2) \left( g(\mathbf{k}_i, \mathbf{p}_2, 0^+) + g(\mathbf{k}_f, -\mathbf{p}_2, 0^+) \right) \right. \\
&\quad \left. + \tilde{V}_{12}^{eff}(-\mathbf{p}_1) \left( g(\mathbf{k}_i, -\mathbf{p}_1, 0^+) + g(\mathbf{k}_f, \mathbf{p}_1, 0^+) \right) \right. \\
&\quad \left. \pm \tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{k}_{2f} - \mathbf{k}_{1i}) \times \left( g(\mathbf{k}_i, -\mathbf{k}_{2f} + \mathbf{k}_{1i}, 0^+) + g(\mathbf{k}_f, -\mathbf{k}_{2f} + \mathbf{k}_{1i}, 0^+) \right) \right. \\
&\quad \left. \pm \tilde{V}_{12}^{eff}(-\mathbf{k}_{1f} + \mathbf{k}_{2i}) \times \left( g(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_{1f} - \mathbf{k}_{2i}, 0^+) + g(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_{1f} - \mathbf{k}_{2i}, 0^+) \right) \right].
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Todas las cantidades se definen como en el caso  $NFe$  y además  $\kappa$  es el momento total del par de electrones,  $\tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{q}) = 4\pi / [(2\pi)^{3/2} (q^2 + \lambda^2) \epsilon_{M-L}(p, \omega, \gamma)]$  (Ec. (4.3)) es la transformada de la interacción efectiva entre el par de electrones,  $\mathbf{p}_j$  es el momento ganado por el electrón  $j$ ,  $g(\mathbf{k}, \mathbf{q}, \beta) = [k^2 - (\mathbf{k} + \mathbf{q})^2 + i\beta]^{-1}$  (Ec. (4.21)) son factores provenientes de la función de Green, y  $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)/2$  es el momento relativo. Además, recordamos que las sumas corresponden a  $T_{if}(s=0, m=0)$  y las restas a  $T_{if}(s=1, m=\pm 1, 0)$ .

### 5.1.2. Una observación numérica

La modificación del argumento de la  $\delta$  de conservación de energía en las Ecs. (5.3) y (5.5) tiene consecuencias en cuanto a la eficiencia del método numérico utilizado

para resolver la integral multidimensional. Para el caso de protones, por ejemplo en el proceso  $NFe$ , teníamos que

$$\begin{aligned}
\delta(\omega - \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p}) &= \delta(\omega - v_i p_z) = \delta(\omega - v_i (k_{1fz} - k_{1iz} - Q_z)), \\
&= \frac{1}{v_i} \delta \left( \frac{\omega}{v_i} - k_{1fz} + k_{1i} \cos(\theta_{1i}) + Q_z \right), \\
&= \frac{1}{v_i k_{1i}} \delta \left( \frac{-\omega/v_i + k_{1fz} - Q_z}{k_{1i}} - \cos\theta_{1i} \right), \tag{5.7}
\end{aligned}$$

lo que nos permitía resolver la integral angular en  $\theta_{1i}$  analíticamente (elección óptima en cuanto a la eficiencia del cálculo de la integral numérica resultante). Para el caso de electrones, la situación no es tan simple. Tenemos

$$\begin{aligned}
\omega - \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p} + \frac{p^2}{2} &= \omega - v_i p_z + \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{p_z^2}{2}, \\
&= \omega - v_i (k_{1fz} - k_{1iz} - Q_z) + \frac{(k_{1fx} - k_{1ix} - Q_x)^2}{2} \\
&\quad + \frac{(k_{1fy} - k_{1iy} - Q_y)^2}{2} + \frac{(k_{1fz} - k_{1iz} - Q_z)^2}{2}, \\
&= \frac{k_{1f}^2}{2} - \frac{k_{1i}^2}{2} - v_i (k_{1fz} - k_{1iz} - Q_z) + \frac{k_{1f}^2}{2} + \frac{k_{1i}^2}{2} + \frac{Q^2}{2} \\
&\quad - \mathbf{k}_{1f} \cdot \mathbf{k}_{1i} - \mathbf{k}_{1f} \cdot \mathbf{Q} + \mathbf{k}_{1i} \cdot \mathbf{Q}, \\
&= k_{1f}^2 + \frac{Q^2}{2} - \mathbf{k}_{1f} \cdot \mathbf{Q} - v_i (k_{1fz} - Q_z) \\
&\quad - k_{1i} (\cos \varphi_{1i} \sen \theta_{1i} (k_{1fx} - Q_x) + \sen \varphi_{1i} \sen \theta_{1i} (k_{1fy} - Q_y) \\
&\quad + \cos \theta_{1i} (k_{1fz} - Q_z - v_i)). \tag{5.8}
\end{aligned}$$

Llamando ahora

$$\begin{aligned}\alpha &\equiv k_{1f}^2 + \frac{Q^2}{2} - \mathbf{k}_{1f} \cdot \mathbf{Q} - v_i(k_{1fz} - Q_z), \\ \beta &\equiv \cos \varphi_{1i} \operatorname{sen} \theta_{1i} (k_{1fx} - Q_x) + \operatorname{sen} \varphi_{1i} \operatorname{sen} \theta_{1i} (k_{1fy} - Q_y) \\ &\quad + \cos \theta_{1i} (k_{1fz} - Q_z - v_i),\end{aligned}\tag{5.9}$$

resulta

$$\delta \left( \omega - \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{p} + \frac{p^2}{2} \right) = \delta (\alpha - k_{1i}\beta) = \frac{1}{|\beta|} \delta \left( \frac{\alpha}{\beta} - k_{1i} \right),\tag{5.10}$$

es decir que la integración analítica puede realizarse, en este caso, sobre un módulo de momento (En particular, elegimos  $k_{1i}$ ).

La misma situación encontramos para el proceso 2e. El resultado puede expresarse como en la Ec. (5.10) con

$$\begin{aligned}\alpha &= k_{2f}^2 + k_{1f}^2 + \mathbf{k}_{1f} \cdot \mathbf{k}_{2f} - \mathbf{k}_{1f} \cdot \mathbf{k}_{2i} - \mathbf{k}_{2f} \cdot \mathbf{k}_{2i} - v_i (k_{1fz} + k_{2fz} - k_{2iz}) \\ \beta &= \cos \varphi_{1i} \operatorname{sen} \theta_{1i} (k_{1fx} + k_{2fx} - k_{2ix}) + \operatorname{sen} \varphi_{1i} \operatorname{sen} \theta_{1i} (k_{1fy} + k_{2fy} - k_{2iy}) \\ &\quad + \cos \theta_{1i} (k_{1fz} + k_{2fz} - k_{2iz} - v_i).\end{aligned}\tag{5.11}$$

Para ambos procesos en colisiones electrón-Al, encontramos que la eficiencia de la integración numérica disminuyó sensiblemente. Fueron necesarios diez veces más puntos en una subrutina tipo MonteCarlo para lograr curvas de calidad similar a las obtenidas para protones.

## 5.2. Resultados

### 5.2.1. Probabilidad total y potencia de excitación

En la Fig. 5.1 se presentan las curvas obtenidas para la probabilidad por unidad de tiempo  $P_t$  y la potencia de excitación  $X_t$  en función de la velocidad del proyectil  $v_i$ . Los

resultados para los mecanismos de decaimiento considerados ( $NFe$  y  $2e$ ) se grafican para protones y para electrones junto con los correspondientes totales  $NFe + 2e$  y curvas de excitación de plasmones  $PlsC$ .

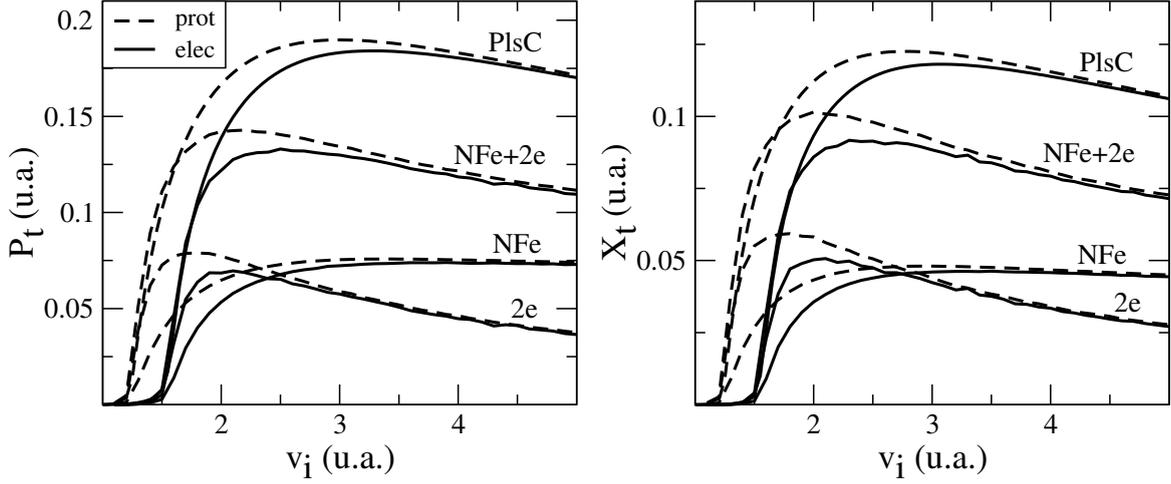


Figura 5.1: Probabilidad por unidad de tiempo y potencia de excitación como funciones de la velocidad inicial del proyectil para los procesos  $NFe$ ,  $2e$  y  $PlsC$ . Se comparan los resultados para protones incidentes con los obtenidos para impacto electrónico.

Encontramos en esta figura que, para altas velocidades, los dos proyectiles son equivalentes. Esto es comprensible, por un lado, porque en el orden de aproximación utilizado (Born 1 en  $Z_P$ ), la probabilidad y la potencia de excitación son proporcionales al cuadrado de la carga del proyectil ( $P_t \propto |T|^2 \propto Z_P^2$ ) y, por el otro, porque a altas velocidades podemos pensar una trayectoria rectilínea asociada al electrón. Mencione-mos en relación con esto que, aunque trabajando en aproximaciones de mayor orden son esperables diferencias entre los proyectiles considerados [112, 113], no esperamos que estas sean importantes a altas velocidades, donde el primer orden de Born tiende a ser el resultado exacto.

También se observa que la velocidad umbral depende del proyectil considerado resultando que, a bajas velocidades, los protones son más eficientes que los electrones para excitar plasmones. Podemos entender este resultado a partir de la Fig. 5.2, que es la adaptación de la relación de dispersión (Fig. 3.2) para el caso en que el proyectil es un electrón. Encontramos que la velocidad umbral para el caso de electrones es

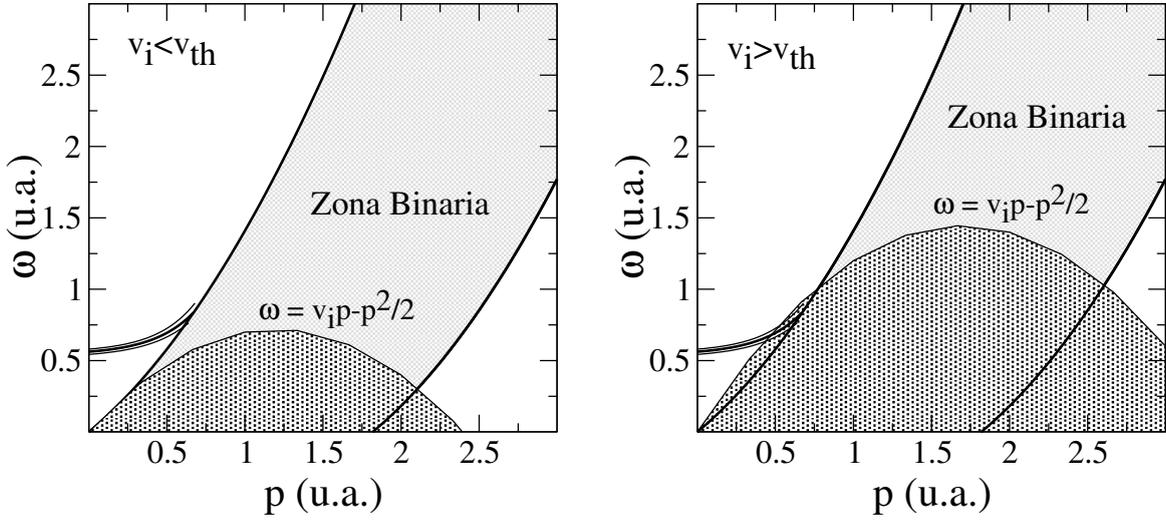


Figura 5.2: Relación de dispersión para proyectiles electrónicos donde se observa la existencia de una velocidad umbral para excitación directa de plasmones. La intersección entre la región sombreada por debajo de la curva  $\omega = -p^2/2 + v_i p$  y el conjunto (línea de plasmones+zona binaria) indica las excitaciones posibles.

$v_{the} \sim 1.55$  a.u., ligeramente mayor que la correspondiente a protones,  $v_{thp} \sim 1.24$  a.u. Notemos también, que desde la Fig. 5.2, podemos entender el comportamiento equivalente de ambos proyectiles para altas velocidades ya que cualquiera de los dos puede excitar todos los plasmones disponibles.

En relación con la dependencia o no de la efectividad de los mecanismos de decaimiento con el proyectil utilizado, es ilustrativa la Fig. 5.3 donde se muestran los resultados para probabilidad y potencia de excitación de los mecanismos estudiados relativos a los plasmones excitados ( $NFe/PlsC$ ,  $2e/PlsC$  y  $(NFe + 2e)/PlsC$ ).

Se verifica en esta figura que, para velocidades  $v_i \geq 2.0$  u.a., la eficiencia de los mecanismos de decaimiento es independiente del proyectil considerado, tanto en la probabilidad como en la potencia de excitación. A altas velocidades, tanto para protones como para electrones, logramos dar cuenta de, aproximadamente, el 65 % de los plasmones excitados. Por otro lado, para velocidades cercanas a la velocidad umbral,  $v_i \approx v_{th}$ , encontramos una sobre-estimación de los resultados de decaimiento, tanto para protones como para electrones siendo la misma menor para el caso de electrones.

Es interesante mencionar que, como ocurría para colisiones protón-Al, puede con-

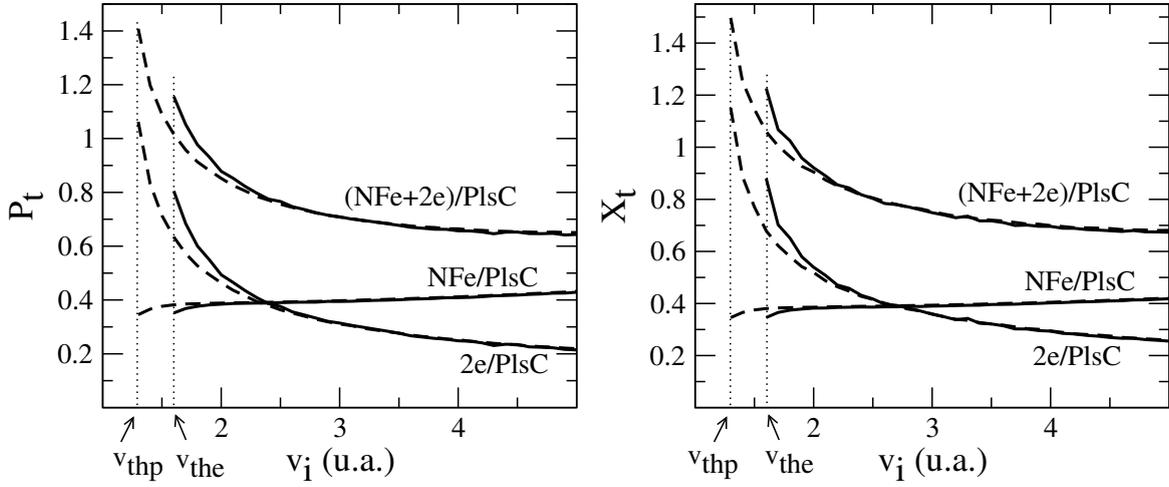


Figura 5.3: Resultados para probabilidad y potencia de excitación relativos a los plasmones excitados, para los procesos y proyectiles considerados.  $v_{thp}$  y  $v_{the}$  son, respectivamente, las velocidades umbral para protones y para electrones.

cluirse de esta figura que, también para el caso de electrones, el mecanismo  $2e$  es particularmente efectivo para velocidades cercanas a la velocidad umbral cuando los únicos plasmones excitados son aquellos de mayor energía, cercanos a la zona binaria. En cambio, el mecanismo  $NFe$  favorece ligeramente a los plasmones de menor energía.

### 5.2.2. Espectros angulares y de energía

En la Fig. 5.4, se muestran los espectros de energía para una velocidad fija del proyectil. Elegimos  $v_i = 2.0$  a.u. por ser aquella a partir de la cual, los dos proyectiles son equivalentes a nivel de las probabilidades totales. Se observa que, también a nivel de primeros diferenciales de energía, y tanto para  $2e$  como para  $NFe$ , los dos proyectiles son equivalentes. Vale mencionar, sin embargo, que la energía máxima que puede depositar un protón ( $w_{MAX} = (2v_i)^2/2$ ) es mayor que la que puede depositar un electrón ( $w_{MAX} = v_i^2/2$ ), aunque esta diferencia no produzca resultados observables en el rango de energía considerado.

En la Fig. 5.5, se muestran los espectros angulares para la misma velocidad del proyectil considerada para los espectros de energía. Obtenemos aquí comportamientos diferentes para cada proyectil. Los electrones son más eficientes que los protones para

excitar electrones con momento paralelo al del proyectil (considerando procesos que involucran plasmones), mientras que las regiones correspondientes a ángulos mayores ( $\theta_{1f} \geq 0.5$  radianes) son más favorecidas por los protones.

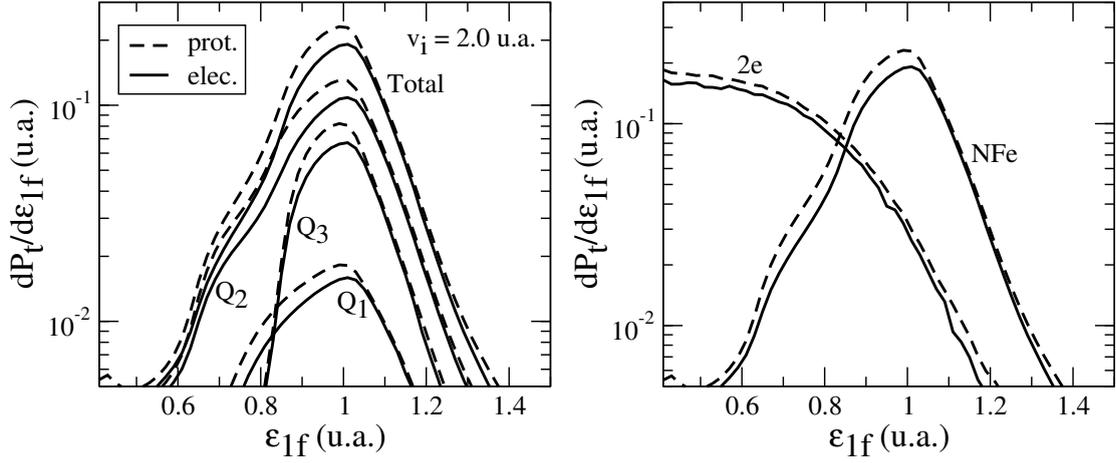


Figura 5.4: Espectros de energía para los mecanismos de decaimiento considerados. La velocidad para ambos proyectiles se fijó en  $v_i = 2.0$  u.a. La energía se mide desde el fondo de la banda.

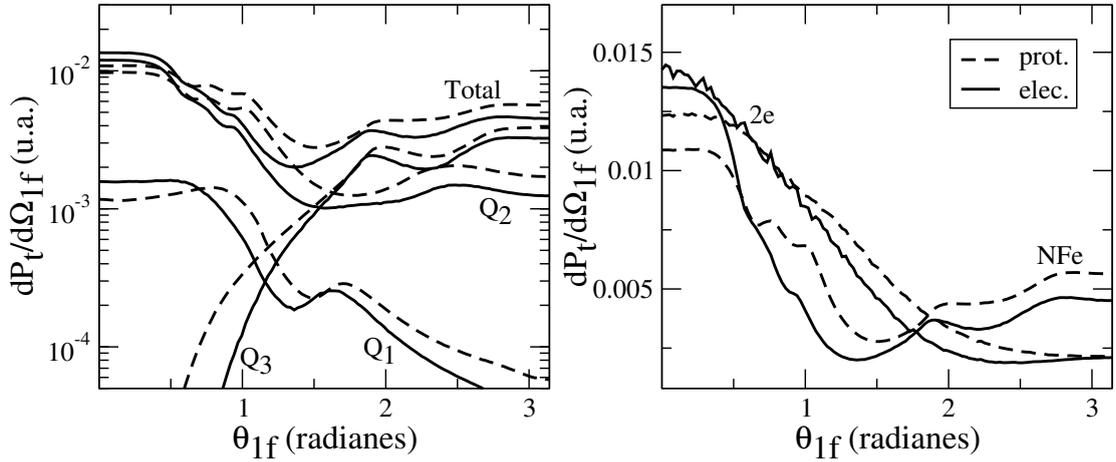


Figura 5.5: Espectros de angulares para los mecanismos de decaimiento considerados. La velocidad para ambos proyectiles se fijó en  $v_i = 2.0$  u.a. El ángulo  $\theta_{1f}$  se mide respecto de la dirección de movimiento inicial del proyectil.



# Capítulo 6

## Mecanismos de decaimiento de plasmones en colisiones protón-metal

### 6.1. Comentarios previos

En este capítulo estamos interesados en generalizar los resultados obtenidos para decaimiento de plasmones excitados en colisiones protón-aluminio. Para ello aplicaremos el modelo desarrollado en los capítulos previos a distintos blancos metálicos. Por simplicidad numérica, el proyectil utilizado será un protón.

Los metales simples con los que trabajaremos, además del aluminio, serán el magnesio, el sodio y el potasio, debiéndose nuestra elección, por un lado, a que la tríada Al-Mg-Na (vecinos horizontales en la tabla periódica) presenta distintas estructuras cristalinas y variadas densidades electrónicas; y por el otro, a que los metales alcalinos Na-K (misma columna de la tabla periódica) presentan la misma estructura cristalina. De esta manera, pretendemos analizar semejanzas y diferencias entre los resultados para decaimiento de plasmones por los mecanismos estudiados en los Caps. 3 y 4, buscando entender cómo afectan a los mismos, las características mencionadas, que se muestran, en la Tab. 6.1.

Para el caso del mecanismo  $NFe$ , presentado en el Cap. 3, recordemos que el decaimiento de plasmones está habilitado gracias a la contribución de la red a la

	Al	Mg	Na	K
Estruc. cristalina	FCC	Hex. con base	BCC	BCC
const(s). de red (u.a.)	$a = 7.66$	$a = 6.05$ $c = 9.8$	$a = 8.0$	$a = 9.9$
$\eta$ (dens. elec.) (u.a.)	0.0254	0.0129	0.004	0.002
$k_F$ (u.a.)	0.9094	0.7256	0.487	0.390

Tabla 6.1: Estructuras cristalinas, parámetros de red [86,106], densidades electrónicas y momentos de Fermi, se muestran para el conjunto Al-Mg-Na-K.

ecuación de conservación de momento y que esa contribución está dada por los puntos  $\mathbf{Q}_i$  que determinan la red recíproca. La transformada de Fourier del potencial modelo,  $\tilde{V}_{\mathbf{Q}_i}$ ,  $1 \leq i \leq 4$ , que condensa la física de la interacción electrón-red, fue calculada hasta cuarto orden ( $|\mathbf{Q}_i|$ ,  $1 \leq i \leq 4$ ), a partir de las tablas de Animalu-Heine [92], reproducidas por Harrison [94] (Ver apéndice G). Los valores obtenidos se muestran en la Tab. 6.2. Como ya mencionamos, esperamos que los resultados para este mecanismo dependan tanto de la estructura cristalina como de la densidad electrónica.

	Al	Mg	Na	K
$ \mathbf{Q}_1 $ (u.a.)	1.42	1.20	1.11	0.90
$ \mathbf{Q}_2 $ (u.a.)	1.64	1.28	1.57	1.27
$ \mathbf{Q}_3 $ (u.a.)	2.32	1.36	1.92	1.56
$ \mathbf{Q}_4 $ (u.a.)	2.72	1.76	2.22	1.80
$ \tilde{V}_{\mathbf{Q}_1} /\sqrt{\Omega}$ (u.a.)	0.0089	0.0071	0.0103	0.0039
$ \tilde{V}_{\mathbf{Q}_2} /\sqrt{\Omega}$ (u.a.)	0.0281	0.0133	0.0046	0.0027
$ \tilde{V}_{\mathbf{Q}_3} /\sqrt{\Omega}$ (u.a.)	0.0272	0.0186	0.0018	0.0077
$ \tilde{V}_{\mathbf{Q}_4} /\sqrt{\Omega}$ (u.a.)	0.0093	0.0215	0.0035	0.0115

Tabla 6.2: Distancias a los vecinos más cercanos de la red recíproca a cuarto orden y coeficientes del potencial modelo [86, 92, 94] para los elementos considerados.

En cambio, para el mecanismo  $2e$ , presentado en el Cap. 4, es la interacción de dos electrones del gas la que permite el acople con el plasmón excitado y, por lo tanto,

su decaimiento. La cantidad relevante es entonces la densidad electrónica (y no la estructura cristalina).

Es importante mencionar que ambos procesos serán fuertemente influenciados por el valor del ancho  $\gamma$  de la línea de plasmón, cuyo valor para cada elemento, determinado experimentalmente para  $p = 0$  [86,99–101,107,114–118], se muestra en la Tab. 6.3 junto con el valor de la energía de excitación colectiva  $\omega_P$ .

	Al	Mg	Na	K
$\omega_P$ (u.a.)	0.56	0.40	0.22	0.16
$\gamma$ (u.a.)	0.037	0.026	0.009	0.009
Refs.	[101, 107]	[86, 114]	[99, 116]	[99, 116, 118]
$v_{th}$ (u.a.)	1.24	1.01	0.71	0.60

Tabla 6.3: Anchos  $\gamma$  de las líneas de plasmón a momento nulo, junto con las energías  $\omega_P$  correspondientes, para los elementos utilizados. Se muestran también las velocidades umbral  $v_{th}$  para excitación de plasmones.

Las expresiones para la probabilidad por unidad de tiempo de que ocurran los procesos denominados  $NFe$  y  $2e$  son las mismas que las utilizadas en los Caps. 3 y 4, presentadas como Ecs. (3.26) y (4.36).

## 6.2. Resultados

### 6.2.1. Probabilidad total y potencia de excitación

En la Fig. 6.1 mostramos la probabilidad por unidad de tiempo  $P_t$  como función de la velocidad inicial del proyectil  $v_i$ . Trabajamos con los cuatro elementos mencionados (Al-Mg-Na-K) y analizamos los procesos  $NFe$  y  $2e$ , ya explicados, que involucran decaimiento de plasmones. Se agregan a los gráficos, los resultados para excitación de plasmones,  $PlsC$ .

Se observa en todos los casos, la existencia de una velocidad umbral para excitación de plasmones, que puede hallarse gráficamente a partir de la relación de dispersión, como se mostró en la Fig. 3.2. Los resultados para los elementos utilizados se muestran

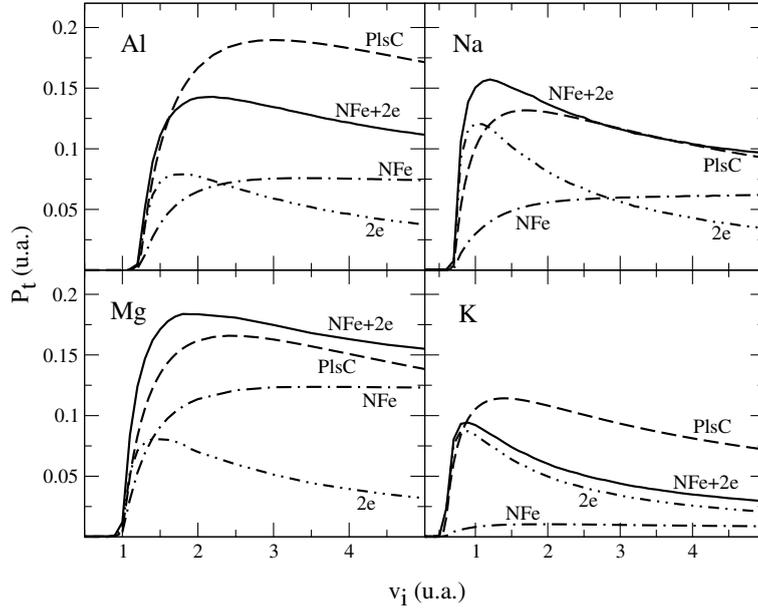


Figura 6.1: Probabilidad por unidad de tiempo como función de la velocidad inicial del proyectil para los procesos  $NFe$ ,  $2e$  y  $PlsC$ .

en la Tab. 6.3.

En relación con la excitación de plasmones podemos decir que la misma es favorecida por altas densidades electrónicas, encontrando además que la velocidad umbral es mayor en estos casos. Este resultado es razonable, ya que la energía de excitación de un plasmón  $\omega_P(p)$  crece con el momento de Fermi ( $\omega_P(0) = \sqrt{4\pi\eta} = \sqrt{4k_F^3/(3\pi)}$ ). Es decir, para excitar plasmones en medios más densos, necesito proyectiles más energéticos. Disponiendo de esos proyectiles (protones con velocidad por encima del umbral), una mayor densidad electrónica favorece la excitación de plasmones.

Las curvas para  $NFe$  y  $2e$  presentan, en todos los casos, la misma estructura cualitativa ya mencionada en los capítulos previos. El proceso  $NFe$  es más importante a altas velocidades mientras que  $2e$  lo es a velocidades bajas.

Si observamos las curvas  $NFe$ , es interesante notar que este mecanismo es despreciable para el potasio. Entendemos este resultado si comparamos los coeficientes del potencial modelo de este elemento con los correspondientes a los otros tres (Ver Tab. 6.2). Resultan ser menores en aproximadamente un factor 3 ya que sus electrones están

relativamente más alejados de la red de iones. Por otro lado, es importante tener en cuenta que, a diferencia de lo que ocurre para la tríada Al-Mg-Na, cuyos electrones de valencia están bien diferenciados de los de las capas internas, en el potasio, con muchos más electrones, esta diferenciación entre valencia y capa interna no es tan clara. Es posible entonces, que, desde la teoría (el potencial modelo y la densidad electrónica), estemos considerando menos electrones activos de los apropiados.

Para todos los elementos encontramos que nuestros cálculos sobre-estiman la eficacia del mecanismo  $2e$  para bajas velocidades. Suponemos que este comportamiento puede deberse a que, en esta región (bajas velocidades, cercanas a la velocidad umbral), nuestro modelo, basado en un desarrollo de Born de orden 1 ya no es una buena aproximación. Observamos, además, que esta característica es más marcada para el magnesio y el sodio, elementos para los cuales hay una pequeña sobre-estimación, también a velocidades altas.

En la Fig. 6.2 se muestran las curvas de la Fig. 6.1 relativas a los resultados para excitación. De esta forma podemos visualizar y analizar la dependencia de la eficiencia de cada uno de los procesos de decaimiento con las características de los elementos utilizados.

Es esperable que la efectividad del mecanismo  $2e$  sea favorecida por una mayor densidad electrónica. Sin embargo, de nuestras figuras se desprende que, a altas velocidades,  $\text{Na} > \text{K} > \text{Al} > \text{Mg}$  para  $P_t^{2e}/P_t^{PlsC}$ , lo cual nos hace suponer que  $2e$  también sobre-estima en esta región, especialmente para el par Na-K.

El mecanismo  $NFe$  presenta para el magnesio y el sodio una importante dependencia con la velocidad, aumentando en importancia para velocidades mayores. En esta región encontramos que este mecanismo resulta particularmente efectivo para el magnesio dando cuenta de aproximadamente el 90% de los plasmones excitados; y para el sodio, donde este porcentaje es del 70%. Es fuerte el contraste con el aluminio donde este mecanismo explica aproximadamente el 40% de los plasmones.

Por último, mencionemos que para el potasio, el porcentaje de plasmones que explicamos es particularmente bajo, apenas un 40% a altas velocidades (13% de  $NFe$ ), lo que nos remite a lo discutido para la Fig. 6.1 en relación con el potencial modelo y una posible subestimación de la densidad efectiva de electrones.

En la Fig. 6.3, mostramos las potencias de excitación en función de la velocidad del proyectil  $v_i$ , para los procesos  $NFe$  y  $2e$  junto con su suma y la potencia de frenamiento

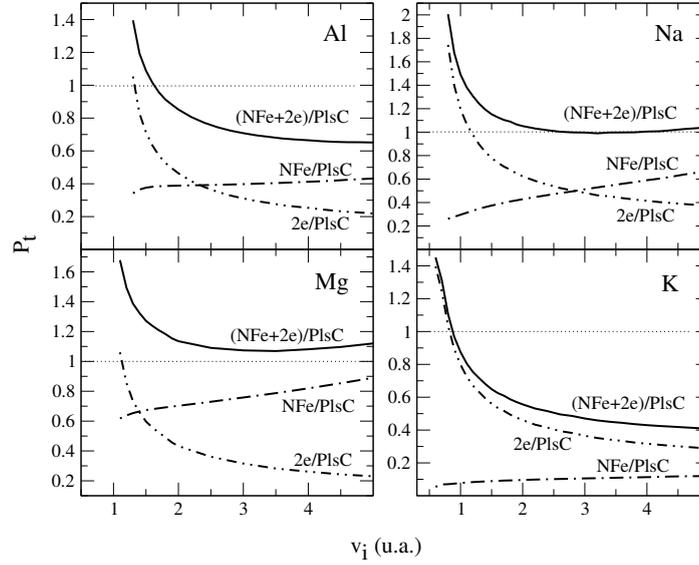


Figura 6.2: Se muestran las probabilidades relativas  $NFe/PlsC$ ,  $2e/PlsC$  y  $(NFe + 2e)/PlsC$  como función de la velocidad inicial del proyectil. Se considera  $v_i \geq v_{th}$ .

debida a excitación de plasmones.

Encontramos aquí que los resultados para distintos elementos presentan diferencias mucho más marcadas. Tomando, por ejemplo el caso de la excitación de plasmones, mientras que para la probabilidad, a altas velocidades, hay entre aluminio y potasio aproximadamente un factor 2 de diferencia, en términos energéticos (energía entregada por el proyectil por unidad de tiempo), esa diferencia es de aproximadamente un orden de magnitud.

Por otro lado se observan en esta figura las mismas características cualitativas que mencionamos en las probabilidades, con sobrestimaciones a bajas velocidades para todos los elementos que suponemos se deben a problemas en esa región de la primera aproximación de Born.

Para discutir en forma más cuantitativa la eficiencia de los mecanismos  $NFe$  y  $2e$ , se presenta la Fig. 6.4, análoga para potencia de excitación de la Fig. 6.2.

Encontramos que, en todos los casos, es el mecanismo  $2e$  el responsable de la sobrestimación a bajas velocidades. Para el Al, a altas velocidades, explicamos aproxi-

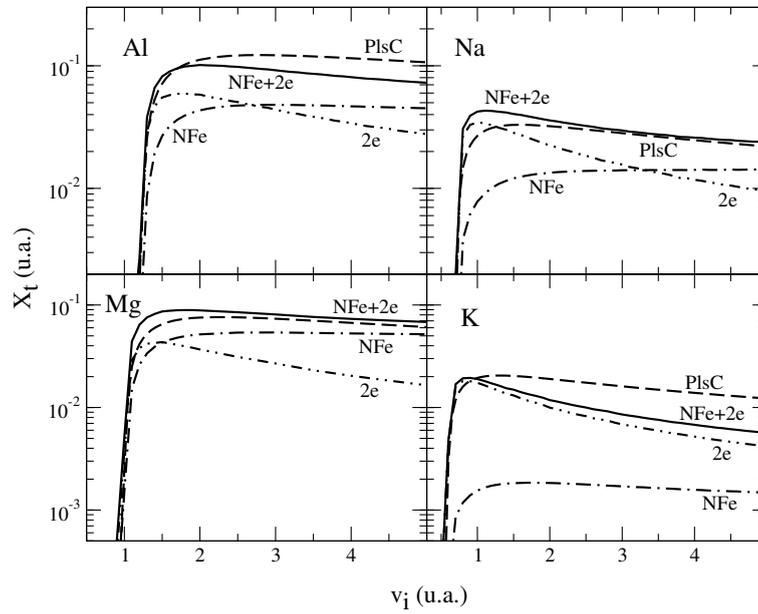


Figura 6.3: Potencia de excitación como función de la velocidad inicial del proyectil para los procesos  $NFe$ ,  $2e$  y  $PlsC$ .

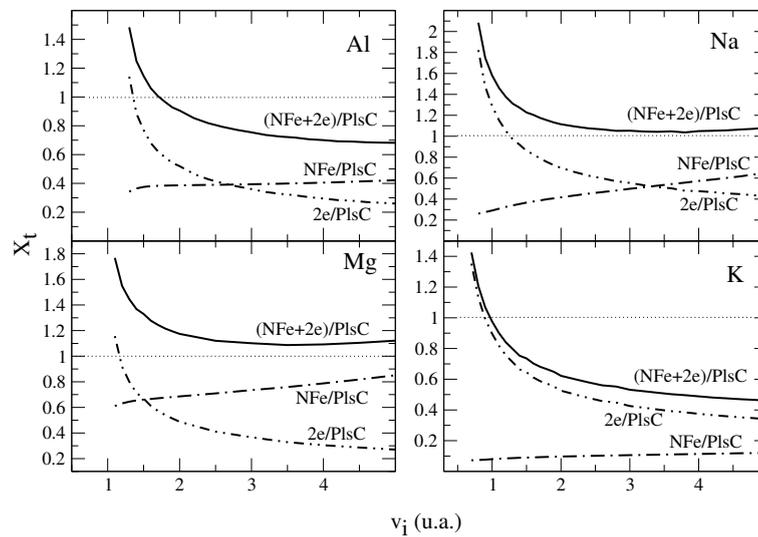


Figura 6.4: Se muestran las potencias de excitación relativas  $NFe/PlsC$ ,  $2e/PlsC$  y  $(NFe + 2e)/PlsC$  como función de la velocidad inicial del proyectil. Se considera  $v_i \geq v_{th}$

madamente el 70 % de la energía entregada por el proyectil a los plasmones mientras que para potasio (el caso más desfavorable) nos mantenemos por debajo del 50 % . Son llamativos los resultados para el magnesio y el sodio que son particularmente mal comportados a bajas velocidades, pero que a velocidades altas explican aproximadamente el 100 % de la energía de excitación de plasmones.

Observamos que el magnesio es el elemento en que el mecanismo  $NFe$  es más efectivo en términos relativos explicando a altas velocidades casi el 90 % de la energía de plasmones, mientras que el potasio es el caso más desfavorable superando apenas el 10 % .

### 6.2.2. Espectros angulares y de energía

En la Fig. 6.5, se muestran los espectros de los primeros diferenciales en energía para  $v_i = 2$  a.u.

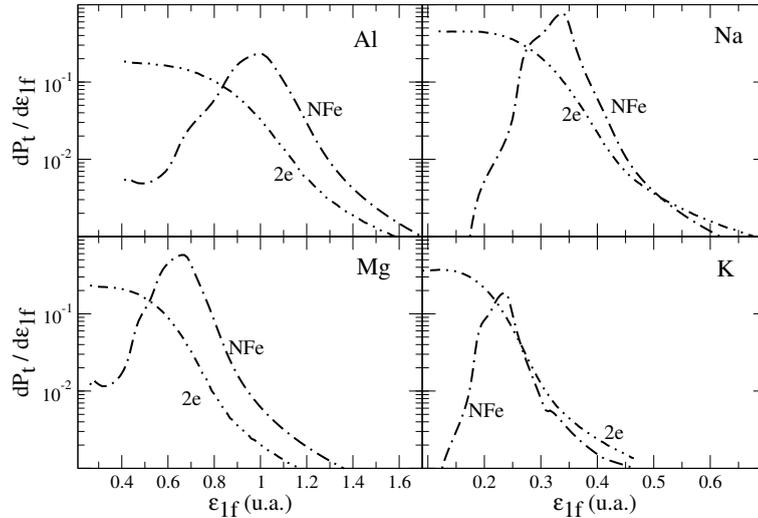


Figura 6.5: Se muestran los espectros de primeros diferenciales en energía para Al-Mg-Na-K. Se trabajó con  $v_i = 2$  u.a. Las energías se miden desde el fondo de la banda.

Para todos los elementos, las curvas de  $NFe$  muestran un pico principal en  $\varepsilon_f = \varepsilon_F + \omega_P$ . A la izquierda del mismo, encontramos estructuras similares para todos los elementos aunque menos pronunciadas en magnesio y aluminio.

Los espectros de  $2e$  muestran curvas cualitativamente similares pero encontramos curioso que el sodio y el potasio, ambos con solamente un electrón de valencia por átomo tomen valores mayores que el aluminio o el magnesio (con 3 y 2 electrones de valencia por átomo, respectivamente) para  $\varepsilon_{1f} = \varepsilon_F$ .

En la Fig. 6.6 se muestran los espectros de primeros diferenciales angulares, para  $v_i = 2$  a.u.

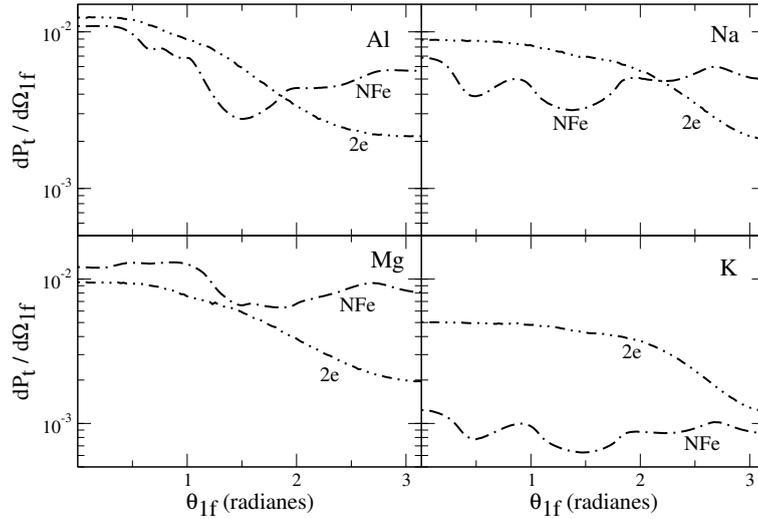


Figura 6.6: Se muestran los espectros de primeros diferenciales angulares para Al-Mg-Na-K. Se trabajó con  $v_i = 2$  a.u. Los ángulos se miden respecto de la dirección de la velocidad inicial del proyectil.  $d\Omega = \text{sen } \theta \, d\theta \, d\varphi$  identifica al ángulo sólido.

Es interesante observar que, para *NFe* en sodio y potasio (ambos BCC), la estructura de la curva es exactamente la misma. Si trabajáramos con monocristales esto no debería ser una sorpresa ya que la geometría de la red recíproca favorece ciertas direcciones para la excitación de los electrones de Bloch. Sin embargo, nosotros trabajamos con policristales donde la orientación del cristal respecto del movimiento del proyectil se introduce como una variable aleatoria. Descubrimos que, a pesar de esto, persiste alguna memoria de la geometría del cristal. Mencionamos también el hecho de que los tres elementos cúbicos (Al, Na y K) presentan un pozo en la dirección normal.

Finalmente, los espectros angulares de  $2e$  son cualitativamente similares para todos

los elementos con la mayoría de los electrones siendo excitados en la dirección paralela al movimiento del proyectil.

## 6.3. Reglas de escaleo

### 6.3.1. Escaleo para creación de plasmones: probabilidad y potencia de frenamiento

La probabilidad por unidad de tiempo de que un proyectil de carga  $Z_P$  y velocidad  $v_i$  transfiera momento  $p$  y energía  $\omega$  a un gas de electrones libres es conocida en la literatura [1] y está dada por

$$dP_t(p, \omega, \gamma) = -\frac{2Z_P^2}{\pi v_i} \frac{1}{p} \text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon(p, \omega, \gamma)} \right) dp d\omega. \quad (6.1)$$

La probabilidad total por unidad de tiempo es entonces

$$P_t(\gamma) = \int_0^{+\infty} \left[ \int_0^{2v_i} \Theta(p - \omega/v_i) dP_t(p, \omega, \gamma) dp \right] d\omega, \quad (6.2)$$

donde consideramos que  $\epsilon(p, \omega, \gamma)$  es la respuesta dieléctrica de Mermin-Lindhard, por lo que incluimos en este cálculo tanto excitaciones binarias como colectivas ( $dP_t = dP_t^{Bin} + dP_t^{PlsC}$ ).

El ancho  $\gamma$ , de la línea de plasmón, asociado con la existencia de mecanismos de atenuación de las excitaciones colectivas, es un parámetro mayormente irrelevante a menos que estemos interesados en lo que ocurre con los plasmones una vez que son excitados. De hecho, la Ec. (6.2) es prácticamente insensible a cambios en  $\gamma$  y, para un dado proyectil, depende sólo de  $k_F$ .

Puede mostrarse fácilmente que, si consideramos solamente excitaciones colectivas, la Ec. (6.2) es aproximadamente proporcional a  $\sqrt{k_F}$  [1] (despreciando un término de comportamiento logarítmico), y, por lo tanto, el gráfico de  $(P_t^{PlsC})k_F^{-1/2}$  vs.  $v_i/k_F$  resulta, también aproximadamente, *independiente del elemento* como se muestra en la Fig. 6.7a para los elementos considerados en este capítulo ( $0.39 \text{ u.a.} < k_F < 0.91 \text{ u.a.}$ ).

Resultados análogos pueden encontrarse para la potencia de frenamiento  $S_t$ . Tenemos que

$$S_t(\gamma) = \int_0^{+\infty} \omega \left[ \int_0^{2v_i} \Theta(p - \omega/v_i) dP_t(p, \omega, \gamma) dp \right] d\omega. \quad (6.3)$$

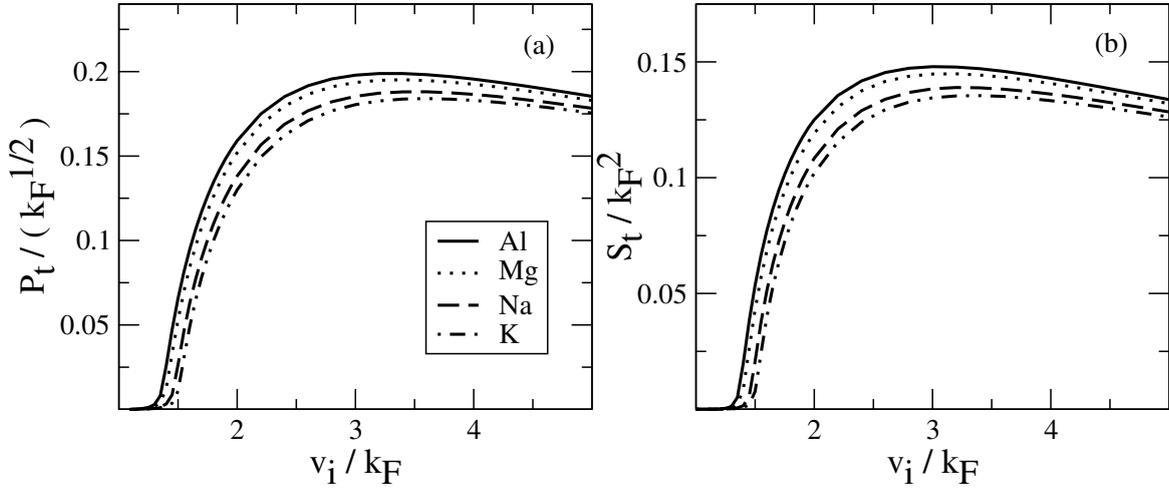


Figura 6.7: Reglas de escaleo aproximadas para la probabilidad de creación de plasmones y su potencia de frenamiento.

En este caso, como  $dS_t^{PlsC}/dP_t^{PlsC} \sim \omega_P \sim k_F^{3/2}$ , la proporcionalidad aproximada es a  $k_F^2$  y por lo tanto el gráfico de  $(S_t^{PlsC})k_F^{-2}$  vs.  $v_i/k_F$  será aproximadamente independiente del elemento como se muestra en la Fig. 6.7b.

Es importante mencionar que el hecho de que el escaleo sea aproximado se debe en parte a la falta de propiedades de escaleo de la respuesta dieléctrica de Mermin-Lindhard (tampoco escalea en forma exacta la de Lindhard).

### 6.3.2. Escaleo para la contribución $2e$ al decaimiento de plasmones

Los resultados obtenidos en la subsección previa sugieren la idea de encontrar una regla de escaleo similar para la contribución  $2e$  a la probabilidad de decaimiento de plasmones,  $P_t^{2e}$ , dada por la Ec. (4.36).

Es importante observar que los resultados para  $P_t^{2e}$  dependen de dos cantidades independientes:  $k_F$  y  $\gamma$ . El escaleo será posible si podemos ‘extraer’ estas cantidades de nuestras ecuaciones realizando algún cambio de variables.

Comenzamos refiriendo todos los momentos a  $k_F$ , es decir, definimos nuevas variables  $k'$  tales que  $k' = k/k_F$ . Esto permite que las funciones  $g(\mathbf{k}, \mathbf{q}, 0)$  en la Ec. (4.33), se expresen como  $g(\mathbf{k}', \mathbf{q}', 0)/k_F^2$ . Sin embargo, cuando reparamos en la energía

potencial  $\tilde{V}_{12}^{eff}(\mathbf{q})$ , encontramos que no podemos extraer los  $k_F$  exactamente ya que  $\lambda = \sqrt{3}\omega_P/k_F = 2\sqrt{k_F}/\sqrt{\pi}$  no escala como un momento.

Además, el potencial  $\tilde{V}_P^{eff}(\mathbf{p})$  tampoco escala en forma exacta debido a la falta de propiedades de escaleo de la respuesta dieléctrica de Mermin-Lindhard  $\epsilon(p, \omega, \gamma)$ . En relación con esta respuesta dieléctrica, notemos que es la única parte de  $P_t^{2e}$  que de hecho depende de  $\gamma$ . Aquí es importante mencionar que la contribución principal a  $Im[1/\epsilon(p, \omega, \gamma)]$  para plasmones de momento nulo proviene de  $\omega \sim \omega_P$  que escala con  $k_F^{3/2}$ , pero que, dentro de la región binaria, este escaleo cambia y  $\omega$  escala aproximadamente con  $k_F^2$ .

A pesar de todas estas complicaciones, logramos obtener una regla de escaleo empírica aproximada procediendo como sigue. Definimos elementos ficticios tipo - aluminio  $Mg^*$ ,  $Na^*$  y  $K^*$ , de modo que los anchos  $\gamma^*$  de sus líneas de plasmón verificaran

$$\frac{\gamma^{Al}}{(k_F^{Al})^2} = \frac{(\gamma^*)^B}{(k_F^B)^2}, \quad (6.4)$$

con  $B = Al, Mg, Na, K$ . Llamando  $P_{tB}^{*2e}$  y  $X_{tB}^{*2e}$  a la probabilidad y la potencia de excitación para estos pseudo-elementos, encontramos que los gráficos  $(P_{tB}^{*2e})\sqrt{k_F^B}$  vs.  $v_i/k_F^B$  y  $(X_{tB}^{*2e})/k_F^B$  vs.  $v_i/k_F^B$  eran aproximadamente independientes del elemento (Notar que  $dX_{tB}^{*2e}/dP_{tB}^{*2e} \sim \omega_P \sim k_F^{3/2}$ ). Estos resultados se muestran en la Fig. 6.8 donde se observa que estas reglas son casi exactas para altos valores de  $v_i/k_F$ .

Finalmente, encontramos una regla empírica que relaciona las probabilidades y potencias de excitación asociadas a los elementos reales,  $P_{tB}^{2e}$  y  $X_{tB}^{2e}$ , con aquellas asociadas a los elementos tipo-aluminio,  $P_{tB}^{*2e}$  y  $dX_{tB}^{*2e}$ . Esta regla es:

$$P_{tB}^{2e} \cong P_{tB}^{*2e} \left( \frac{\gamma^{*B}}{\gamma^B} \right)^{0.9}, \quad X_{tB}^{2e} \cong X_{tB}^{*2e} \left( \frac{\gamma^{*B}}{\gamma^B} \right)^{0.9}, \quad (6.5)$$

como se muestra en la Fig. 6.9.

Combinando estas relaciones con la Ec. (6.4) obtenemos:

$$\begin{aligned} P_{tB}^{2e} &\cong P_{tB}^{*2e} \left( \frac{\gamma^{Al}}{\gamma^B} \right)^{0.9} \left( \frac{k_F^B}{k_F^{Al}} \right)^{1.8}, \\ X_{tB}^{2e} &\cong X_{tB}^{*2e} \left( \frac{\gamma^{Al}}{\gamma^B} \right)^{0.9} \left( \frac{k_F^B}{k_F^{Al}} \right)^{1.8}. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Estas últimas expresiones, junto con los resultados que se muestran en la Fig. 6.8 proveen un escaleo razonable que podría resultar útil para estimar  $P_t^{2e}$  y  $X_t^{2e}$  para

un metal arbitrario en términos de sus parámetros característicos  $(k_F, \gamma)$  y de las referencias  $(k_F^{Al}, \gamma^{Al})$ .

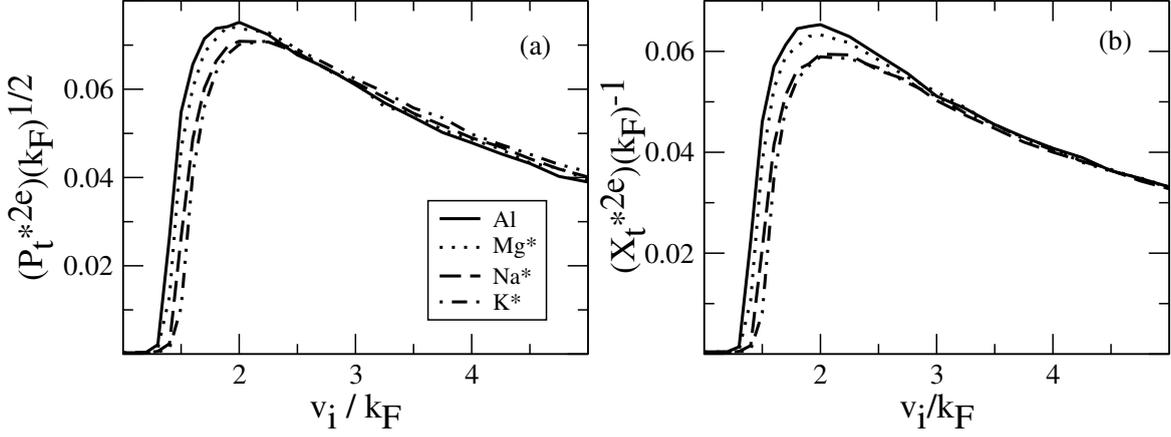


Figura 6.8: Regla de escaleo aproximada para la contribución de  $2e$  al decaimiento de plasmones. Notar que  $P_t^{*2e}$  para un elemento  $B$  verifica que  $P_t^{*2e} = (\gamma^B/\gamma^{Al})^{0.9} (k_F^{Al}/k_F^B)^{1.8} (P_t^{2e})$ , como se indica en las Ecs. (6.6).

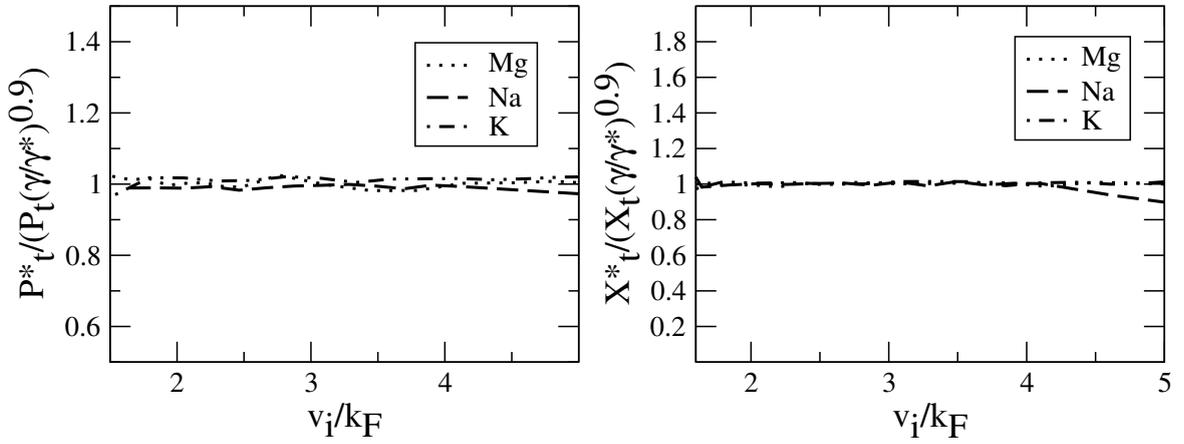


Figura 6.9: Se ilustra la regla que relaciona las probabilidades y potencias de excitación para los pseudo-elementos con las correspondientes a los elementos reales.



# Conclusiones

En esta tesis se estudiaron diversos mecanismos que permiten el decaimiento de estados de oscilación colectiva en un sólido, por transferencia de energía y momento a electrones que son excitados por encima del nivel de Fermi.

En primer lugar (Cap. 3) se desarrolló un formalismo para describir el mecanismo por el cual un proyectil excita a un electrón de Bloch vía la excitación y decaimiento de un plasmón de volumen ( $NFe$ ). El modelo se basa en el tratamiento perturbativo de la función de onda del electrón que será excitado por el plasmón, en términos de su interacción con la red de iones. El hecho de que todas las interacciones ocurran sumergidas en el gas de electrones es tenido en cuenta realizando un desarrollo de Born (de primer orden en  $Z_P$  y a todo orden en la interacción e-e) de la matriz de transición  $T_{if}$ , que nos lleva a la idea de interacciones efectivas expresadas en términos de la respuesta dieléctrica de Lindhard. Una suposición muy fuerte del modelo utilizado es el reemplazo de esta función por la respuesta dieléctrica de Mermin-Lindhard que incluye un ancho finito para la línea de plasmones, conservando la cantidad total de partículas. También son determinantes para los resultados obtenidos los coeficientes del potencial modelo de Animalu *et al.* y el ancho de la línea de plasmón para momento nulo.

Trabajando con colisiones protón - Aluminio policristalino, encontramos que, a altas velocidades, este mecanismo da cuenta de aproximadamente el 40% tanto de los plasmones excitados como de la energía depositada por el proyectil en el gas (y utilizada por éste para excitar plasmones).

Tomando una velocidad fija  $v_i = 3.0$  u.a., se analizaron los espectros de energía y angulares. El primero sugiere que los electrones excitados provienen principalmente del nivel de Fermi mientras que en el segundo encontramos una distribución esencialmente

esférica resultando que los electrones excitados por plasmones constituyen la fuente principal de electrones excitados en la dirección antiparalela a  $v_i$ , donde la cantidad de electrones *ISh* y *Bin* es despreciable.

Se realizó además un estudio de la importancia de las distintas contribuciones de momento de la red obteniéndose que los segundos vecinos en la recíproca,  $\mathbf{Q}_2$ , dominan el espectro energético, salvo a altas energías donde también se vuelve apreciable la contribución de  $\mathbf{Q}_3$ . En el espectro angular, encontramos que  $\mathbf{Q}_2$  domina para ángulos  $\theta < \pi/2$  mientras que para ángulos mayores se vuelve también importante  $\mathbf{Q}_3$ .

La idea de lograr discriminar electrones *NFe* de electrones *Bin* y/o *ISh*, nos llevó a analizar espectros angulares para valores particulares de energía como así también espectros de energía para ciertas direcciones fijas. Esto nos permitió determinar las condiciones (regiones de energía y ángulo) más favorables para hallar un electrón excitado por decaimiento de plasmones, a saber regiones de baja energía ( $\varepsilon_{1f} \sim 1.0$ ) y dirección opuesta a la velocidad inicial del proyectil. En esta zona, el proceso *NFe* es dominante sobre *Bin* y *ISh*.

La red juega un papel importante en la excitación de estos electrones ya que contribuye con  $\mathbf{Q}_3$  (terceros vecinos en la red recíproca).

En segundo lugar (Cap. 4), desarrollamos un formalismo para describir el mecanismo por el cual un proyectil excita dos electrones libres interactuantes vía la excitación y decaimiento de un plasmón ( $2e$ ). Se procedió aquí de manera similar a lo hecho en *NFe*, desarrollando perturbativamente la función onda del par electrónico en términos de la interacción entre electrones. Esta función de onda orbital perturbada fue combinada con los estados de spin del par de electrones de modo de obtener funciones de onda antisimétricas e incluir por lo tanto efectos de intercambio.

Al considerar ambos resultados en conjunto, para colisiones protón-aluminio, logramos, a altas velocidades, dar cuenta de aproximadamente el 65 % de los plasmones excitados y el 70 % de la energía de excitación, reproduciendo en forma correcta la pendiente de las curvas de *PlsC*.

También encontramos que para velocidades cercanas a la velocidad umbral, la mayoría de los plasmones decaen vía el mecanismo  $2e$  mientras que para velocidades altas el mecanismo dominante es *NFe*. Además mostramos que, esperablemente, el mecanismo  $2e$  es favorecido por una alta densidad electrónica.

Los espectros de primeros y segundos diferenciales en ángulo y energía fueron gra-

ficados para todos los procesos estudiados, junto con los correspondientes a  $Bin$  y a  $ISh$ . Del análisis realizado concluimos que hay ciertas regiones de ángulo y energía donde, no solamente podemos asegurar que los electrones excitados provienen de procesos que involucran plasmones sino que, además, podemos saber qué mecanismo de decaimiento de plasmón fue el responsable de la excitación. En particular, encontramos que los electrones de baja energía que se mueven en dirección paralela a la velocidad inicial del proyectil fueron en gran parte excitados por el mecanismo  $2e$ .

Una vez obtenidos estos resultados para protones en aluminio, buscamos generalizar nuestros resultados para otros proyectiles y otros elementos. Como primer paso (Cap. 5), consideramos colisiones electrón -Al. Nuevamente se obtuvieron resultados para la probabilidad total y la potencia de excitación junto con espectros en ángulo y energía. Estos resultados se compararon con los previamente comentados para protones. Aunque el modelo es esencialmente el mismo, el trabajar con proyectiles muy livianos implicó dificultades numéricas. Se requirió de diez veces más tiempo de cálculo que para el caso de protones obteniéndose resultados similares.

Para los totales, se encontró una velocidad umbral diferente y resultados un tanto menores, sin embargo, la razón  $(NFe + 2e)/Pls$  se mostró independiente del proyectil considerado para velocidades  $v_i > 2.0$  u.a..

En relación con los espectros, los resultados para protones y electrones fueron similares, con ligeras diferencias en los espectros angulares en que los electrones parecieron favorecer las excitaciones paralelas a  $v_i$  mientras que los protones favorecieron a las direcciones perpendicular y/o antiparalela.

Volvimos entonces al caso de protones y consideramos distintos metales simples (Cap. 6) para estudiar la dependencia de nuestros resultados con parámetros como la estructura cristalina, la densidad electrónica, el ancho de la línea de plasmón, etc.

Los resultados para probabilidad y potencia de excitación explicaron, para altas velocidades, más del 60% de los plasmones excitados en Al y cerca del 100% en Mg y Na (con pequeña sobre-estimación). En potasio, en cambio, este porcentaje descendió al 40% debido a una muy débil contribución de  $NFe$ . Pensamos que esto puede deberse a que para este elemento la separación entre electrones de capa interna y electrones de valencia no es tan rígida por lo que algunos electrones internos podrían participar del gas de electrones, hecho no considerado en el potencial modelo utilizado.

En todos los elementos se observa una sobreestimación a bajas velocidades asociada

al mecanismo  $2e$ . Es posible que este problema esté relacionado con que, para esas velocidades, la aproximación de Born de primer orden pierde validez.

Requieren una mención especial el magnesio y el sodio. Encontramos que son particularmente mal comportados a bajas velocidades, debido a sobreestimaciones del mecanismo  $2e$ , pero también que son los elementos en que  $NFe$  es más efectivo, explicando el 90 % y el 70 % de los plasmones excitados, respectivamente.

En los espectros, los resultados  $NFe$  pudieron comprenderse en términos de las diferentes estructuras cristalinas a pesar del hecho de estar trabajando con policristales. Para Al, Na y K encontramos similitudes que creemos se deben a su común estructura cúbica (FCC o BCC). Por otro lado, el mecanismo  $2e$  produce en todos los casos excitaciones a bajas energías y en la dirección paralela al movimiento del proyectil.

Para terminar, encontramos reglas de escaleo aproximado tanto para la creación de plasmones como para el decaimiento vía excitación de dos electrones.

Resumiendo, en esta tesis se desarrolló una descripción analítica de los mecanismos de decaimiento de los plasmones que son excitados en colisiones de proyectiles con sólidos metálicos. Nuestro modelo se sostiene en la validez de la primera aproximación de Born, los resultados para los potenciales de la red de iones obtenidos por Animalu et al., y la utilización de la respuesta dieléctrica de Mermin-Lindhard con un ancho de la línea de plasmón a momento nulo que se obtiene de los experimentos. En relación con esta última, mencionemos que, a futuro, podrían mejorarse los resultados obtenidos con la utilización de una respuesta dieléctrica en que el ancho de la línea de plasmones dependiera del mecanismo considerado.

Finalmente, sería deseable, combinar este desarrollo con cálculos de transporte de manera de poder trasladar este modelo a superficies y comparar con espectros experimentales [26, 119].

# Apéndice A

## Gases de electrones

### A.1. Hamiltoniano electrónico

En este apéndice, mostramos la descripción de un sólido, como la presentan Pines y Bohm [1–3]. El formalismo es un tanto antiguo, y clásico en algunos aspectos, pero sus conclusiones son válidas. Creemos que la física del problema es particularmente clara en este planteo.

Consideremos un conjunto de átomos de un mismo elemento cuyos núcleos se acomodan en sitios determinados por su estructura cristalina característica. Se observará que, en una primera aproximación, los electrones se separan en dos grupos. Los electrones de las capas internas, más cercanos a los núcleos, se mantendrán ligados fuertemente a los mismos, mientras que los electrones de valencia se moverán, relativamente más libres, en el potencial generado por el conjunto de núcleos y electrones de capa interna (iones). El hamiltoniano básico para describir el sólido resultante puede expresarse así :

$$H = H_{iones} + H_{elecs} + H_{elecs-iones}, \quad (\text{A.1})$$

donde en  $H_{elecs}$  asumiremos que los electrones de valencia (“elecs”) interactúan entre sí en forma coulombiana y en  $H_{elecs-iones}$  incluiremos las interacciones entre los electrones de valencia y los iones en los sitios del cristal.

Recurriremos a un modelo simple en el que reemplazamos el arreglo de iones por un fondo uniforme de carga positiva de modo de asegurar neutralidad de carga.

El hamiltoniano  $H_{elects}$  para los electrones de valencia está entonces dado por:

$$H_{elects} = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (\text{A.2})$$

Si ahora definimos la densidad (de partículas)  $\rho(\mathbf{r})$  y su transformada de Fourier  $\rho_{\mathbf{k}}$  como

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \rightarrow \rho_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i}, \quad (\text{A.3})$$

podemos, nuevamente transformando Fourier, expresar (A.2) como sigue:

$$H_{elects} = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{4\pi e^2}{k^2} \left[ \rho_{\mathbf{k}}^\dagger \rho_{\mathbf{k}} - \eta \right], \quad (\text{A.4})$$

con  $\frac{4\pi e^2}{\sqrt{\Omega} k^2}$  la transformada de la interacción coulombiana y  $\eta = N/\Omega$  la densidad media electrónica.

Por último, removeremos de la Ec. (A.4) el término correspondiente a  $k = 0$ , asociado a una distribución uniforme de carga negativa que compensa exactamente al fondo de carga positiva supuesto.

## A.2. Comportamiento colectivo

### A.2.1. Apantallamiento

Supongamos que producimos, en algún punto del gas de electrones, un cierto desbalance de carga, por ejemplo, un exceso de carga positiva. Dada la alta movilidad de los electrones, los mismos acudirán a la región donde se produjo el desbalance intentando restaurar la neutralidad local de carga. Diremos que el exceso de carga positiva fue *apantallado* por los electrones. De hecho, cada electrón del gas es una fuente de desbalance de carga. Polariza a los electrones vecinos, que tienden a evitarlo. En la aproximación de Thomas-Fermi (que supone que la perturbación introducida en la densidad de carga es aproximadamente constante para distancias del orden del espaciado interatómico), el resultado neto, de ser el apantallamiento totalmente exitoso, será que podremos pensar a los electrones del gas como partículas con interacciones

efectivas de corto alcance (en vez del largo alcance de las interacciones coulombianas) dadas por:

$$U^{eff}(r) = \frac{e^2 e^{-k_{TF}r}}{r}, \quad (\text{A.5})$$

donde  $k_{TF} = \sqrt{\frac{6\pi\eta e^2}{\epsilon_F}}$  y su inversa  $\lambda_{TF} = \frac{1}{k_{TF}}$  es la distancia mínima a partir de la cual el apantallamiento es efectivo.

### A.2.2. Oscilaciones colectivas

Cuando los electrones se dirigen a apantallar una cierta perturbación en la distribución de carga del gas, se pasarán de largo, volverán a dirigirse al lugar, volverán a pasarse de largo y, en definitiva, se establecerán en el gas oscilaciones colectivas o plasmones.

Dado el hamiltoniano de la Ec. (A.4), la fluctuación de densidad  $\rho_{\mathbf{k}}$  verificará la siguiente ecuación diferencial (ver [3], Ec. (3.65)):

$$\ddot{\rho}_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_i \left( \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_i}{m} + \frac{\hbar k^2}{2m} \right)^2 e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} - \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{4\pi e^2}{mq^2} \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}, \quad (\text{A.6})$$

donde, a la derecha de la igualdad, el primer término está asociado al movimiento térmico de electrones individuales (no interactuantes) mientras que las interacciones e-e están consideradas en el segundo término. Si separamos de la suma el caso  $\mathbf{q} = \mathbf{k}$ , la Ec. (A.6) puede escribirse así :

$$\begin{aligned} \ddot{\rho}_{\mathbf{k}} + \omega_P^2 \rho_{\mathbf{k}} &= -\frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_i \left( \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_i}{m} + \frac{\hbar k^2}{2m} \right)^2 e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \\ &\quad - \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} \frac{4\pi e^2}{mq^2} \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \rho_{\mathbf{q}}, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

donde  $\omega_P = \sqrt{4\pi e^2 \eta / m}$  es la llamada frecuencia de plasmón.

Los términos restantes con  $\mathbf{q} \neq \mathbf{k}$  corresponden, dada la definición de  $\rho_{\mathbf{k}}$ , a combinaciones de exponenciales con fases aleatorias que, esperamos, constituyan una corrección muy pequeña al ‘movimiento’ de los  $\rho_{\mathbf{k}}$ . Despreciar los efectos de este término es realizar en nuestro sistema la *aproximación de fase aleatoria* o RPA. Es importante observar que RPA incluye, en alguna medida, interacciones e-e, a través de  $\omega_P^2 \rho_{\mathbf{k}}$ .

Volviendo al primer término (único restante a la derecha), se puede ver que será del orden de  $k^2 v_F^2 \rho_{\mathbf{k}}$ , siendo  $v_F$  la velocidad en el borde de la esfera de Fermi. Por lo tanto, podremos despreciarlo cuando se verifique que

$$k^2 v_F^2 \ll \omega_P^2 \rightarrow k^2 \ll k_c^2 = \left( \frac{\omega_P}{v_F} \right)^2. \quad (\text{A.8})$$

En esta situación, la ecuación de movimiento para los  $\rho_{\mathbf{k}}$  es la de un oscilador armónico de frecuencia  $\omega_P$ . Siendo la frecuencia independiente de  $\mathbf{k}$ , esta oscilación se trasladará a la densidad  $\rho(\mathbf{r}, t)$ .

Resultará entonces que, en la aproximación RPA, el gas de electrones se excitará en forma colectiva (oscilación coherente) para fenómenos con  $k \ll k_c$  mientras que se comportará como un sistema de partículas esencialmente no interactuantes (*free electron gas*, *FEG*) si  $k \gg k_c$ . No habrá acoplamiento entre ambos tipos de excitaciones.

Finalmente, observemos que las energías necesarias para excitar estas oscilaciones colectivas son relativamente altas ( $\hbar\omega_P \sim 15\text{eV}$  para un metal típico) y a  $T = 0$  estos grados de libertad del gas estarán congelados. Sin embargo, el pasaje de un proyectil cargado a alta velocidad será capaz de excitar plasmones sin dificultad.

# Apéndice B

## Función de respuesta dieléctrica

### B.1. Perturbación que depende del tiempo

Consideremos una perturbación débil introducida en un gas de electrones por una carga de prueba  $\rho^{ext}$  que depende del tiempo (debida, por ejemplo, al pasaje de un proyectil). Tenemos que:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi [\rho^{ext}(\mathbf{r}, t) + \rho^{ind}(\mathbf{r}, t)] \rightarrow i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{E}} = 4\pi [\tilde{\rho}^{ext}(\mathbf{k}, \omega) + \tilde{\rho}^{ind}(\mathbf{k}, \omega)], \quad (\text{B.1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi \rho^{ext}(\mathbf{r}, t) \rightarrow i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{D}} = 4\pi \tilde{\rho}^{ext}(\mathbf{k}, \omega), \quad (\text{B.2})$$

donde las expresiones a la derecha son las transformadas de Fourier de las expresiones a la izquierda,  $\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ ,  $\tilde{\mathbf{E}} = \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, \omega)$  y  $\rho^{ind}$  es la densidad de carga inducida en el gas por la carga de prueba. Definiendo ahora el potencial en la forma habitual,

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi \rightarrow \tilde{\mathbf{E}} = -i\mathbf{k}\tilde{\phi}, \quad (\text{B.3})$$

y reemplazando en la Ec. (B.1) encontramos la ecuación de Poisson

$$-\nabla^2\phi = 4\pi [\rho^{ext}(\mathbf{r}, t) + \rho^{ind}(\mathbf{r}, t)] \rightarrow k^2\tilde{\phi} = 4\pi [\tilde{\rho}^{ext}(\mathbf{k}, \omega) + \tilde{\rho}^{ind}(\mathbf{k}, \omega)]. \quad (\text{B.4})$$

Usando ahora que el medio es lineal

$$\tilde{\mathbf{D}} = \epsilon(\mathbf{k}, \omega)\tilde{\mathbf{E}}, \quad (\text{B.5})$$

podemos reemplazar la Ec. (B.3) en la Ec. (B.2) y obtener

$$k^2 \epsilon(\mathbf{k}, \omega) \tilde{\phi} = 4\pi \tilde{\rho}^{ext}(\mathbf{k}, \omega), \quad (\text{B.6})$$

que nos lleva al resultado siguiente

$$\tilde{\phi}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{4\pi \tilde{\rho}^{ext}(\mathbf{k}, \omega)}{k^2 \epsilon(\mathbf{k}, \omega)} \rightarrow \tilde{\phi}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\tilde{\phi}^{ext}(\mathbf{k}, \omega)}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)}, \quad (\text{B.7})$$

siendo  $\phi^{ext}$  el potencial asociado a la carga de prueba. Es interesante notar que, en la última ecuación, se pone de manifiesto que la respuesta dieléctrica mide la efectividad del apantallamiento de la carga de prueba por el gas de electrones.

Análogamente a lo que ocurre con la densidad, el potencial puede expresarse como la siguiente suma:

$$\phi = \phi^{ext} + \phi^{ind}, \quad (\text{B.8})$$

y reemplazando en la Ec. (B.7) encontramos

$$\tilde{\phi}^{ind}(\mathbf{k}, \omega) = \left( \frac{1}{\epsilon(\mathbf{k}, \omega)} - 1 \right) \frac{4\pi}{k^2} \tilde{\rho}^{ext}(\mathbf{k}, \omega). \quad (\text{B.9})$$

Finalmente, combinando las Ecs. (B.6) y (B.4), se puede mostrar fácilmente que

$$(1 - \epsilon(\mathbf{k}, \omega)) \tilde{\phi}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{4\pi}{k^2} \tilde{\rho}^{ind}(\mathbf{k}, \omega), \quad (\text{B.10})$$

es decir que la respuesta dieléctrica está relacionada con la densidad de carga inducida en el gas de electrones por la perturbación.

Marquemos aquí que la única hipótesis hasta ahora es que el gas de electrones responde linealmente, Ec. (B.5).

## B.2. La respuesta dieléctrica de Lindhard

Consideremos un sólido descrito desde una aproximación de un electrón como la de Hartree. La densidad de carga  $\rho_e(\mathbf{r}, t)$  correspondiente a un electrón cualquiera del gas, puede expresarse en términos de su función de onda como sigue:

$$\begin{aligned} \rho_e(\mathbf{r}, t) &= -e\psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t), \\ \tilde{\rho}_e(\mathbf{k}, \omega) &= -\frac{e}{(2\pi)^2} \int \tilde{\psi}^*(\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \omega' - \omega) \tilde{\psi}(\mathbf{k}', \omega') d\mathbf{k}' d\omega'. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Para el caso del gas no perturbado, sabemos que, en la aproximación de Hartree+*jellium*, tendremos que:

$$\left. \begin{aligned} \psi_0(\mathbf{r}, t) &= \frac{e^{i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r} - \omega_0 t)}}{(2\pi)^{3/2}} \\ H_0 &= -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} \end{aligned} \right\} \rightarrow H_0 \psi_0(\mathbf{r}, t) = \underbrace{\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_e}}_{E_0 = \hbar\omega_0} \psi_0(\mathbf{r}, t). \quad (\text{B.12})$$

Introducimos ahora una perturbación  $V$  ( $H = H_0 + V$ ) asociada, por ejemplo, al pasaje de un proyectil cargado. La ecuación de Lippmann-Schwinger (Apéndice D, Ec. (D.5)) para la función de onda perturbada  $\psi^\pm(\mathbf{r}, t)$  del electrón es

$$\psi^\pm(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) + \int G_0^\pm(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') V(\mathbf{r}', t') \psi^\pm(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt', \quad (\text{B.13})$$

donde  $V$  es la energía potencial asociada a la interacción del proyectil con el electrón (Notemos que esta interacción no es coulombiana ya que ocurre embebida en el resto de los electrones del gas) y  $G_0^\pm(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$  es la función de Green que verifica

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0 \pm i0^+ \right) G_0^\pm(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'). \quad (\text{B.14})$$

Transformando Fourier en la Ec. (B.13) encontramos

$$\tilde{\psi}^\pm(\mathbf{k}, \omega) = \tilde{\psi}_0(\mathbf{k}, \omega) + \tilde{G}_0^\pm(\mathbf{k}, \omega) \int \tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega - \omega') \tilde{\psi}^\pm(\mathbf{k}', \omega') d\mathbf{k}' d\omega', \quad (\text{B.15})$$

siendo

$$\begin{aligned} \tilde{G}_0^\pm(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \pm i0^+}, \\ \tilde{\psi}_0(\mathbf{k}, \omega) &= \sqrt{2\pi} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \delta(\omega - \omega_0). \end{aligned}$$

Realizando una aproximación de Born de orden 1 en la carga del proyectil, pasamos de la Ec. (B.15) a

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}^\pm(\mathbf{k}, \omega) &= \tilde{\psi}_0(\mathbf{k}, \omega) + \tilde{G}_0^\pm(\mathbf{k}, \omega) \int \tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega - \omega') \tilde{\psi}_0(\mathbf{k}', \omega') d\mathbf{k}' d\omega', \\ &= \sqrt{2\pi} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \delta(\omega - \omega_0) + \sqrt{2\pi} \tilde{G}_0^\pm(\mathbf{k}, \omega) \tilde{V}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0, \omega - \omega_0). \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Si ahora reemplazamos la Ec. (B.16) en la Ec. (B.11), elegimos condiciones de contorno salientes, despreciamos términos de segundo grado en la energía potencial (consistente con Born 1), y usamos que  $V(\mathbf{r}, t)$  es real y por lo tanto  $\tilde{V}^*(-\mathbf{k}, -\omega) = \tilde{V}(\mathbf{k}, \omega)$ , encontramos que

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_e(\mathbf{k}, \omega) \approx & -\frac{e\delta(\mathbf{k})\delta(\omega)}{2\pi} - \frac{e\tilde{V}(\mathbf{k}, \omega)}{2\pi} \\ & \times \left[ \tilde{G}_0^+(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}, \omega_0 + \omega) + \tilde{G}_0^{*+}(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}, \omega_0 - \omega) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

A partir de la Ec. (B.17), podemos obtener una expresión para la densidad de carga correspondiente a *todos* los electrones del gas (en el estado fundamental). Sumamos como sigue:

$$\begin{aligned} \sum_{elec.s} \tilde{\rho}_e(\mathbf{k}, \omega) \approx & -\frac{eN\delta(\mathbf{k})\delta(\omega)}{2\pi} - \frac{e\tilde{V}(\mathbf{k}, \omega)}{2\pi} 2 \int \Theta(k_F - k_0) \\ & \left\{ \left[ \tilde{G}_0^+(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k}, \omega_0 + \omega) + \tilde{G}_0^{*+}(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}, \omega_0 - \omega) \right] \right\} d\mathbf{k}_0, \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

donde  $N$  es la cantidad total de electrones y en cada estado  $\mathbf{k}_0$  puede haber dos electrones con *spins* opuestos.

El primer término a la derecha en la Ec. (B.18), corresponde a una distribución uniforme de carga negativa en reposo que se anula con el fondo de carga positiva. El segundo no es otra cosa que la densidad de carga inducida  $\tilde{\rho}^{ind}(\mathbf{k}, \omega)$ . Tenemos entonces que:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}^{ind}(\mathbf{k}, \omega) \approx & -\frac{2e\tilde{V}(\mathbf{k}, \omega)}{(2\pi)^3} \int \Theta(k_F - k_0) \left\{ \left[ \frac{1}{\hbar\omega_0 - \frac{\hbar^2(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})^2}{2m_e} + (\hbar\omega + i0^+)} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{\hbar\omega_0 - \frac{\hbar^2(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k})^2}{2m_e} - (\hbar\omega + i0^+)} \right] \right\} d\mathbf{k}_0. \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Al reemplazar esta expresión en la Ec. (B.10), y usar que  $\tilde{V}(\mathbf{k}, \omega) = -e\tilde{\phi}(\mathbf{k}, \omega)$  obtenemos

$$\begin{aligned} \epsilon(\mathbf{k}, \omega) \approx & 1 - \frac{8\pi e^2}{k^2(2\pi)^3} \int \Theta(k_F - k_0) \left\{ \left[ \frac{1}{\hbar\omega_0 - \frac{\hbar^2(\mathbf{k}_0 + \mathbf{k})^2}{2m_e} + (\hbar\omega + i0^+)} \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{\hbar\omega_0 - \frac{\hbar^2(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k})^2}{2m_e} - (\hbar\omega + i0^+)} \right] \right\} d\mathbf{k}_0, \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

que es la versión en continuo del resultado obtenido, por ejemplo, por Ritchie [72]. Esta es la respuesta dieléctrica de Lindhard para el gas de electrones [3, 65, 72]. Si realizamos la integración, llegamos a la siguiente expresión analítica:

$$\begin{aligned} \epsilon_L(\mathbf{k}, \omega) = & 1 + \frac{4e^2 m_e k_F}{\pi \hbar^2 k^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{k_F}{4k} \right. \\ & \times \left[ (1 - A^2) \ln \left| \frac{1 + A}{1 - A} \right| + (1 - B^2) \ln \left| \frac{1 + B}{1 - B} \right| \right] \left. \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

siendo

$$\begin{aligned} A &= \frac{k}{2k_F} + \frac{m_e}{\hbar^2 k_F k} (\hbar\omega + i0^+), \\ B &= \frac{k}{2k_F} - \frac{m_e}{\hbar^2 k_F k} (\hbar\omega + i0^+). \end{aligned}$$

Pasando a unidades atómicas (Apéndice C) podemos decir

$$\begin{aligned} \epsilon_L(\mathbf{k}, \omega) = & 1 + \frac{4k_F}{\pi k^2} \left\{ \frac{1}{2} + \frac{k_F}{4k} \right. \\ & \times \left[ (1 - A^2) \ln \left| \frac{1 + A}{1 - A} \right| + (1 - B^2) \ln \left| \frac{1 + B}{1 - B} \right| \right] \left. \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

con

$$\begin{aligned} A &= \frac{k}{2k_F} + \frac{\omega + i0^+}{k_F k}, \\ B &= \frac{k}{2k_F} - \frac{\omega + i0^+}{k_F k}. \end{aligned}$$

Esta respuesta dieléctrica resume el comportamiento del gas en la aproximación de Hartree+*jellium* ante una perturbación introducida por un proyectil cargado. Hay distintas formas de llegar a la Ec. (B.22). En particular, algunos autores obtienen este resultado a partir de la aproximación de fase aleatoria (RPA), presentada en el apéndice A. Dicho de otra manera, el modelo Hartree+*jellium*+Born1 es equivalente a la RPA.



# Apéndice C

## Definiciones elementales

### C.1. Unidades atómicas

En la teoría de física atómica es muy útil, a partir del sistema de unidades csg-gaussiano, adimensionalizar las ecuaciones de modo que sean independientes de las constantes fundamentales. Se definen así las *unidades atómicas*.

El radio atómico de Bohr  $a_0$  es una constante conocida. Su valor en unidades csg-gaussianas es

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} = 5.29 \cdot 10^{-9} \text{ cm (0.529 \AA)}, \quad (\text{C.1})$$

siendo  $m = 9.11 \cdot 10^{-28}$ gs y  $e = 4.8 \cdot 10^{-10}$ ues la masa y el módulo de la carga del electrón, respectivamente ( $1 \text{ (ues)}^2 = 1 \text{ dyn cm}^2$ ).

Pensemos en el operador de energía cinética  $K$ , a partir de la Ec. (C.1) tenemos

$$K = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} = -\frac{m e^2 a_0 \nabla^2}{2M}. \quad (\text{C.2})$$

Utilizando la masa electrónica como unidad de masa y el radio de Bohr como unidad de distancia podemos re-escribir la expresión anterior en función de las cantidades adimensionales  $M' = M/m$  y  $r' = r/a_0$ . Obtenemos:

$$K = -\frac{e^2 \nabla'^2}{a_0 2M'}, \quad (\text{C.3})$$

donde el operador  $\nabla'$  deriva respecto de  $r'$ .

Definiendo ahora como unidad de energía  $E_0$ , al doble de la energía de ionización del hidrógeno,

$$E_0 = \frac{e^2}{a_0} \approx 43.54 \cdot 10^{-12} \text{erg} (\approx 27.212 \text{ ev}) \rightarrow K' = -\frac{\nabla'^2}{2M'}, \quad (\text{C.4})$$

siendo  $K' = K/E_0$  y  $1 \text{ ev} = 1.6 \cdot 10^{-12} \text{erg}$ .

De igual manera para la energía potencial  $U$

$$U = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \rightarrow U' = \frac{Z_1 Z_2}{r'}, \quad (\text{C.5})$$

siendo  $Z_1 e$  y  $Z_2 e$  las cargas de las partículas que interactúan.

Definiremos entonces las unidades atómicas de la siguiente forma:

Unidad de distancia	radio de Bohr	$a_0$
Unidad de masa	masa del electrón	$m_e$
Unidad de carga	módulo de la carga del electrón	$e$
Unidad de energía	2.(energía de ionización del H)	$e^2/a_0$
Unidad de velocidad		$e/(a_0 m_e)^{1/2}$
etc..		

## C.2. Transformada de Fourier

En esta tesis, trabajamos con la transformada de Fourier definida del siguiente modo: Si el volumen de trabajo es finito (y supongamos que el intervalo de tiempo  $\Delta t$  también), entonces

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{\mathbf{k},\omega} &= \frac{1}{\sqrt{\Omega \Delta t}} \int_{-\Omega \Delta t} f(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} d\mathbf{r} dt, \\ f(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{\Omega \Delta t}} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{f}_{\mathbf{k},\omega} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

y cuando el volumen se hace infinito,

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\mathbf{r}, t) e^{-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} d\mathbf{r} dt, \\ f(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} d\mathbf{k} d\omega. \end{aligned} \quad (\text{C.7})$$

# Apéndice D

## Teoría de *Scattering*

### D.1. Formulación independiente del tiempo

#### D.1.1. Ecuación de Lippmann-Schwinger

Consideremos una situación en que un haz de partículas monoenergéticas de flujo constante incide sobre una región que contiene cierta cantidad de centros dispersores. El hamiltoniano del sistema puede escribirse así :

$$H = H_0 + V, \quad (\text{D.1})$$

donde  $H_0$  (hamiltoniano no perturbado) tiene autoestados  $\{|\psi_0\rangle\}$  y autovalores  $E$  conocidos tales que

$$H_0 |\psi_0\rangle = E |\psi_0\rangle, \quad (\text{D.2})$$

y  $V$  representa una perturbación (Notar que, en general  $V$  es un operador de energía potencial). Estamos interesados en resolver el sistema perturbado, para casos en los que no hay reordenamiento. Queremos hallar autoestados  $\{|\psi\rangle\}$  que verifiquen

$$H |\psi\rangle = (H_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (\text{D.3})$$

con iguales energías que las del sistema no perturbado. En principio se podría pensar, a partir de la Ec. (D.3), que los autoestados buscados cumplen que

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle + |\psi_0\rangle, \quad (\text{D.4})$$

dato que buscamos que cuando  $V \rightarrow 0$ , se cumpla  $|\psi\rangle \rightarrow |\psi_0\rangle$ . Sin embargo, la Ec. (D.4) incluye un operador singular y no tiene sentido salvo que digamos cómo tratar esa singularidad. La versión bien definida de la Ec. (D.4) es la siguiente:

$$\begin{aligned} |\psi^\pm\rangle &= |\psi_0\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i0^+} V |\psi^\pm\rangle, \\ &|\psi_0\rangle + G_0^\pm V |\psi^\pm\rangle, \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

donde agregamos a la energía una muy pequeña parte imaginaria y reconocemos entonces que  $G_0^\pm = 1/(E - H_0 \pm i0^+)$  no es otro que el operador de Green. Esta es la *ecuación de Lippmann-Schwinger* en la cual los estados  $|\psi^+\rangle$  corresponden a soluciones con condiciones de contorno salientes mientras que los estados  $|\psi^-\rangle$  representan soluciones con condiciones de contorno entrantes.

### D.1.2. Series de Born

Análogamente al operador de Green no perturbado  $G_0^\pm$ , podemos definir el operador  $G^\pm = (E - H \pm i0^+)^{-1}$ . Dado que ambos operadores son inversibles, hagamos  $P \equiv E - H + i0^+$  y  $Q \equiv E - H_0 + i0^+$ . Es fácil ver que se cumplen las siguientes identidades:

$$\begin{aligned} P^{-1} &= Q^{-1} + P^{-1}(Q - P)Q^{-1}, \\ &Q^{-1} + Q^{-1}(Q - P)P^{-1}, \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

y por lo tanto

$$\begin{aligned} G^+ &= G_0^+ + G^+ V G_0^+, \\ &G_0^+ + G_0^+ V G^+. \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Si ahora tomamos alguna de las Ecs. (D.7) y la remplazamos en si misma una cantidad de veces, encontramos

$$G^+ = G_0^+ + G_0^+ V G_0^+ + G_0^+ V G_0^+ V G_0^+ + \dots \quad (\text{D.8})$$

De igual forma podríamos haber trabajado con  $G^-$  y  $G_0^-$  y obtener

$$G^- = G_0^- + G_0^- V G_0^- + G_0^- V G_0^- V G_0^- + \dots \quad (\text{D.9})$$

Estos desarrollos se conocen como *series de Born* para los operadores  $G^+$  y  $G^-$ . La misma idea podemos aplicar a los estados  $|\psi^\pm\rangle$  en la ecuación de Lippmann-Schwinger. Las series de Born para los estados resultan

$$|\psi^+\rangle = |\psi_0\rangle + G_0^+ V |\psi_0\rangle + G_0^+ V G_0^+ V |\psi_0\rangle + \dots, \quad (\text{D.10})$$

$$|\psi^-\rangle = |\psi_0\rangle + G_0^- V |\psi_0\rangle + G_0^- V G_0^- V |\psi_0\rangle + \dots \quad (\text{D.11})$$

Por último, el operador de transición  $T$  se define así :

$$T |\psi_0\rangle = V |\psi^+\rangle, \quad (\text{D.12})$$

y usando la Ec. (D.10) encontramos que la serie de Born para este operador es

$$T = V + V G_0^+ V + V G_0^+ V G_0^+ V + \dots = V + V G_0^+ T. \quad (\text{D.13})$$

Es importante observar que, para los casos de nuestro interés, la serie de Born converge. De hecho, se prueba que a altas energías converge a su primer término.

## D.2. Formulación dependiente del tiempo

La suposición de un haz de ondas planas de flujo constante representa una idealización, dado que los experimentos son siempre colimados y se llevan a cabo en intervalos finitos de tiempo. Es más realista describir las interacciones entre sistemas atómicos realizando un seguimiento temporal de los mismos.

Podemos separar cualquier proceso de colisión en tres momentos. En el primero, el proyectil y el blanco son preparados en forma aislada; en el segundo se produce la interacción y, en el tercero, los productos de la interacción son observados por algún mecanismo de medición. Preparar los estados iniciales implica formar paquetes de onda que localizan tanto al proyectil como al blanco de modo que tenga sentido hablar, por ejemplo, de la distancia entre ellos tanto en la etapa inicial como en la final. La interacción en la segunda etapa modificará la distribución de momentos de cada paquete y el interés es estudiar esta nueva distribución cuando la interacción termina. En el planteo teórico, pensaremos que los sistemas se preparan en  $t \rightarrow -\infty$ , que la interacción ocurre en un intervalo de tiempo  $-t_c < t < t_c$  y que la medición se lleva a cabo en  $t \rightarrow +\infty$ . Además, por simplicidad, trabajaremos con estados puros en vez

de con paquetes de onda. Es importante tener en cuenta que la justificación última de los resultados que presentaremos es que los mismos resultados se encuentran a partir de desarrollos más complicados pero conceptualmente más correctos que involucran paquetes de onda.

### D.2.1. La representación de interacción

En la representación de Schrödinger, la evolución del estado de un sistema está dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (\text{D.14})$$

de donde se obtiene que

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle. \quad (\text{D.15})$$

Separando el hamiltoniano según  $H = H_0 + V$ , el estado en la representación de interacción es

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{iH_0 t} |\psi(t)\rangle, \quad (\text{D.16})$$

y se puede ver que verifica la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = V(t) |\psi_I(t)\rangle, \quad (\text{D.17})$$

con  $V(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar}$ . Es decir que en esta representación tanto los estados como el operador  $V(t)$  dependen explícitamente del tiempo y en ausencia de interacciones los estados permanecen invariantes.

El operador de evolución temporal, definido según

$$|\psi_I(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle, \quad (\text{D.18})$$

cumple que  $U(t, t_0) = e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} e^{-iH_0 t_0/\hbar}$  y verifica la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = V(t) U(t, t_0). \quad (\text{D.19})$$

### D.2.2. Probabilidad de transición

La evolución del sistema desde su estado inicial hasta su estado final se representa así:

$$|\psi_I(+\infty)\rangle = \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow +\infty}} U(t, t_0) |\psi_I(-\infty)\rangle, \quad (\text{D.20})$$

donde se observa que  $|\psi_I(-\infty)\rangle = |\psi\rangle$  siendo este último el estado en la representación de Heisenberg y lo mismo ocurre en el estado final.

La amplitud de probabilidad de que el sistema evolucione de cierto estado  $|\psi_i\rangle$  a cierto estado  $|\psi_f\rangle$  está dada por

$$S_{if} = \lim_{\substack{t_0 \rightarrow -\infty \\ t \rightarrow \infty}} \langle \psi_f | U(t, t_0) | \psi_i \rangle. \quad (\text{D.21})$$

Sin embargo, tiene más sentido preguntarse por la probabilidad por unidad de tiempo de que ocurra esta transición. La misma se obtiene a partir de

$$\frac{dP_{i \rightarrow f}}{dt} = \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\langle \psi_f | U(t, t_0) | \psi_i \rangle|^2, \quad (\text{D.22})$$

y haciendo uso de las definiciones previas esta expresión puede transformarse en

$$\frac{dP_{i \rightarrow f}}{dt} = \frac{2}{\hbar} \text{Im}(T_{ii}) \delta_{if} + \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_f) |T_{if}|^2, \quad (\text{D.23})$$

siendo  $T_{if} = \langle \psi_f | T | \psi_i \rangle$  los elementos de matriz del operador de transición.

Este apéndice está basado en las referencias [109, 120, 121].



# Apéndice E

## Serie de Born e interacción efectiva

Vamos a pensar en el sistema Proyectil+sólido+ $e_1$  (Bloch) y a trabajar en un formalismo independiente del tiempo. El sólido, salvo en lo que a  $e_1$  respecta, será descrito dentro de la aproximación de Hartree+*jellium* y consideraremos transiciones en las que solamente modifican su estado el proyectil y  $e_1$ .

En los estados inicial y final, el proyectil y el par sólido+ $e_1$  ya no interactúan entre sí, de modo que los electrones del sólido son descritos en esos estados como electrones libres (recordemos que las interacciones con el fondo de carga positiva compensan exactamente a las interacciones entre electrones). Es decir que, proyectando en el espacio  $\{\langle \mathbf{X} | \}$ , de coordenadas espaciales, tenemos que

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{X} | I \rangle &= \frac{e^{i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{R}}}{(2\pi)^{3/2}} \xi_i(\mathbf{r}_1) \prod_{j \geq 2} \frac{e^{i\mathbf{k}_{j i} \cdot \mathbf{r}_j}}{(2\pi)^{3/2}}, \\ \langle \mathbf{X} | F \rangle &= \frac{e^{i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{R}}}{(2\pi)^{3/2}} \xi_f(\mathbf{r}_1) \prod_{j \geq 2} \frac{e^{i\mathbf{k}_{j f} \cdot \mathbf{r}_j}}{(2\pi)^{3/2}},\end{aligned}\tag{E.1}$$

donde las funciones de onda  $\xi(\mathbf{r}_1)$  no son ondas planas pues  $e_1$  es un electrón casi libre (o electrón de Bloch).

El paso del proyectil perturba el sistema. Los electrones se acomodan de forma que sus interacciones ya no son compensadas por el fondo y el resultado es la aparición de potenciales inducidos. Los términos de energía potencial, consecuencia de la perturbación generada por el proyectil son

$$V = V_{P1} + \sum_{j \geq 2} V_{Pj} + \sum_{j \geq 2} V_{1j} + \frac{1}{2} \sum_{j \geq 2} \sum'_{l \geq 2} V_{lj},\tag{E.2}$$

donde la suma primada indica  $j \neq l$ .

La serie de Born para la matriz de transición es

$$T_{if} = \langle F|T|I \rangle = \langle F|V + VG_0^+V + VG_0^+VG_0^+V + \dots|I \rangle, \quad (\text{E.3})$$

siendo  $G_0^+ = [E - H_0 + i0^+]^{-1}$  la función de Green para el sistema no perturbado.

A orden cero en la interacción entre electrones, tenemos que la matriz de transición  $T_{if}^{(0)}$  es

$$T_{if}^{(0)} = \langle F|V_{P1}|I \rangle = \int \int \frac{e^{-i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{R}}}{(2\pi)^{2/3}} \xi_f^*(\mathbf{r}_1) V_{P1}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}) \frac{e^{i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{R}}}{(2\pi)^{2/3}} \xi_i(\mathbf{r}_1) d\mathbf{R} d\mathbf{r}_1, \quad (\text{E.4})$$

donde usamos que al ser la interacción independiente del gas, las funciones de onda inicial y final para el mismo se integran trivialmente (obteniéndose las deltas de conservación del estado  $\prod_{j \geq 2} \delta(\mathbf{k}_{jf} - \mathbf{k}_{ji})$ , que se omiten por simplicidad). La interacción  $V_{P1}$  es puramente coulombiana, es decir que, en unidades atómicas,

$$V_{P1}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}) = -\frac{Z_P}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}|} \quad \rightarrow \quad \tilde{V}_{P1}(\mathbf{g}) = -\frac{4\pi Z_P}{(2\pi)^{3/2} g^2}, \quad (\text{E.5})$$

siendo el término a la derecha, la transformada de Fourier del término de la izquierda. Trabajamos sobre la Ec. (E.4) haciendo

$$T_{if}^{(0)} = \int \int \int \frac{e^{-i\mathbf{K}_f \cdot \mathbf{R}}}{(2\pi)^{2/3}} \xi_f^*(\mathbf{r}_1) \frac{\tilde{V}_{P1}(\mathbf{g})}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{g} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{R})} \frac{e^{i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{R}}}{(2\pi)^{2/3}} \xi_i(\mathbf{r}_1) d\mathbf{R} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{g}, \quad (\text{E.6})$$

y al resolver las integrales encontramos

$$T_{if}^{(0)} = \frac{\tilde{V}_{P1}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{2/3}} \langle \xi_f | e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1} | \xi_i \rangle, \quad (\text{E.7})$$

donde  $\mathbf{p} = \mathbf{K}_i - \mathbf{K}_f$  es el momento cedido al electrón por el proyectil.

El termino siguiente de la serie es  $T_{if}^{(1)} = \langle F|VG_0^+V|I \rangle$ . A primer orden en  $V_P$ , los únicos términos de esta serie consistentes con el requerimiento de que solamente cambien de estado el proyectil y  $e_1$  son:

$$T_{if}^{(1)} \approx \sum_{j \geq 2} \langle F|V_{Pj}G_0^+V_{1j}|I \rangle + \langle F|V_{1j}G_0^+V_{Pj}|I \rangle. \quad (\text{E.8})$$

Empezamos considerando el primer término

$$\langle F|V_{Pj}G_0^+V_{1j}|I \rangle = \int \int \langle F|V_{Pj}|\alpha_2 \rangle \langle \alpha_2|G_0^+|\alpha_1 \rangle \langle \alpha_1|V_{1j}|I \rangle d\alpha_1 d\alpha_2, \quad (\text{E.9})$$

donde  $|\alpha_1\rangle$  y  $|\alpha_2\rangle$  son elementos de una base completa de estados intermedios para todo el sistema ( $3(N+2)$  dimensiones) de formato análogo a  $|I\rangle$  y  $|F\rangle$ .

El hamiltoniano no perturbado  $H_0$ , en la representación espacial  $\{\langle \mathbf{X} | \}$  es de la forma

$$H_0 = -\frac{\nabla_{\mathbf{R}}^2}{2M_P} + H_1 - \sum_{j \geq 2} \frac{\nabla_{\mathbf{r}_j}^2}{2}, \quad (\text{E.10})$$

con  $H_1$  tal que  $H_1 \xi(\mathbf{r}_1) = \varepsilon_1 \xi(\mathbf{r}_1)$ . Por lo tanto, el factor de la Ec. (E.9) que involucra a la función de Green es

$$\begin{aligned} \langle \alpha_2 | G_0^+ | \alpha_1 \rangle &= \int \alpha_2^*(\mathbf{X}) \frac{1}{E - H_0 + i0^+} \alpha_1(\mathbf{X}) d\mathbf{X}, \\ &= \int \alpha_2^*(\mathbf{X}) \frac{1}{E - \underbrace{\left( \frac{K_{\alpha_1}^2}{2M_P} + \varepsilon_{\alpha_1} + \sum_{l \geq 2} \frac{k_{\alpha_1, l}^2}{2} \right)}_{E_{\alpha_1}} + i0^+} \alpha_1(\mathbf{X}) d\mathbf{X}, \\ &= \frac{1}{E - E_{\alpha_1} + i0^+} \langle \alpha_2 | \alpha_1 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

y reemplazando en la Ec. (E.9) tenemos

$$\langle F | V_{Pj} G_0^+ V_{1j} | I \rangle = \int \langle F | V_{Pj} | \alpha \rangle \frac{1}{E - E_{\alpha} + i0^+} \langle \alpha | V_{1j} | I \rangle d\alpha, \quad (\text{E.12})$$

donde integramos en  $\alpha_2$  e hicimos  $\alpha = \alpha_1$ .

Los factores que involucran interacciones se tratan análogamente a  $T_{if}^{(0)}$ . Encontramos que

$$\begin{aligned} \langle F | V_{Pj} G_0^+ V_{1j} | I \rangle &= \int \langle F^{-\{j, P\}} | \alpha^{-\{j, P\}} \rangle \langle \alpha^{-\{j, 1\}} | I^{-\{j, 1\}} \rangle \frac{\tilde{V}_{Pj}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \\ &\quad \times \delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{jf} + \mathbf{k}_{j\alpha}) \frac{1}{E - E_{\alpha} + i0^+} \frac{\tilde{V}_{j1}(-\mathbf{k}_{j\alpha} + \mathbf{k}_{ji})}{(2\pi)^{3/2}} \\ &\quad \times \langle \xi_{\alpha} | e^{i(-\mathbf{k}_{j\alpha} + \mathbf{k}_{ji}) \cdot \mathbf{r}_1} | \xi_i \rangle d\alpha, \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

donde los factores  $\langle F^{-\{j,P\}} | \alpha^{-\{j,P\}} \rangle$  y  $\langle \alpha^{-\{j,1\}} | I^{-\{j,1\}} \rangle$  no involucran a los estados de las partículas indicadas en los supraíndices e implican que las integrales para todas las partículas distintas de  $\{P, 1, j\}$  son triviales y resultan en  $\delta$ 's de conservación de los estados respectivos. También pueden integrarse el estado intermedio del proyectil  $|\alpha_P\rangle$  y de  $e_1 |\alpha_1\rangle$  (No confundir con los estados intermedios  $\alpha_1$  y  $\alpha_2$ ) obteniéndose que

$$|\alpha_P\rangle = |I_P\rangle, \quad |\alpha_1\rangle = |F_1\rangle. \quad (\text{E.14})$$

En cuanto a la integral restante, correspondiente al electrón  $j$ , se resuelve utilizando el factor  $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{k}_{jf} + \mathbf{k}_{j\alpha})$ .

Finalmente, para el factor proveniente de la función de Green, tenemos que

$$\begin{aligned} E - E_\alpha + i0^+ &= \varepsilon_{1i} + \frac{K_i^2}{2M_P} + \sum_{l \geq 2} \frac{k_{li}^2}{2} - \left( \varepsilon_{1\alpha} + \frac{K_\alpha^2}{2M_P} + \sum_{l \geq 2} \frac{k_{l,\alpha}^2}{2} \right) + i0^+, \\ &= \varepsilon_{1i} - \varepsilon_{1f} + \frac{k_{ji}^2}{2} - \frac{(\mathbf{k}_{ji} - \mathbf{p})^2}{2} + \frac{K_i^2}{2M_P} - \frac{K_i^2}{2M_P} + i0^+, \\ &= \frac{k_{ji}^2}{2} - \frac{(\mathbf{k}_{ji} - \mathbf{p})^2}{2} - \omega + i0^+, \end{aligned} \quad (\text{E.15})$$

donde usamos que  $\mathbf{k}_{li} = \mathbf{k}_{l,Int}$  para todo  $l \neq j$ , que  $\mathbf{k}_{jf} = \mathbf{k}_{ji}$  y que  $E = E_i = E_f$  tomándose  $E = E_i$  por simplicidad.

El resultado final para el primer término de la Ec. (E.8) es

$$\langle F | V_{Pj} G_0^+ V_{1j} | I \rangle = \frac{\tilde{V}_{Pj}(\mathbf{p}) \tilde{V}_{j1}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2} (2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\frac{k_{ji}^2}{2} - \frac{(\mathbf{k}_{ji} - \mathbf{p})^2}{2} - \omega + i0^+} \langle \xi_f | e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1} | \xi_i \rangle. \quad (\text{E.16})$$

En forma análoga, encontramos, para el segundo término de esa ecuación

$$\langle F | V_{1j} G_0^+ V_{Pj} | I \rangle = \frac{\tilde{V}_{Pj}(\mathbf{p}) \tilde{V}_{j1}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2} (2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\frac{k_{ji}^2}{2} - \frac{(\mathbf{k}_{ji} + \mathbf{p})^2}{2} + \omega + i0^+} \langle \xi_f | e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1} | \xi_i \rangle, \quad (\text{E.17})$$

por lo que el resultado final para  $T_{if}^{(1)}$  es

$$\begin{aligned}
T_{if}^{(1)} &= \langle F | V G_0^+ V | I \rangle, \\
&\approx \frac{\tilde{V}_P(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \langle \xi_f | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1} | \xi_i \rangle \\
&\quad \times \underbrace{\sum_{j \geq 2} \frac{\tilde{V}_{j1}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \left[ \frac{1}{\frac{k_{ji}^2}{2} - \frac{(\mathbf{k}_{ji} + \mathbf{p})^2}{2} + \omega + i0^+} + \frac{1}{\frac{k_{ji}^2}{2} - \frac{(\mathbf{k}_{ji} - \mathbf{p})^2}{2} - \omega + i0^+} \right]}_x,
\end{aligned} \tag{E.18}$$

donde usamos que  $\tilde{V}_{Pj}(\mathbf{p}) = \tilde{V}_P(\mathbf{p})$  ya que es igual para todos los  $j$ .

Si continuamos calculando los términos de órdenes superiores de la Ec. (E.3), encontramos que

$$\begin{aligned}
T_{if} &\approx \frac{\tilde{V}_P(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \langle \xi_f | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1} | \xi_i \rangle (1 + x + x^2 + \dots), \\
&\approx \frac{\tilde{V}_P(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \langle \xi_f | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1} | \xi_i \rangle \frac{1}{1 - x},
\end{aligned} \tag{E.19}$$

y como, sumando sobre estados orbitales  $|\mathbf{k}\rangle$  en vez de sobre electrones  $j$ , tenemos que

$$x = 2 \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ k \leq k_F}} \frac{4\pi}{p^2 (2\pi)^{3/2}} \left[ \frac{1}{\frac{k_{ji}^2}{2} - \frac{(\mathbf{k}_{ji} + \mathbf{p})^2}{2} + \omega + i0^+} + \frac{1}{\frac{k_{ji}^2}{2} - \frac{(\mathbf{k}_{ji} - \mathbf{p})^2}{2} - \omega + i0^+} \right], \tag{E.20}$$

resulta que la Ec. (E.19) es equivalente a (a menos del signo de uno de los  $i0^+$ , como indica Ritchie [72])

$$T_{if} \approx \frac{\tilde{V}_P(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \frac{\langle \xi_f | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1} | \xi_i \rangle}{\epsilon_L(p, \omega)} = \frac{T_{if}^{(0)}}{\epsilon_L(p, \omega)} = \frac{\tilde{V}_P^{eff}(\mathbf{p})}{(2\pi)^{3/2}} \langle \xi_f | e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_1} | \xi_i \rangle, \tag{E.21}$$

consistentemente con la Ec. (B.7). Notemos que la Ec. (E.21) es el resultado que citamos para obtener la Ec. (3.9).

Para terminar, observamos que con un desarrollo completamente análogo, se llega a la Ec. (4.9).



# Apéndice F

## Estructuras cristalinas

### F.1. Redes de Bravais

Un concepto fundamental para la descripción de cualquier sólido cristalino es el de *Red de Bravais* [106, 110]. Con él nos referimos a la forma periódica en que están organizados los elementos que forman un cristal. Estos elementos pueden ser átomos, grupos de átomos, moléculas, iones, etc.

Definición: Una red de Bravais es un arreglo infinito de puntos discretos y geométricamente equivalentes.

Dicho de otro modo, una red de Bravais es el conjunto de puntos  $\mathbf{R}$  de la forma

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 = (n_1, n_2, n_3), \quad (\text{F.1})$$

con  $n_1$ ,  $n_2$  y  $n_3$  números enteros y  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  y  $\mathbf{a}_3$  vectores cualesquiera, linealmente independientes, a los que llamamos vectores primitivos de la red de Bravais.

En particular, observamos que podemos identificar el origen de coordenadas con el punto de la red  $\mathbf{R} = 0\mathbf{a}_1 + 0\mathbf{a}_2 + 0\mathbf{a}_3 = (0, 0, 0)$ .

Las cuatro redes tridimensionales más comunes son la cúbica simple (SC), la cúbica de cuerpo centrado (BCC), la cúbica de caras centradas (FCC) y la hexagonal (Hex) que presentamos en los siguientes ejemplos.

Ejemplo 1: En la Fig. F.1 se muestra una red cúbica simple (SC) de lado  $a$  que

podemos generar a partir del siguiente conjunto de vectores:

$$\mathbf{a}_1 = a \hat{x}, \quad \mathbf{a}_2 = a \hat{y}, \quad \mathbf{a}_3 = a \hat{z}, \quad (\text{F.2})$$

donde el origen,  $\mathbf{R} = (0, 0, 0)$ , lo tomamos, por ejemplo, en el punto central. A la cantidad  $a$  se la conoce como constante de red.

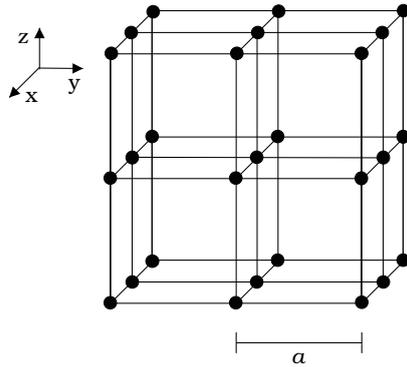


Figura F.1: Red cúbica simple (SC) con constante de red  $a$ .

Ejemplo 2: En la Fig. F.2 se muestra una red cúbica de cuerpo centrado (BCC) de lado  $a$ . Un conjunto posible de vectores con los que podemos generar esta red es

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}\{-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}\}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\{\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}\}, \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}\{\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}\}, \quad (\text{F.3})$$

donde nuevamente tomamos como origen el punto central.

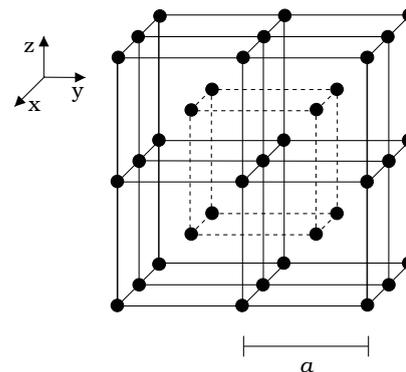


Figura F.2: Red cúbica de cuerpo centrado (BCC) con constante de red  $a$ .

Ejemplo 3: En la figura F.3 se muestra una red cúbica de caras centradas (FCC) de lado  $a$ . Un conjunto posible de vectores con los que podemos generar esta red es

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}\{\hat{y} + \hat{z}\}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\{\hat{x} + \hat{z}\}, \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}\{\hat{x} + \hat{y}\}, \quad (\text{F.4})$$

donde, una vez más, tomamos como origen el punto central.

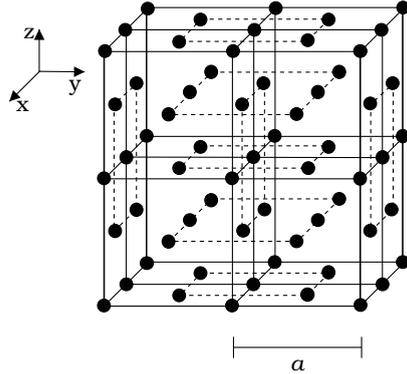
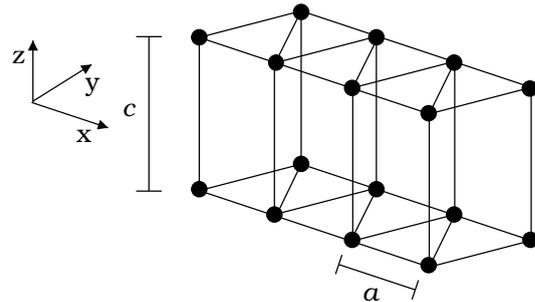


Figura F.3: Red cúbica de caras centradas (FCC) con constante de red  $a$ .

Ejemplo 4: En la figura F.4 se muestra una red hexagonal (Hex). Los triángulos en el plano  $xy$  son equiláteros de lado  $a$ . Podemos pensar una red hexagonal como un apilamiento de redes bidimensionales. La distancia entre los planos es  $c$ . Un conjunto posible con el que podemos generar esta red es

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{x}, \quad \mathbf{a}_2 = a\left\{\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y}\right\}, \quad \mathbf{a}_3 = c\hat{z}. \quad (\text{F.5})$$

Figura F.4: Red hexagonal (Hex) con parámetros  $a$  y  $c$ .



## F.2. Estructura cristalina: Redes con base

Dado un cristal físico, es posible que cada punto de la red de Bravais subyacente corresponda a dos o más elementos (átomos, iones, etc..) del cristal. En estos casos, el

núcleo que desplazaremos, siguiendo las combinaciones lineales de los vectores primitivos (Ec. F.1), será cierto conjunto de elementos en posiciones relativas determinadas. Diremos entonces que tenemos una *red con base*. Cuando hablamos de la estructura cristalina de algún sólido, nos referimos a su red de Bravais junto con una descripción del arreglo de elementos que corresponden a cada sitio de la misma.

Encontramos un ejemplo de red con base en la estructura HCP, formada por dos redes hexagonales interpenetradas, desplazadas una respecto de la otra en  $\mathbf{a}_0 = \frac{\mathbf{a}_1}{3} + \frac{\mathbf{a}_2}{3} + \frac{\mathbf{a}_3}{2}$ . En la Fig. F.5 se ilustra esta estructura. A cada punto de la red de Bravais corresponden dos puntos del cristal (en la figura, un punto negro y un punto gris) ubicados en  $\mathbf{R}$  y en  $\mathbf{R} + \mathbf{a}_0$ , respectivamente.

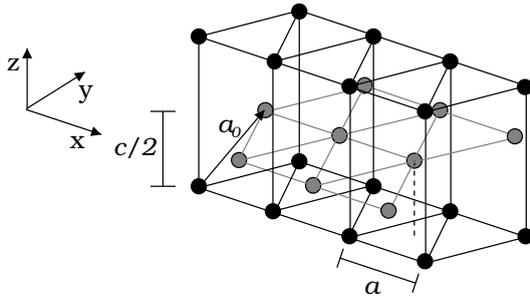


Figura F.5: Estructura HCP (Hex+base). Los colores diferentes (gris y negro) son solamente para claridad del dibujo.

### F.3. Estructura cristalina y constantes de red para los elementos utilizados

En la Tab. F.1 se muestran las estructuras cristalinas y las constantes de red para los elementos utilizados en esta tesis.

	Estructura cristalina	Constantes de red ( $a/c$ )	Refs.
Al	FCC	$a = 7.66 \text{ u.a.} / -$	[106]
Mg	HCP	$a = 6.05 \text{ u.a.} / c = 9.8 \text{ u.a.}$	[86, 106]
Na	BCC	$a = 8.00 \text{ u.a.} / -$	[106]
K	BCC	$a = 9.90 \text{ u.a.} / -$	[106]

Tabla F.1: Estructuras cristalinas y constantes de red para los elementos utilizados.

## F.4. La red recíproca

Dadas una onda plana y una red de Bravais (formada por puntos  $\mathbf{R}$ ), llamaremos *red recíproca* (de la red de Bravais) al conjunto de vectores de onda  $\mathbf{G}$  para los cuales coinciden los períodos de ambas, es decir

$$e^{i\mathbf{G}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}. \quad (\text{F.6})$$

Es fácil mostrar que la red recíproca es a su vez una red de Bravais, cuyos vectores primitivos pueden obtenerse a partir de los correspondientes a la *red directa* (i.e. la red original formada por los puntos  $\mathbf{R}$ ) como sigue

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_3 \cdot (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}. \quad (\text{F.7})$$

Resulta evidente de las definiciones previas que la red recíproca de la red recíproca existe y no es otra que la red directa.

A partir de las fórmulas (F.7) obtenemos que una base para la red recíproca de la red SC del ejemplo 1, puede ser el conjunto de vectores

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{x}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{y}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \hat{z}, \quad (\text{F.8})$$

es decir que la red recíproca de una SC de lado  $a$  es otra SC de lado  $\frac{2\pi}{a}$ .

De igual manera, la red recíproca de la red BCC presentada en el ejemplo 2, es generada por el conjunto de vectores

$$\mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2} \{\hat{y} + \hat{z}\}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2} \{\hat{x} + \hat{z}\}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2} \{\hat{x} + \hat{y}\}, \quad (\text{F.9})$$

que corresponde a una base de una red FCC de lado  $\frac{4\pi}{a}$ . A partir de este resultado, es fácil ver que la recíproca de una FCC de lado  $a$  será una BCC de lado  $\frac{4\pi}{a}$ . Podemos generar esta última con el conjunto de vectores

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2} \{-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}\}, & \mathbf{b}_2 &= \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2} \{\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}\}, \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{4\pi}{a} \frac{1}{2} \{\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}\}. \end{aligned} \quad (\text{F.10})$$

Finalmente, para una red Hex como la presentada en el ejemplo 4, encontramos que la red recíproca, que podemos construir a partir de los vectores

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a \operatorname{sen}(-\frac{\pi}{3})} (\operatorname{sen}(-\frac{\pi}{3})\hat{x} + \operatorname{cos}(-\frac{\pi}{3})\hat{y}), \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a \operatorname{sen}(\frac{\pi}{3})}, & \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi}{c} \hat{z}, \end{aligned} \quad (\text{F.11})$$

corresponde a una red Hex rotada  $-30^\circ$ , de altura  $\frac{2\pi}{c}$  y lado  $\frac{2\pi}{a \operatorname{sen}(\frac{\pi}{3})}$ .



# Apéndice G

## Potenciales Modelo

### G.1. Teoría

Los potenciales modelo, desarrollados por Abarenkov *et al.* [89–98], buscan describir el potencial efectivo que siente un electrón de las capas de valencia en el interior de un metal. Basándose en el método del defecto cuántico, estos autores reemplazan el potencial profundo de los iones (núcleos + elec. de las capas internas) por constantes que dependen de mediciones experimentales que se introducen en instancias iniciales del cálculo. Es decir que hacemos:

$$V_M = \begin{cases} -\sum A_l P_l & r < R_M \\ -Z/r & r > R_M \end{cases}, \quad (\text{G.1})$$

donde  $R_M$  es un parámetro a determinar,  $P_l$  es un operador de proyección que selecciona la componente de la función de onda con momento angular  $l$ ,  $Z$  es la valencia del ión y los parámetros  $A_l$  se determinan a partir de ajustes sobre valores espectroscópicos, observados para los iones aislados. Sobre esta expresión elemental se agregan diversas correcciones para incluir la presencia del gas de electrones de conducción y efectos de no localidad debidos a los  $P_l$ .

Los detalles del cálculo no se discuten en este apéndice. Pueden encontrarse explicaciones bien detalladas en las referencias mencionadas. Nosotros nos limitamos a mostrar, en forma gráfica, los resultados que se obtienen, y a utilizarlos como se explica en la sección siguiente.

## G.2. Resultados

En la Fig. G.1 se presentan las transformadas de los potenciales modelo para los elementos utilizados en esta tesis. Los puntos corresponden a los resultados obtenidos por Animalu *et al.* [92] y reproducidos por Harrison [94] en una tabla de valores  $\{q/(2k_F), V_q\}$  con  $V_q \equiv \tilde{V}/\sqrt{\Omega}$ .

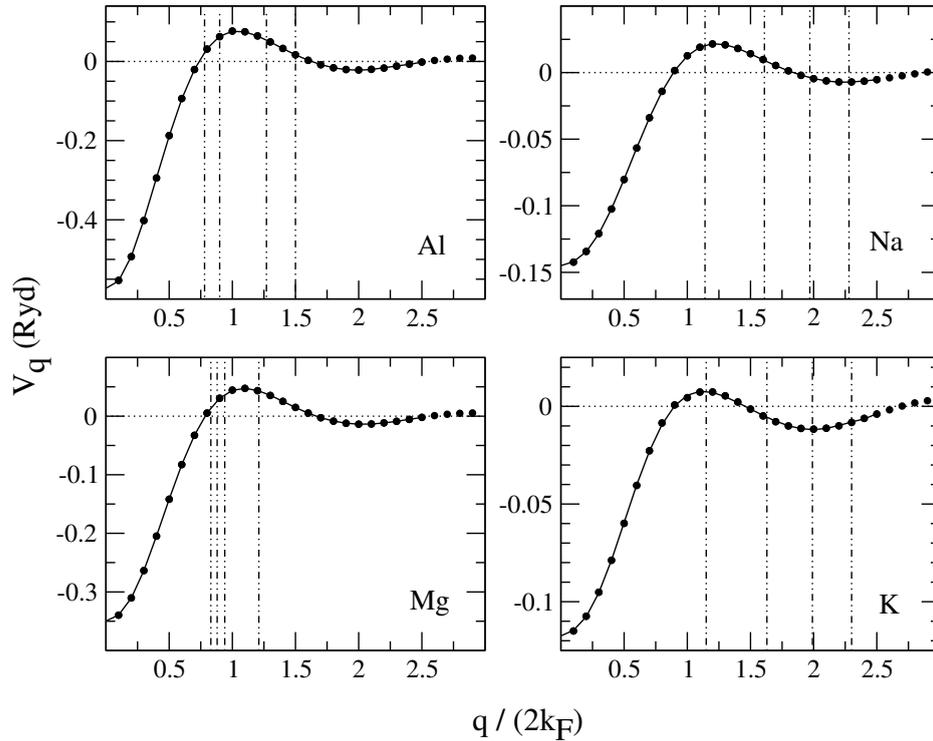


Figura G.1: Transformadas de los potenciales modelo de Abarenkov-Heine-Animalu para los elementos utilizados en esta tesis. Se muestran también los valores de  $q/(2k_F)$  para los primeros cuatro vecinos de la red recíproca de cada elemento. Los resultados  $V_q$  están en Rydbergs.

En relación con estos datos mencionemos que la última igualdad es simplemente un ajuste entre distintas definiciones de transformadas de Fourier (la utilizada por Harrison y la empleada a lo largo de esta tesis), siendo la cantidad  $\Omega$  el volumen de la celda unidad. Además, los resultados  $V_q$  de Harrison no están en unidades atómicas sino en Rydbergs, definiéndose estas unidades como sigue: 2 Ryd=1 u.a.

Realizando ajustes polinómicos sobre estos datos, pudimos obtener una expresión analítica  $V_q(q/(2k_F))$  que nos permitió calcular los valores de  $V_q$  para los puntos  $q = |\mathbf{Q}|$ , correspondientes a los sitios de la red recíproca de cada elemento. Los valores  $|\mathbf{Q}|/(2k_F)$  para los primeros cuatro vecinos en cada caso, se indican también en la figura.

### G.3. Obtención de los $\tilde{V}_{\mathbf{Q}}/\sqrt{\Omega}$

#### G.3.1. Aluminio

La red recíproca para el caso del aluminio es una BCC cuyos vecinos hasta tercer orden, respecto del vértice central, se muestran en la Fig. G.2 (los cuartos vecinos corresponderían a los centros de los 24 cubos adyacentes a los ilustrados). Las distancias correspondientes, junto con la cantidad de vecinos de cada orden y el valor de potencial asociado a esos puntos se muestra en la Tab. G.1.

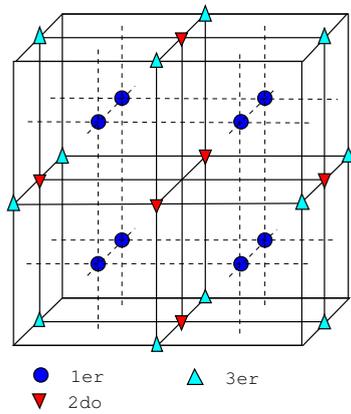


Figura G.2: Vecinos para una red BCC.

Tabla G.1: Vecinos y valores del potencial modelo para el Aluminio.

Al	Cantidad	$ \mathbf{Q} $ (u.a.)	$\tilde{V}_{\mathbf{Q}}/\sqrt{\Omega}$ (u.a.)
1° vec.	8	1.42	0.0089 [86]
2° vec.	6	1.64	0.0281 [86]
3° vec.	12	2.32	0.0272
4° vec.	24	2.72	0.0093

### G.3.2. Sodio y Potasio

El sodio y el potasio tienen redes recíprocas FCC cuya estructura de vecinos se muestra en la Fig. G.3.

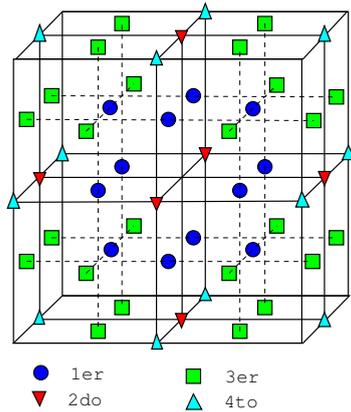


Figura G.3: Vecinos para una red FCC.

Además, información análoga a la presentada para el aluminio se muestra en la Tab. G.2.

Na	Cantidad	$ \mathbf{Q} $ (u.a.)	$\tilde{V}_{\mathbf{Q}}/\sqrt{\Omega}$ (u.a.)
1° vec.	8	1.11	0.0103
2° vec.	6	1.57	0.0046
3° vec.	12	1.92	0.0018
4° vec.	24	2.22	0.0035
K			
1° vec.	8	0.90	0.0039
2° vec.	6	1.27	0.0027
3° vec.	12	1.56	0.0077
4° vec.	24	1.80	0.0115

Tabla G.2: Vecinos y valores del potencial modelo para el sodio y el potasio.

### G.3.3. Magnesio

Las distancias  $|\mathbf{Q}|$  de los distintos vecinos al punto origen  $|\mathbf{Q}| = 0$  se calculan fácilmente para los elementos Al-Na-K. El caso del magnesio, sin embargo, requiere

de mayor atención ya que su estructura cristalina (HCP) no corresponde a una red de Bravais.

En una estructura HCP, cada punto de la red de Bravais contiene dos iones en posiciones  $\mathbf{R}$  y  $\mathbf{R} + \mathbf{a}_0$ , con  $\mathbf{a}_0$  una constante. (Ver apéndice F).

Las redes recíprocas se definen no para una dada estructura cristalina, sino para la red de Bravais subyacente. Es decir, para el magnesio, la red recíproca es la correspondiente a una red de Bravais hexagonal, formada por planos (redes 2D) apilados a distancia  $2\pi/c$ , y cuya estructura de Bravais se muestra en la Fig. G.4.

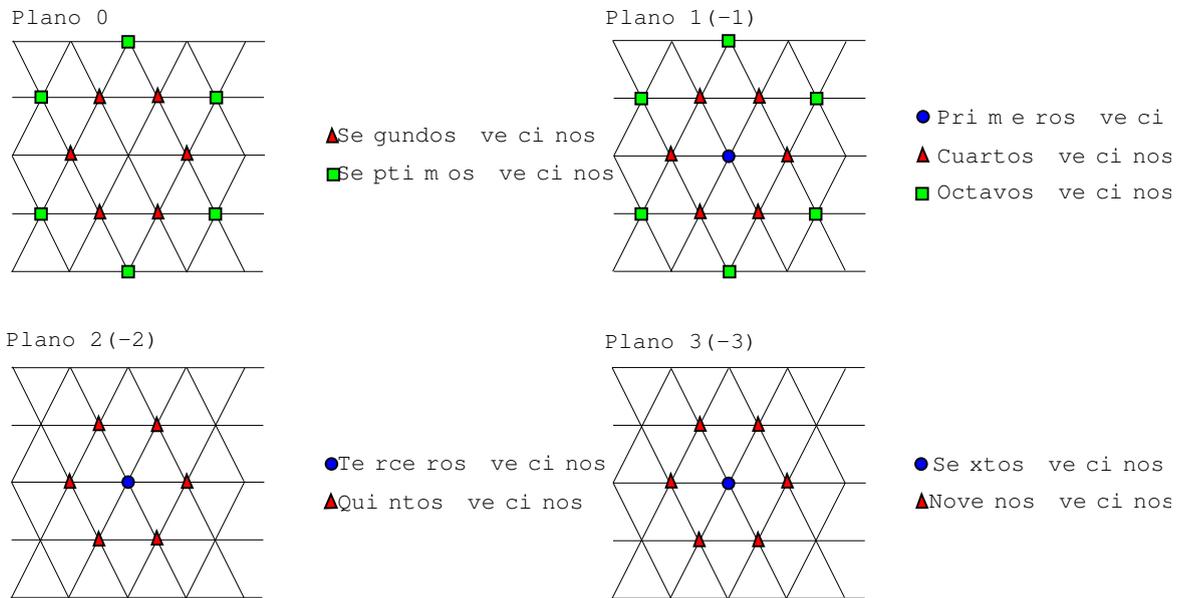


Figura G.4: Vecinos para una red Hex

Vemos en esta figura, por ejemplo que los primeros vecinos se encuentran en los planos 1 y -1, mientras que los segundos están en el plano 0, etc.

Resulta sin embargo que, dado que a cada punto de la hexagonal directa corresponde una base con dos iones, no todos los puntos de la red recíproca contribuirán al potencial periódico de la red [106]. Notemos  $\mathbf{d}_j$  a las posiciones de cada uno de los iones que corresponden a un punto de la red de Bravais directa. Tenemos entonces que el potencial debido a todo el cristal es

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} \sum_j \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{d}_j). \quad (\text{G.2})$$

Transformando Fourier encontramos que

$$\begin{aligned}
 U_{\mathbf{Q}} &= \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_{\Omega} e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{R},j} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \mathbf{d}_j) d\mathbf{r}, \\
 &= \sum_j \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\mathbf{Q}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{d}_j)} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{d}_j) e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{d}_j} d\mathbf{r}, \\
 &= \underbrace{\tilde{\phi}(\mathbf{Q}) \sum_j e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{d}_j}}_{S_{\mathbf{Q}}}, \tag{G.3}
 \end{aligned}$$

donde la cantidad  $S_{\mathbf{Q}}$  es el factor de estructura geométrico. En esta última expresión obtenemos que los puntos  $\mathbf{Q}$  para los cuales se anule este factor, resultarán en una anulación de la transformada del potencial periódico. Esto ocurrirá para los primeros, sextos y octavos vecinos, de modo que, para el magnesio encontramos la siguiente, análoga a las mostradas para los otros elementos.

Mg	Cantidad	$ \mathbf{Q} $ (u.a.)	$\tilde{V}_{\mathbf{Q}}/\sqrt{\Omega}$ (u.a.)
1° vec.	6	1.20	0.0071 [86]
2° vec.	2	1.28	0.0133 [86]
3° vec.	12	1.36	0.0186 [86]
4° vec.	12	1.76	0.0215 [86]
5° vec.	6	2.08	0.011
6° vec.	12	2.26	0.0043

Tabla G.3: Vecinos y valores del potencial modelo para el Magnesio.

# Bibliografía

- [1] D. Pines y D. Bohm, Phys. Rev. **85**, 338 (1952)
- [2] D. Bohm y D. Pines, Phys. Rev. **92**, 609 (1953)
- [3] D. Pines, *Elementary excitations in solids*, W.A. Benjamin, Inc., New York (1964)
- [4] J.L. Gervasoni, Tesis doctoral en la Universidad Nacional de Cuyo (1992)
- [5] D. M. Newns, Phys. Rev. B, **1**, 3304 (1970)
- [6] R. Fuchs y K. L. Kliewer, Phys. Rev. B, **3**, 2270 (1971)
- [7] A. Bagchi y C. B. Duke, Phys. Rev. B, **5**, 2784 (1972)
- [8] J. Heinrichs, Phys. Rev. B, **7** 3487 (1973)
- [9] E. T. Arakawa, M. W. Williams, R. N. Hamm y R. H. Ritchie, Phys. Rev. Lett., **31**, 1127 (1973)
- [10] P. J. Feibelman, Phys. Rev. B, **9**, 5077 (1974)
- [11] E. Zaremba, Phys. Rev. B, **9**, 1277 (1974)
- [12] C. B. Duke, L. Pietronero, J. O. Porteus y J. F. Wendelken, Phys. Rev. B, **12**, 4059 (1975)
- [13] D. E. Beck y B. B. Dasgupta, Phys. Rev. B, **12**, 1995 (1975)
- [14] C. Benazeth, N Benazeth, and L. Viel, Surf. Sci. **78**, 625 (1978)
- [15] D. Hasselkamp and A. Scharmann, Surf. Sci. **119**, L388 (1982)

- 
- [16] M.F. Burkhard, H. Rothard, and K.-O.E. Groeneveld, *Phys. Status Solidi (b)* **147**, 589 (1988)
- [17] A.A. Almulhem and M.D. Girardeau, *Surf. Sci.* **210**, 138 (1989)
- [18] M. Rocca, F. Biggio y U. Valbusa, *Phys. Rev. B*, **42**, 2835 (1990)
- [19] D. E. Beck, *Phys. Rev. B*, **43**, 12611 (1991)
- [20] R. Zimmy, *Surf. Sci.* **260**, 347 (1992)
- [21] N.J. Zheng and C. Rau, *J. Vac. Sci. Technol. A* **11**, 2095 (1993)
- [22] J. Sellarès y N. Barberán, *Phys. Rev. B*, **50**, 1879 (1994)
- [23] M. Rocca, Li Yibing, F. Buatier de Mongeot y U. Valbusa, *Phys. Rev. B*, **52**, 14947 (1995)
- [24] R.A. Baragiola y C.A. Dukes, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2547 (1996)
- [25] S.M. Ritzau, R.A. Baragiola, y R.C. Monreal, *Phys. Rev. B* **59**, 15506 (1999)
- [26] E.A. Sánchez, J.E. Gayone, M.L. Martiarena, O. Grizzi, y R.A. Baragiola, *Phys. Rev. B* **61**, 14209 (2000)
- [27] N. Stolterfoht, D. Niemann, V. Hoffmann, M. Rösler, y R.A. Baragiola, *Phys. Rev. A* **61**, 052902 (2000)
- [28] P. Riccardi, P. Barone, A. Bonanno, A. Oliva, y R.A. Baragiola, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 378 (2000)
- [29] B. van Someren, P.A. Zeijlmans van Emmichoven, I.F. Urazgil'din, y A. Niehaus, *Phys. Rev. A* **61**, 032902 (2000)
- [30] C.D. Wilson, C.A. Dukes, y R.A. Baragiola, *Phys. Rev. B* **63**, 12101 (2001)
- [31] S. Lacombe, V.A. Esaulov, E.A. Sánchez, O. Grizzi, y N.R. Arista, *Phys. Rev. B* **67**, 125418 (2003)
- [32] E. Antoncik, G. di Cola y L. Farece, *Radiat. Eff.*, **5**, 1 (1970)

- 
- [33] E. Antoncik, *Radiat. Eff.*, **7**, 275 (1971)
- [34] E. Antoncik y N.K.S.Gaur, *J. Phys. C*, **11**, 735 (1978)
- [35] C. C. Kao y E. M. Conwell, *Phys. Rev. B*, **14**, 2464 (1976)
- [36] G. A. Farias y A. A. Maradudin, *Phys. Rev. B*, **28** 5675 (1983)
- [37] T. Inagaki, M. Motosuga, E. T. Arakawa y J. P. Goudonnet, *Phys. Rev. B*, **32**, 6238 (1985)
- [38] R. A. Mayanovic, G. F. Giuliani y J. J. Quinn, *Phys. Rev. B*, **33**, 8390 (1986)
- [39] D. H. Ehlers y D. L. Mills, *Phys. Rev. B*, **36** 1051 (1987)
- [40] H. K. Sy y L. M. Song, *Phys. Rev B*, **38**, 8313 (1988)
- [41] G. R. Bell, C. F. Conville y T. S. Jones, *Phys. Rev. B*, **54**, 2654 (1996)
- [42] A. G. Borisov, A. Mertens, H. Winter y A. K. Kazansky, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 5378 (1999)
- [43] L. F. de Ferrariis, Tesis doctoral en la Universidad Nacional de Cuyo (2005)
- [44] C. Yannouleas, J. M. Pacheco y R. A. Broglia, *Phys. Rev. B*, **41**, 6088 (1990)
- [45] S. Saito, G. F. Bertsch y D. Tománek, *Phys. Rev. B*, **43**, 6804 (1991)
- [46] N. Ju, A. Bulgac y J. W. Keller, *Phys. Rev. B*, **48**, 9071 (1993)
- [47] Ll. Serra, G. B. Bachelet, N. Van Giai y E. Lipparini, *Phys. Rev. B*, **48**, 14708 (1993)
- [48] J. da Providência, Jr. y R. de Haro, Jr, *Phys. Rev. B*, **49**, 2086 (1994)
- [49] A. Rubio, J. A. Alonso, J. M. López y M. J. Stott, *Phys. Rev. B*, **49**, 17397 (1994)
- [50] F. Calvayrac, P. G. Reinhard y E. Suraud, *Phys. Rev. B*, **52**, R17056 (1995)
- [51] C. Yannouleas, E. N. Bogachev y U. Landman, *Phys. Rev. B*, **53**, 10225 (1996)
- [52] A. Dellafore, F. Matera y F. A. Brieva, *Phys. Rev. B*, **61**, 2316 (2000)

- 
- [53] L. G. Gerchikov, A. N. Ipatov, R. G. Polozkov y A. V. Solov'yov, Phys. Rev. A, **62**, 043201 (2000)
- [54] L. G. Gerchikov, C. Guet y A. N. Ipatov, Phys. Rev. A, **66**, 053202 (2002)
- [55] F. Y. Huang, Phys. Rev. B, **41**, 12957 (1990)
- [56] Q. Li y S. Das Sarma, Phys. Rev. B, **41**, 10268 (1990)
- [57] A. R. Goñi, A. Pinczuk, J. S. Weiner, J. M. Calleja, B. S. Dennis, L. N. Pfeiffer y K. W. West, Phys. Rev. Lett., **67** 3298 (1991)
- [58] G. Y. Hu y R. F. O'Connell, Phys. Rev. B, **44**, 3140 (1991)
- [59] L. Wendler y V. G. Grigoryan, Phys. Rev. B, **49**, 14531 (1994)
- [60] B. Tanatar, Phys. Rev. B, **51**, 14410 (1995)
- [61] S. Das Sarma y E. H. Hwang, Phys. Rev. B, **54**, 1936 (1996)
- [62] S. Das Sarma, E. H. Hwang y L. Zheng, Phys. Rev. B, **54**, 8057 (1996)
- [63] J. L. Gervasoni y N. R. Arista, Phys. Rev. B, **68**, 235302 (2003)
- [64] G. Gumbs, Phys. Rev. B, **70**, 235314 (2004)
- [65] J. Lindhard, K. Dans. Vidensk. Selsk. Mat-Fys Medd. **28** , Nro 8 (1954).
- [66] P. Nozières y D. Pines, Phys. Rev. **109**, 741 (1958)
- [67] P. Nozières y D. Pines, Phys. Rev. **109**, 762 (1958)
- [68] P. Nozières y D. Pines, Phys. Rev. **109**, 1009 (1958)
- [69] P. Nozières y D. Pines, Phys. Rev. **109**, 1062 (1958)
- [70] P. Nozières y D. Pines, Nuovo Cimento [X] **9**, 470 (1958)
- [71] P. Nozières y D. Pines, Phys. Rev. **113**, 1254 (1959)
- [72] R.H. Ritchie, Phys. Rev. **114**, 644 (1959)

- 
- [73] J. Lindhard y A. Winther, *mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **34**, no. 4, (1964)
- [74] D. Mermin, *Phys. Rev B* **1**, 2362 (1970)
- [75] D. F. DuBois, *Ann. of Phys.*, **7**, 174 (1959)
- [76] D. F. DuBois, *Ann. of Phys.*, **8**, 24 (1959)
- [77] D. F. DuBois y M. G. Kivelson, *Phys. Rev.*, **186**, 409 (1969)
- [78] P. M. Platzman, E. D. Isaacs, H. Williams, P. Zschack y G. E. Ice, *Phys. Rev B*, **46**, 12943 (1992)
- [79] A. Schinner, M. E. Bachlechner y H. M. Böhm, *Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. B*, **93** 181 (1994)
- [80] M. E. Bachlechner, A. Holas, H. M. Böhm y A. Schinner, *Phys. Rev B*, **54**, 2360 (1996)
- [81] M. S. Chung y T. E. Everhart, *Phys. Rev. B*, **15**, 4699 (1977)
- [82] M. Rösler y W. Brauer, *Phys. Stat. Sol B* **104**, 161 (1981)
- [83] M. Rösler y W. Brauer, *Phys. Stat. Sol B* **104**, 575 (1981)
- [84] M. Rösler y W. Brauer, *Springer Tracts in Modern Physics*, vol. **122**, 1 (1991)
- [85] M. Rösler, *Nucl. Instr. and Meth. B* **90**, 537 (1994)
- [86] M. Rösler, *Appl. Phys. A* **61**, 595 (1995)
- [87] M. Rösler, *Nucl. Instr. and Meth. B* **115**, 278 (1996)
- [88] M. Rösler, *Nucl. Instr. and Meth. B* **164**, 873 (2000)
- [89] N.W. Ashcroft, *Phil. Mag.* **8**, 2055 (1963)
- [90] V. Heine y I. Abarenkov, *Phil. Mag.* **9**, 451 (1964)
- [91] A.O.E. Animalu, *Phil. Mag.* **11**, 379 (1965)
- [92] A.O.E. Animalu y V. Heine, *Phil. Mag.* **12**, 1249 (1965)

- 
- [93] I.V. Abarenkov y V. Heine, *Phil. Mag.* **12**, 529 (1965)
- [94] W.A. Harrison, *Pseudopotentials in the theory of metals*, W. A. Benjamin Inc, New York (1966)
- [95] N.W. Ashcroft, *Phys. Lett.* **23**, 48 (1966)
- [96] R.W. Shaw Jr., *Phys. Rev.* **174**, 769 (1968)
- [97] R.W. Shaw Jr. y R. Pynn, *J. of Phys. C* **2**, 2071 (1969)
- [98] W.A. Harrison, *Electronic structure and the properties of solids*, General Publishing Company Ltd., Ontario (1989)
- [99] K. Sturm y L. E. Oliveira, *Phys. Rev. B*, **24**, 3054 (1981)
- [100] P. C. Gibbons, S. E. Schnatterly, J. J. Ritsko y J. R. Fields, *Phys. Rev. B*, **13** 2451 (1976)
- [101] I. Abril, R. García Molina, C.D. Denton, F.J. Pérez-Pérez y N.R. Arista, *Phys. Rev. A* **58** 357 (1998)
- [102] P. Eisenberger, P. M. Platzman y K. C. Pandey, *Phys. Rev. Lett.*, **31**, 311 (1973)
- [103] A. Vradis y G. D. Priftis, *Phys. Rev. B*, **32**, 3556 (1985)
- [104] P. O. Nilsson y G. Forssell, *Phys. Rev. B*, **16**, 3352 (1977)
- [105] E.K.U. Gross, E. Runge, y O. Heinonen, *Many Particle Theory*, Adam Hilger Bristol-Philadelphia-New York (1991)
- [106] N.W. Ashcroft y N.D. Mermin, *Solid state physics* (Holt, New York, 1976)
- [107] N.R. Arista, *Phys. Rev A* **49**, 1885 (1994)
- [108] D.G. Arbó y J.E. Miraglia, *Phys. Rev. A* **58**, 2970 (1998)
- [109] M.R.C. McDowell y J.P. Coleman, *Introduction to the theory of ion-atom collisions*, North Holland, Amsterdam-London (1970)
- [110] C. Kittel, *Quantum theory of solids* (John Wiley and Sons Inc., New York, 1963)

- 
- [111] M.S. Gravielle, Private Communication (2002)
- [112] D.G. Arbó, M.S. Gravielle y J.E. Miraglia, Phys. Rev. A **62**, 032901 (2000)
- [113] D.G. Arbó, M.S. Gravielle y J.E. Miraglia, Phys. Rev. A **64**, 022902 (2001)
- [114] A. Krozer, A. Fischer, y L. Schlapbach, Phys. Rev. B **51**, 7788 (1995)
- [115] P. C. Gibbons y S. E. Schnatterly, Phys. Rev. B, **15** 2420 (1977)
- [116] P. C. Gibbons, Phys. Rev. B, **17** 549 (1978)
- [117] P. C. Gibbons, Phys. Rev. B, **23** 2536 (1981)
- [118] R. E. Palmer y S. E. Schnatterly, Phys. Rev. B, **4**, 2329 (1971)
- [119] C. D. Denton, T. Jalowy, H. Luna, J. Fiol, D. Frenegal, S. Suárez, G. Bernardi, A. González, N. R. Arista y K. O. Groeneveld, Nucl. Instr. and Meth. B, **164-165**, 927 (2000)
- [120] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, New York (???)
- [121] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, y F. Laloë, *Mécanique Quantique*, Hermann, Paris (1977)



## Listado de publicaciones

Gisela A. Bocan

A continuación detallo la lista de publicaciones incorporadas a mi trabajo de tesis doctoral:

1. *Electron excitation after plasmon decay in proton-aluminum collisions*, G. Bocan y J. E. Miraglia, Phys. Rev. A **67**, 032902 (2003)
2. *Excitation of two interacting electrons as a plasmon decay mechanism in proton-aluminum collisions*, G. A. Bocan y J. E. Miraglia, Phys. Rev. A **69**, 012901 (2004)
3. *Plasmon decay mechanisms in electron-aluminum collisions*, G. A. Bocan y J. E. Miraglia, Phys. Rev. A **71**, 024901 (2005)
4. *plasmon decay mechanisms in proton-solid collisions*, G. A. Bocan y J. E. Miraglia, Phys. Rev. A **72**, 042903 (2005)

Lic. G. A. Bocan