



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

**Esta tesis doctoral contiene un índice que enlaza a cada uno de los capítulos de la misma.**

**Existen asimismo botones de retorno al índice al principio y final de cada uno de los capítulos.**

**[Ir directamente al índice](#)**

**Para una correcta visualización del texto es necesaria la versión de [Adobe Acrobat Reader 7.0](#) o posteriores**

**Aquesta tesi doctoral conté un índex que enllaça a cadascun dels capítols. Existeixen així mateix botons de retorn a l'índex al principi i final de cadascun dels capítols .**

**[Anar directament a l'índex](#)**

**Per a una correcta visualització del text és necessària la versió d' [Adobe Acrobat Reader 7.0](#) o posteriors.**

**Universitat d'Alacant**  
**Departament de Física Aplicada**



**Universidad de Alicante**  
**Departamento de Física Aplicada**

Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

1.100

# **Interacción de haces de $H_n^+$ ( $n=1,2,3$ ) con láminas delgadas**

Memòria presentada per  
**Cristian D. Denton Zanello**  
per a optar al grau de  
Doctor en Ciències

Memoria presentada por  
**Cristian D. Denton Zanello**  
para optar al grado de  
Doctor en Ciencias

Alacant, diciembre de 1997





Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

*A mis padres*

Rafael Garcia Molina, Professor Titular de Física Aplicada en la Universitat de Múrcia, i Isabel Abril Sánchez, Professora Titular de Física Aplicada en la Universitat d'Alacant, certifiquem que el treball titulat "Interacción de haces de  $H_n^+$  ( $n=1,2,3$ ) con láminas delgadas", presentat por Cristian D. Denton Zanello, s'ha realitzat sota la nostra direcció i constitueix la memòria que presenta per a optar al grau de Doctor en Ciències per la Universitat d'Alacant.

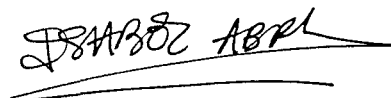
I per tal que conste, en compliment de la legislació vigent, signem aquest certificat.



Alacant, 17 de novembre de 1997

*Rafael Garcia Molina, Profesor Titular de Física Aplicada en la Universidad de Murcia, e Isabel Abril Sánchez, Profesora Titular de Física Aplicada en la Universidad de Alicante, certificamos que el trabajo titulado "Interacción de haces de  $H_n^+$  ( $n=1,2,3$ ) con láminas delgadas", presentado por Cristian D. Denton Zanello, ha sido realizado bajo nuestra dirección y constituye la memoria que presenta para optar al grado de Doctor en Ciencias por la Universidad de Alicante.*

*Y para que conste, en cumplimiento de la legislación vigente, firmamos el presente certificado.*



*Alicante, 17 de noviembre de 1997*



Esta memoria fue defendida en la Universitat d'Alacant, el día 22 de diciembre de 1997, ante un tribunal formado por:

- Presidente:** Dr. José Bernabéu Alberola  
Universitat de València
- Vocal:** Dr. Miguel Ortuño Ortín  
Universidad de Murcia
- Vocal:** Dr. Francesc Salvat Gavaldà  
Universitat de Barcelona
- Vocal:** Dr. Andrés Arnau Pino  
Universidad del País Vasco
- Secretario:** Dr. Francisco Yubero Valencia  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas,  
Sevilla
- Suplente:** Dr. Jose Maria Fernandez Varea  
Universitat de Barcelona
- Suplente:** Dr. Mikel Forcada Zubizarreta  
Universitat d'Alacant

## Resum

Hem emprat el formalisme dielèctric del poder de frenat per a estudiar el valor mitjà de la pèrdua d'energia de feixos formats per protons, molècules de  $H_2^+$  o  $H_3^+$  quan travessen làmines primes de diversos materials. També hem desenrotllat un programa que ens permet calcular la distribució de pèrdua d'energia, la distribució angular i la distribució de separacions internuclears dels protons en què es fragmenten les molècules abans esmentades quan interaccionen amb materials. Aquest programa combina un tractament de dinàmica molecular i de Monte Carlo per al seguiment individualitzat de cada partícula, de manera que inclou la repulsió coulombiana entre els protons, les forces degudes a les excitacions electròniques (autofrenat i efectes d'interferència) i les col·lisions nuclears. Els resultats que hem obtingut comparen favorablement amb els experiments.

Com a resultat del treball desenvolupat en aquesta memòria, s'han publicat els articles que figuren tot seguit:

- C. D. Denton, F. J. Pérez Pérez, R. Garcia-Molina, I. Abril y N. R. Arista, "Energy loss of swift  $H_3^+$ -molecule ions in carbon foils", *Europhysics Letters* **35** (1997) 499.
- F. J. Pérez-Pérez, C. D. Denton, I. Abril, R. Garcia-Molina y N. R. Arista, "Vicinity effects in the stopping power of  $H_3^+$  beams in amorphous carbon", *Zeitschrift für Physik D* **41** (1997) 187.
- C. D. Denton, I. Abril, F. J. Pérez Pérez, R. Garcia-Molina y N. R. Arista, "Velocity and orientational dependence of  $H_3^+$  energy loss", *Radiation Effects and Defects in Solids* **142** (1997) 223.
- C. D. Denton, R. Garcia-Molina, I. Abril y N. R. Arista, "Electronic interactions and nuclear scattering effects in the stopping power of carbon for fragmented  $H_2^+$  projectiles", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* (en prensa, 1998).
- C. D. Denton, R. Garcia-Molina, I. Abril y N. R. Arista, "Contribution of nuclear scattering to the energy loss distributions of protons in carbon foils", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* (en prensa, 1998).
- I. Abril, R. Garcia-Molina, C. D. Denton, F. J. Pérez-Pérez y N. R. Arista, "Dielectric description of wakes and stopping powers in solids", *Physical Review A* (aceptado, 1997).



## Abstract

The dielectric formalism has been used to study the mean stopping power of  $H_n^+$ -beams ( $n = 1,2,3$ ) after traversing thin foils of different materials. We have also developed a code that calculates energy loss distributions, angular distributions and internuclear separations distributions of the fragment protons exiting the foils. This code combines molecular dynamics and Monte Carlo to follow the trajectories of each molecular component, in such a way that Coulomb explosion, electronic excitations (self retarding force and interference effects) and nuclear collisions are included. We have found a good agreement between our results and the experimental data.

As a result of this work we have published the following papers:

- C. D. Denton, F. J. Pérez Pérez, R. Garcia-Molina, I. Abril y N. R. Arista, "Energy loss of swift  $H_3^+$ -molecule ions in carbon foils", *Europhysics Letters* **35** (1997) 499.
- F. J. Pérez-Pérez, C. D. Denton, I. Abril, R. Garcia-Molina y N. R. Arista, "Vicinage effects in the stopping power of  $H_3^+$  beams in amorphous carbon", *Zeitschrift für Physik D* **41** (1997) 187.
- C. D. Denton, I. Abril, F. J. Pérez Pérez, R. Garcia-Molina y N. R. Arista, "Velocity and orientational dependence of  $H_3^+$  energy loss", *Radiation Effects and Defects in Solids* **142** (1997) 223.
- C. D. Denton, R. Garcia-Molina, I. Abril y N. R. Arista, "Electronic interactions and nuclear scattering effects in the stopping power of carbon for fragmented  $H_2^+$  projectiles", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* (en prensa, 1998).
- C. D. Denton, R. Garcia-Molina, I. Abril y N. R. Arista, "Contribution of nuclear scattering to the energy loss distributions of protons in carbon foils", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* (en prensa, 1998).
- I. Abril, R. Garcia-Molina, C. D. Denton, F. J. Pérez-Pérez y N. R. Arista, "Dielectric description of wakes and stopping powers in solids", *Physical Review A* (aceptado, 1997).

## Resumen

Hemos empleado el formalismo dieléctrico para estudiar la pérdida de energía media que experimentan haces de  $H_n^+$  ( $n = 1,2,3$ ) tras atravesar láminas delgadas de diferentes materiales. También hemos desarrollado un programa para calcular las distribuciones de pérdida de energía, distribuciones angulares y distribuciones de distancias internucleares de los fragmentos moleculares cuando atraviesan las láminas. Este programa combina dinámica molecular y Monte Carlo para seguir la evolución de cada uno de los protones que componen la molécula, de manera tal que se incluye la explosión coulombiana, las excitaciones electrónicas (fuerza autofrenante y efectos de interferencia) y las colisiones nucleares. Encontramos un buen acuerdo entre nuestras predicciones y los datos experimentales.

Como resultado de este trabajo se han publicado los siguientes artículos:

- C. D. Denton, F. J. Pérez Pérez, R. Garcia-Molina, I. Abril y N. R. Arista, "Energy loss of swift  $H_3^+$ -molecule ions in carbon foils", *Europhysics Letters* **35** (1997) 499.
- F. J. Pérez-Pérez, C. D. Denton, I. Abril, R. Garcia-Molina y N. R. Arista, "Vicinity effects in the stopping power of  $H_3^+$  beams in amorphous carbon", *Zeitschrift für Physik D* **41** (1997) 187.
- C. D. Denton, I. Abril, F. J. Pérez Pérez, R. Garcia-Molina y N. R. Arista, "Velocity and orientational dependence of  $H_3^+$  energy loss", *Radiation Effects and Defects in Solids* **142** (1997) 223.
- C. D. Denton, R. Garcia-Molina, I. Abril y N. R. Arista, "Electronic interactions and nuclear scattering effects in the stopping power of carbon for fragmented  $H_2^+$  projectiles", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* (en prensa, 1998).
- C. D. Denton, R. Garcia-Molina, I. Abril y N. R. Arista, "Contribution of nuclear scattering to the energy loss distributions of protons in carbon foils", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* (en prensa, 1998).
- I. Abril, R. Garcia-Molina, C. D. Denton, F. J. Pérez-Pérez y N. R. Arista, "Dielectric description of wakes and stopping powers in solids", *Physical Review A* (aceptado, 1997).





## Agradecimientos

Quisiera agradecer a Isabel Abril y Rafael Garcia-Molina su dedicación y paciencia. Sus conocimientos y apoyo, así como el enorme tiempo que me han dedicado han sido fundamentales para que esta tesis haya tenido un buen fin. Pero sobre todo quiero darles las gracias por lo más importante que me han dado que es su amistad.

A Albert Gras Martí deseo agradecerle sus conocimientos y todos los medios que puso a mi disposición cuando llegué al Departamento de Física Aplicada. Además quiero agradecerle su buena disposición y apoyo.

A toda la gente que ha compartido conmigo tiempo en el Departamento de Física Aplicada de Alicante, o en Madrid: como Javier (el de Inglaterra), Javier (el objetor), Juan Carlos, Jorge, Adelardo, Vicent, María José, Pepe Jiménez, MariCarmen...., a todos ellos les agradezco su ayuda y amistad.

A Javier Domínguez Vásquez y Volodia Konoplev quiero agradecerles lo que me han transmitido y el tiempo que me han dedicado.

Además quiero agradecer a los profesores Kimura y Mannami de la Universidad de Kyoto por permitirme presentar datos experimentales no publicados y a Néstor Arista del Centro Atómico Bariloche por transmitirme y compartir sus conocimientos.

Por último quiero agradecer a mi familia, quienes a pesar de estar en la otra punta del mundo, siempre me han mandado su cariño y apoyo.



Universitat d'Alacant  
 Universidad de Alicante

## Tabla de contenidos

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1 Frenado electrónico de una partícula cargada</b>	<b>7</b>
1.1 Introducción . . . . .	7
1.2 Formalismo dieléctrico . . . . .	10
1.2.1 Potencial inducido . . . . .	12
1.2.2 Pérdida de energía . . . . .	14
1.3 Función dieléctrica de Lindhard . . . . .	17
1.4 Descripción dieléctrica de materiales reales . . . . .	20
1.5 Poder de frenado . . . . .	29
<b>2 Interacción de protones con láminas delgadas</b>	<b>41</b>
2.1 Introducción . . . . .	41
2.2 Dinámica molecular . . . . .	43
2.2.1 Algoritmos más usados . . . . .	43
2.3 Poder de frenado electrónico instantáneo . . . . .	45
2.4 Tratamiento del scattering elástico . . . . .	47
2.4.1 Teoría clásica de scattering . . . . .	47
2.4.2 Método de Monte Carlo para el scattering nuclear	50
2.5 Distribución de la energía perdida por un haz de protones	55
2.6 Distribución de ángulos de salida . . . . .	68
<b>3 Interacción de moléculas <math>H_2^+</math> con láminas delgadas</b>	<b>77</b>
3.1 Introducción . . . . .	77
3.2 Explosión coulombiana . . . . .	79
3.3 Efectos de interferencia . . . . .	81
3.4 Modelo de simulación para moléculas $H_2^+$ . . . . .	88



3.5	Pérdida de energía . . . . .	93
3.6	Distribución angular . . . . .	102
3.7	Distribución conjunta de ángulos y pérdida de energía . .	105
3.8	Distribución de distancias internucleares . . . . .	109
3.9	Frenado de partículas alineadas . . . . .	112
<b>4</b>	<b>Interacción de moléculas <math>H_3^+</math> con láminas delgadas</b>	<b>119</b>
4.1	Introducción . . . . .	119
4.2	Explosión coulombiana . . . . .	121
4.3	Frenado electrónico de la molécula $H_3^+$ . . . . .	124
4.4	Dependencia del frenado con la orientación molecular . .	126
4.5	Pérdida de energía media . . . . .	135
	<b>Conclusiones</b>	<b>143</b>
<b>A</b>	<b>Unidades atómicas</b>	<b>147</b>
<b>B</b>	<b>Unidades del espesor</b>	<b>151</b>
	<b>Referencias</b>	<b>153</b>



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

## Introducción

Desde principios de este siglo, la interacción de partículas cargadas con la materia ha sido uno de los temas de más interés dentro de la física. Los proyectiles cargados se han empleado ampliamente tanto para modificar [Kelly y Silva 1989] como para estudiar la estructura de la materia [Gras Martí *et al.* 1991].

Aparte del interés académico que despierta este tema, existe un claro interés en la física aplicada. En la industria de la microelectrónica interesa conocer cómo pierden energía las partículas cargadas al interactuar con la materia, tanto para evitar el daño de componentes como para la fabricación de los mismos mediante el dopado por implantación iónica [Ryssel y Glawischning 1982, Ziegler 1981]. La limpieza de superficies y el depósito de capas finas son otras dos áreas donde se ha demostrado la gran utilidad del bombardeo con iones energéticos, ya que dan lugar al fenómeno de sputtering [Rubloff 1988]. Además existen múltiples técnicas espectroscópicas que permiten analizar propiedades de los materiales (SIMS, secondary ion mass spectroscopy; AES, Auger electron spectroscopy; RBS, Rutherford backscattering spectroscopy) y que usan a las partículas cargadas como herramientas de análisis [Prutton 1984]; incluso en áreas tan distantes como la catálisis [Brongersma y van Santen 1991] se ha utilizado el bombardeo con haces de partículas. Otro campo donde también tiene interés el estudio de la interacción de partículas cargadas con sólidos es la medicina radioterapéutica o en estudios relacionados con la protección frente a la radiación [Turner 1995].

Desde el trabajo pionero de Rutherford en 1909 [1911] donde, bombardeando láminas delgadas de metales con partículas  $\alpha$ , analizó por primera vez la estructura de la materia, se ha avanzado constante-

mente en este área. En 1913, Bohr [1913] fue el primero en establecer una teoría que describía la interacción del proyectil con los electrones del medio. Posteriormente, Bethe [1930] y Bloch [1933] realizando un estudio cuántico del problema dedujeron resultados similares a los obtenidos por Bohr. En 1940 Fermi [1940] comenzó a utilizar el formalismo dieléctrico para estudiar el frenamiento de partículas cargadas en medios materiales; pero esta técnica empezó a usarse con más asiduidad diez años más tarde. En 1954 Lindhard [1954] fue capaz de obtener una expresión analítica para la función dieléctrica de un sólido, descrito mediante un gas de electrones, usando teoría cuántica de perturbaciones. A través de la función dieléctrica del material era posible conocer el comportamiento del sólido frente a perturbaciones externas; de este modo Lindhard y Winther [1964] calcularon el poder de frenado de un gas de electrones. La primera teoría unificada para describir el frenado de proyectiles cargados, denominada teoría LSS, fue establecida en 1963 [Lindhard *et al.* 1963] y hacía posible predecir el frenado y el alcance de iones energéticos en sólidos con una aproximación bastante aceptable. Con la aparición de ordenadores cada vez más potentes, a partir de la década de los 70 se empezaron a desarrollar métodos numéricos para simular los diversos procesos que tienen interés en la interacción de partículas energéticas con medios materiales. De este modo se analizó la interacción con los electrones del material [Rousseau *et al.* 1970] y con los núcleos del mismo [Wilson *et al.* 1977].

El poder de frenado y el straggling electrónico de proyectiles energéticos en algunos sólidos no están perfectamente definidos y hay algunas discrepancias en los valores que se citan en la literatura. Estas discrepancias son generalmente pequeñas para el poder de frenado [Ziegler *et al.* 1985, Andersen y Ziegler 1977, Janni 1982, Ziegler 1994], pero no tan pequeñas para el straggling [Chu 1976, Kido 1987]

Actualmente persiste el interés y la actividad en la investigación sobre la interacción de proyectiles energéticos con la materia, ya que todavía hay problemas sin solucionar, a la vez que surgen nuevas aplicaciones y temas para estudiar. Prueba de que este campo de la física interesa a la comunidad científica en la actualidad, lo demuestran los diferentes congresos del área, tales como: ICACS (International Conference on Atomic Collisions in Solids), IBMM (Ion Beam Modification Materials), COSIRES (Computer Simulation of Radiation Effects in

Solids), WBW (Werner Brandt Workshop), Conference on Polyatomic Ion Impact on Solids and Related Phenomena, etc.

A continuación se relacionan diversas referencias que pueden consultarse para introducirse en el tema [Sigmund 1975, Bonderup 1981, Balashov 1997], así como para conocer el estado actual del mismo [Kalashnikov *et al.* 1985, Kumakhov y Komarov 1989, Gras-Martí *et al.* 1991, Smith 1997].

Aunque la interacción de partículas atómicas con sólidos se ha analizado con gran detalle, el estudio de la interacción de agregados moleculares o "clusters" con medios materiales se encuentra en estos momentos en una etapa de gran interés, pues la actividad investigadora en este área crece rápidamente, debido tanto a su interés puramente académico como a las aplicaciones que comporta [Le Beyec 1993]. Además actualmente muchos laboratorios disponen de la posibilidad técnica de producir clusters formados por un gran número de átomos y a energías cinéticas relativamente altas, las cuales se extienden al rango de MeV/átomo. Citaremos como ejemplos de aplicaciones la implantación de iones moleculares, el análisis de superficies, la determinación de la estructura geométrica de iones moleculares detectando los fragmentos de las moléculas disociadas [Vager y Gemmell 1976, Kanter *et al.* 1980, Gemmell 1981, Gemmell *et al.* 1989]. También ha surgido la idea de usar los haces formados por clusters de iones como inductores de la fusión por confinamiento inercial, dada la gran densidad de energía que son capaces de depositar en un material [Nardi *et al.* 1978, Mehlhorn 1981, Young *et al.* 1982, Deutsch *et al.* 1983, Olsen *et al.* 1985, Arista y Piriz 1987, Beuhler *et al.* 1989, Nardi *et al.* 1992, Deutsch y Tahir 1992, Deutsch y Tahir 1993, Tahir *et al.* 1994].

El estudio de la interacción de haces moleculares con la materia empezó con un trabajo pionero de Brandt *et al.* [1974], en el cual se midió y calculó la pérdida de energía de haces de  $H_2^+$  y  $H_3^+$  en láminas delgadas y se compararon los resultados con el poder de frenado correspondiente a haces de protones de la misma velocidad. La conclusión de este trabajo fue que la pérdida de energía de los agregados atómicos tenía importantes diferencias, llamadas efectos de vecindad, con respecto a la pérdida de energía de sus componentes considerados separadamente. El

origen de este efecto radica en las interferencias producidas por las excitaciones electrónicas del blanco debidas al movimiento correlacionado de las partículas que forman la molécula o el agregado.

En este momento, el estudio de las interacciones entre haces moleculares energéticos con sólidos tiene un renovado interés, tanto teórico [Arista y Ponce 1975, Brandt y Ritchie 1976, Remillieux 1980, Basbas y Ritchie 1982, Steuer y Ritchie 1988, Arnau *et al.* 1989, Steuer y Ritchie 1989, Sigmund 1992, Wang y Ma 1993, Bret 1994, Jensen *et al.* 1994, Jakas y Capuj 1995ab, Kaneko 1995 ] como experimental [Poizat y Remillieux 1972, Steuer y Ritchie 1988, Gemmell *et al.* 1989, Steuer y Ritchie 1989, Fritz *et al.* 1994, Susuki *et al.* 1994]. Los trabajos relacionados con la interacción de clusters grandes con la materia son escasos, sin embargo hay que mencionar recientes publicaciones experimentales relacionadas con la interacción de clusters de hidrógeno o carbono con sólidos [Tombrello y Caywood 1973, Mazug *et al.* 1988, Fallavier *et al.* 1990, Farizon *et al.* 1992, Ray *et al.* 1992, Baudin *et al.* 1994 ] o trabajos teóricos sobre el mismo tema [Abril *et al.* 1992, Vicanek *et al.* 1992, Pérez-Pérez *et al.* 1996]. También se han publicado artículos sobre el paso de clusters en plasmas [Bringa y Arista 1995, Arista y Bringa 1997]

En esta memoria estudiaremos de forma realista diversos aspectos relacionados con el paso de haces moleculares energéticos formados por átomos de hidrógeno ( $H_n^+$   $n = 1, 2, 3$ ) a través de láminas delgadas de distintos materiales tales como aluminio, carbono amorfo, cobre y silicio. En este estudio nos centraremos en la interacción de proyectiles con energías grandes ( $E \gtrsim 25$  keV/amu). En este caso una técnica adecuada para describir los procesos inelásticos que sufre el proyectil al interactuar con el medio es el formalismo dieléctrico de respuesta lineal. Dentro de este formalismo la respuesta del material puede describirse mediante una combinación lineal de funciones dieléctricas de tipo Mermin [Planes *et al.* 1996]

Mediante técnicas de simulación de dinámica molecular hemos seguido la trayectoria de cada uno de los protones que componen la molécula a lo largo de su trayectoria dentro del material. Los sucesos de scattering nuclear (responsables del cambio de dirección del proyectil) se

consideraron por medio de un método tipo Monte Carlo, mientras que el frenado electrónico del proyectil se ha evaluado mediante el formalismo dieléctrico. Usando estas técnicas podemos obtener información sobre la energía perdida por el proyectil, el ángulo de salida, la distancia entre los protones, etc.

En el capítulo 1 se describirán las bases del formalismo dieléctrico y el modelo empleado para describir la función dieléctrica de cada material. Utilizando esta técnica obtendremos el poder de frenado del aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre para protones, así como el correspondiente straggling<sup>1</sup> de la distribución de pérdidas de energía. En el capítulo 2 se estudiará de una manera más realista el paso de protones a través de materiales, incluyendo el scattering nuclear por medio de un método tipo Monte Carlo [Zafjman *et al.* 1990] y usando un código de dinámica molecular para seguir la trayectoria de los protones. De esta manera se obtendrá la distribución de pérdida de energía que poseen los protones al atravesar láminas de aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre, así como la distribución de ángulos de salida de los protones. En el capítulo 3, utilizando el mismo método que se ha empleado para protones, se discutirá la interacción de moléculas de  $H_2^+$  en láminas delgadas de carbono amorfo y aluminio. En este caso es necesario tener en cuenta, además del frenado electrónico de cada protón y del scattering nuclear, los efectos de interferencia existentes entre las perturbaciones del material que ocasiona cada uno de los dos protones que forman la molécula, así como la repulsión coulombiana entre dichos protones. Usando las técnicas mencionadas se calcularán diversas magnitudes que suelen medirse experimentalmente, tales como la distribución de energía, la distribución angular, la distribución de distancias internucleares, etc., que poseen los fragmentos de la molécula emergentes de las láminas. También se hará un estudio acerca de las moléculas que emergen alineadas del material. En el capítulo 4, utilizando un modelo más simplificado se analizará el frenado de moléculas de  $H_3^+$ , haciendo hincapié en los diferentes efectos relacionados con la orientación de dicha molécula en relación a su velocidad. Por último, las conclusiones y el resumen de los resultados más relevantes obtenidos

---

<sup>1</sup>Se denomina straggling a la desviación cuadrática media de la pérdida de energía, por unidad de camino.





en esta memoria se exponen en el capítulo 5.

Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

## Capítulo 1

# Frenado electrónico de una partícula cargada

### 1.1 Introducción

En general, cuando una partícula cargada penetra dentro de un material pierde energía, además de variar su dirección inicial de movimiento. Estos dos procesos se deben a las interacciones que sufre el proyectil, tanto con los electrones del medio, como con los núcleos del material. Estos dos tipos de interacciones (electrónicas y nucleares, respectivamente) tienen rangos de acción bien diferentes y su importancia en el frenado del proyectil va a depender principalmente de su energía y de su masa. Genéricamente puede decirse que el frenado debido a colisiones nucleares va a predominar sobre el electrónico a bajas energías del proyectil, mientras que lo opuesto se produce a altas energías, como se ilustra en la figura 1.1.

La desviación que sufre el proyectil respecto a su dirección inicial se llama scattering y se debe generalmente a colisiones elásticas con los núcleos del material. Esto se debe a que la masa del proyectil es por lo general mucho mayor que la de los electrones del medio y, por lo tanto, el ángulo de scattering en colisiones con electrones es despreciable comparado con el debido a colisiones con los núcleos del material.

Uno de los métodos más utilizados para obtener la pérdida de energía electrónica que experimenta una partícula cargada rápida al pe-

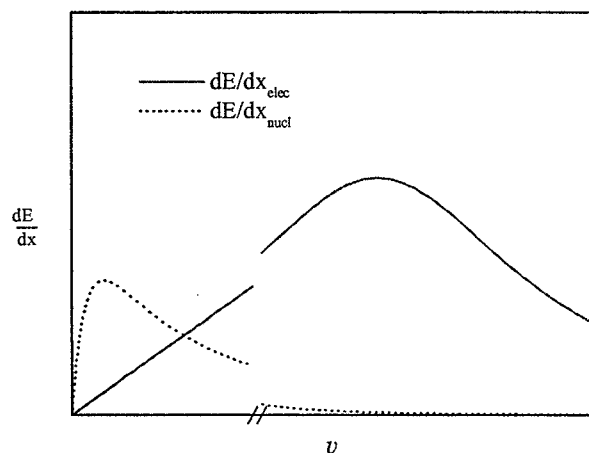


Figura 1.1: Frenado electrónico y nuclear. Cada uno de ellos domina a altas y bajas velocidades del proyectil, respectivamente.

netrar en un medio, es el formalismo dieléctrico [Pines 1964]. En este contexto, la principal magnitud es la función dieléctrica  $\epsilon$  que describe la respuesta del medio a perturbaciones externas. La utilización del formalismo dieléctrico para estudiar la pérdida energética de partículas cargadas fue introducida por Fermi en su tratamiento clásico del poder de frenado en medios densos para partículas relativistas. Posteriores desarrollos [Pines y Bohm 1952, Lindhard 1954, Hubbard 1955, Nozières y Pines 1958, Ritchie 1959] han permitido extender la formulación dieléctrica (originalmente basada en el modelo de osciladores atómicos en medios dispersivos) y proporcionan una mejor descripción de los efectos cuánticos en sólidos.

Mediante la aproximación de fases aleatorias (RPA) es posible evaluar la respuesta de un gas de electrones libres ante una perturbación externa [Lindhard 1954]. Los electrones del gas pueden sostener dos tipos diferentes de excitaciones y ambas contribuyen a que el proyectil



pierda energía. Por un lado, el proyectil puede excitar electrones de la esfera de Fermi a estados fuera de ésta, generando lo que se conoce como pares electrón-hueco. Por otro lado también es posible que el proyectil excite modos colectivos de oscilación resonante del gas de electrones; estos modos tienen unas frecuencias que son características de cada material, llamadas frecuencia de plasma  $\omega_{p1}$ .

Lindhard y Winther [1964] usaron el formalismo dieléctrico para calcular la función de pérdida de energía de un gas de electrones, mediante una descripción cuántica de los mismos en base al modelo de Lindhard [1954]. También se han empleado otros modelos para describir la respuesta dieléctrica de los materiales, como es el caso de semiconductores [Penn 1962, Brandt y Reinheimer 1970, Tossati y Parravicini 1971, Walter y Cohen 1972], extensiones del modelo dieléctrico de Drude [Ritchie y Howie 1977, Ashley *et al.* 1979, Kwei *et al.* 1993, Yubero y Tougaard 1992] o el reciente modelo propuesto por Planes *et al.* [1996], que se basa en una modificación a la función dieléctrica de Lindhard, que fue propuesta por Mermin [1970]. En general se ha comprobado que el formalismo dieléctrico para describir la interacción de partículas cargadas con la materia constituye una aproximación razonable y satisfactoria para evaluar magnitudes promediadas a muchas excitaciones, como es la pérdida de energía de un proyectil.

A continuación, en este capítulo presentaremos en primer lugar el formalismo dieléctrico. Seguidamente describiremos el modelo utilizado para describir de forma realista la respuesta de los materiales a perturbaciones externas y que se basa en describir la función de pérdida de energía de cada material por una combinación lineal de funciones de pérdida tipo Mermin [Abril *et al.* 1994, Planes *et al.* 1996, Abril *et al.* 1997]. Por último, discutiremos el poder de frenado y el straggling de protones en diversos materiales, como aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre, y compararemos nuestros resultados teóricos con datos experimentales.

En toda esta memoria se usarán las unidades atómicas (a.u.), que se describen en el apéndice A, excepto cuando se empleen explícitamente otras unidades tales como keV o MeV, para energías, y  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$  para espesores (en el apéndice B se da la relación entre el espesor expresado en unidades de  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$  y en unidades de longitud).



## 1.2 Formalismo dieléctrico

En el formalismo dieléctrico, la respuesta de los electrones del medio a las perturbaciones externas está contenida en una función dieléctrica  $\epsilon$ , definida a través de una ecuación constitutiva lineal entre el campo eléctrico  $\vec{E}$  y el vector desplazamiento  $\vec{D}$ . Para un medio homogéneo toma la forma:

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' \int_{-\infty}^{\infty} dt' \epsilon(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \vec{E}(\vec{r}', t'), \quad (1.1)$$

donde la integral en tiempo es hasta  $\infty$ , ya que la causalidad de la respuesta está contenida en la función dieléctrica  $\epsilon$ . Definiendo la transformada de Fourier de una función  $f(\vec{r}, t)$  como:

$$f(\vec{k}, \omega) = \int d\vec{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} f(\vec{r}, t), \quad (1.2)$$

tenemos que, en el espacio de Fourier, la ecuación constitutiva del medio<sup>1</sup>, en términos del momento  $\vec{k}$  y de la energía transferida  $\omega$  que pueden tener las excitaciones del material, queda de la forma:

$$\vec{D}(\vec{k}, \omega) = \epsilon(k, \omega) \vec{E}(\vec{k}, \omega). \quad (1.3)$$

A través de la primera ecuación de Maxwell, el vector desplazamiento  $\vec{D}$  se relaciona con la densidad de carga externa,  $\rho_{\text{ext}}$ , de la misma manera como el campo eléctrico  $\vec{E}$  se relaciona con la carga total,  $\rho_{\text{tot}} = \rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{ind}}$ , donde  $\rho_{\text{ind}}$  es la densidad de carga inducida en el medio debido a la presencia de  $\rho_{\text{ext}}$ . Esto es

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 4\pi \rho_{\text{ext}} \quad (1.4)$$

<sup>1</sup>En un caso más general, es necesario reemplazar en la ecuación (1.3) la función dieléctrica  $\epsilon(\vec{k}, \omega)$  por un tensor dieléctrico  $\bar{\epsilon}(\vec{k}, \omega)$ . Supondremos en lo que sigue que nuestro medio es isótropo. En este caso, dicho tensor dieléctrico estará especificado por sus dos componentes,  $\epsilon_{\ell}(k, \omega)$  y  $\epsilon_{t}(k, \omega)$ , paralela y perpendicular a  $\vec{k}$ , respectivamente y la dependencia en  $\vec{k}$  será a través de su módulo  $k$ . Si además consideramos que las velocidades de los proyectiles no son relativistas, la componente transversal  $\epsilon_{t}(k, \omega)$  será despreciable frente a la longitudinal  $\epsilon_{\ell}(k, \omega)$  [Lindhard 1954]. Por lo tanto, el tensor dieléctrico se reduce a un escalar, que será la componente longitudinal,  $\epsilon(k, \omega)$ .



$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{E}} = 4\pi (\rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{ind}}). \quad (1.5)$$

Desarrollando la ecuación (1.4) en el espacio de Fourier, y usando la ecuación (1.3), obtenemos:

$$i \vec{k} \epsilon(k, \omega) \vec{\mathcal{E}}(\vec{k}, \omega) = 4\pi \rho_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) \quad (1.6)$$

Por otra parte, la relación existente entre el campo eléctrico  $\vec{\mathcal{E}}$  y el potencial total  $\phi_{\text{tot}}$ , viene dada por:

$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \phi_{\text{tot}}(\vec{r}, t) \quad (1.7)$$

que, en el espacio de Fourier, da:

$$\vec{\mathcal{E}}(\vec{k}, \omega) = -i \vec{k} \phi_{\text{tot}}(\vec{k}, \omega) \quad (1.8)$$

De las ecuaciones (1.6) y (1.8), obtenemos la siguiente relación entre la carga externa y el potencial total (debido a dicha carga externa y a la inducida):

$$\phi_{\text{tot}}(\vec{k}, \omega) = \frac{4\pi \rho_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega)}{k^2 \epsilon(k, \omega)}. \quad (1.9)$$

Si nos interesa conocer cómo responde el medio material a una carga  $Z_1$  que se mueve con velocidad constante  $v$ , podemos representar dicha densidad de carga externa como:

$$\rho_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = Z_1 \delta(\vec{r} - \vec{v}t) \quad (1.10)$$

y su correspondiente transformada de Fourier será:

$$\rho_{\text{ext}}(\vec{k}, \omega) = 2\pi Z_1 \delta(\omega - \vec{k}\vec{v}). \quad (1.11)$$

Sustituyendo en la ecuación (1.9), obtenemos que el potencial total vendrá dado por:

$$\phi_{\text{tot}}(\vec{k}, \omega) = \frac{8\pi^2 Z_1 \delta(\omega - \vec{k}\vec{v})}{k^2 \epsilon(k, \omega)}. \quad (1.12)$$

Si suponemos que la carga  $Z_1$  se mueve a través del vacío,  $\epsilon(k, \omega) = 1$ , el potencial anterior se reduce a



$$\phi_{\text{coul}}(\vec{k}, \omega) = \frac{8\pi^2 Z_1 \delta(\omega - \vec{k}\vec{v})}{k^2}, \quad (1.13)$$

que es la transformada de Fourier del potencial coulombiano creado por una carga  $Z_1$  que se mueve con velocidad  $\vec{v}$  y que estaba en  $\vec{r} = 0$  cuando  $t = 0$ :

$$\phi_{\text{coul}}(\vec{r}, t) = \frac{Z_1}{|\vec{r} - \vec{v}t|}. \quad (1.14)$$

El resultado anterior era de esperar, puesto que cuando la carga se mueve en el vacío sólo da lugar a su propio campo (coulombiano) pues no existe ningún medio material sobre el cual inducir ninguna excitación.

### 1.2.1 Potencial inducido

El potencial que la carga  $Z_1$  induce o provoca como respuesta a su paso por el medio material se denomina potencial inducido. Este potencial se obtiene restándole al potencial total, ecuación (1.12), el potencial coulombiano, ecuación (1.13), lo cual da:

$$\phi_{\text{ind}}(\vec{r}, t) = \frac{Z_1}{2\pi^2} \int \frac{d^3k}{k^2} \int d\omega e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} \left[ \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - 1 \right] \delta(\omega - \vec{k}\vec{v}) \quad (1.15)$$

Para  $\vec{r} = \vec{v}t$ ,  $\phi_{\text{ind}}$  es el potencial inducido existente en el punto donde se encuentra la carga en cada instante. Este potencial se denomina también, aparte de potencial inducido, potencial de estela o más comúnmente "wake".

Teniendo en cuenta que los campos  $\vec{\mathcal{E}}(\vec{r}, t)$  y  $\vec{\mathcal{D}}(\vec{r}, t)$  deben de ser reales, es posible deducir [Landau y Lifshitz 1960] una relación general entre la función dieléctrica  $\epsilon$  y su compleja conjugada  $\epsilon^*$ :

$$\epsilon(k, \omega) = \epsilon^*(k, -\omega). \quad (1.16)$$

Desarrollando la ecuación (1.15) y usando la propiedad anterior se llega a la siguiente expresión para el potencial inducido por una carga

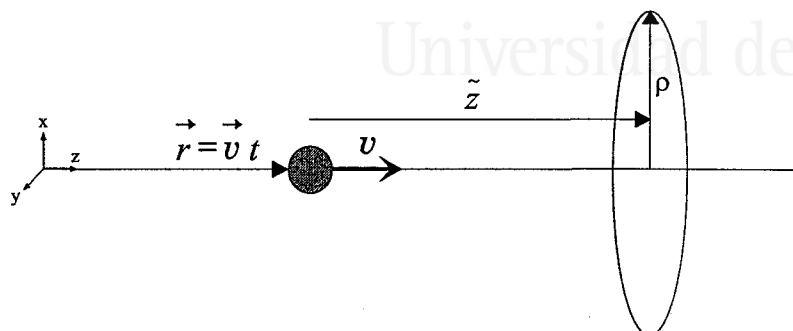


Figura 1.2: Coordenadas cilíndricas ( $\tilde{z}$ ,  $\rho$ ) y respecto al movimiento del ion.

$Z_1$  que se mueve con velocidad  $v$  a través de un medio caracterizado por una función dieléctrica  $\epsilon(k, \omega)$ :

$$\begin{aligned} \phi_{\text{ind}}(\tilde{z}, \rho) = & \frac{2 Z_1}{\pi v} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} d\omega J_0\left(\rho \sqrt{k^2 - \omega^2/v^2}\right) \\ & \times \left\{ \cos\left(\frac{\omega \tilde{z}}{v}\right) \text{Re} \left[ \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - 1 \right] \right. \\ & \left. - \sin\left(\frac{\omega \tilde{z}}{v}\right) \text{Im} \left[ \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - 1 \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.17)$$

donde  $J_0(x)$  es la función de Bessel de orden cero [Abramowitz y Stegun 1972]. Teniendo en cuenta la simetría axial alrededor de la trayectoria de la carga, hemos usado en la ecuación anterior las coordenadas cilíndricas  $\tilde{z}$  y  $\rho$  respecto a la posición del ion, donde  $\tilde{z}$  es paralela y  $\rho$  es perpendicular, respectivamente, a la dirección del movimiento, tal como se ilustra en la figura 1.2.

Análogamente, podemos hablar del campo eléctrico inducido  $\vec{E}_{\text{ind}}$ , dado por:

$$\vec{E}_{\text{ind}}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \phi_{\text{ind}}(\vec{r}, t), \quad (1.18)$$

cuyas componentes en las direcciones  $\tilde{z}$  y  $\rho$  pueden escribirse como:





$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{ind},z}(\tilde{z}, \rho) &= \frac{-2 Z_1}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} d\omega \omega J_0\left(\rho \sqrt{k^2 - \omega^2/v^2}\right) \\ &\times \left\{ \sin\left(\frac{\omega \tilde{z}}{v}\right) \text{Re} \left[ \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - 1 \right] \right. \\ &\left. + \cos\left(\frac{\omega \tilde{z}}{v}\right) \text{Im} \left[ \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - 1 \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.19)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{ind},\rho}(\tilde{z}, \rho) &= \frac{-2 Z_1}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} d\omega \omega J_1\left(\rho \sqrt{k^2 - \omega^2/v^2}\right) \\ &\times \left\{ \cos\left(\frac{\omega \tilde{z}}{v}\right) \text{Re} \left[ \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - 1 \right] \right. \\ &\left. - \sin\left(\frac{\omega \tilde{z}}{v}\right) \text{Im} \left[ \frac{1}{\epsilon(k, \omega)} - 1 \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.20)$$

donde  $J_1(x)$  es la función de Bessel de primer orden [Abramowitz y Stegun 1972].

### 1.2.2 Pérdida de energía

La única fuerza que actúa sobre la partícula con carga  $Z_1$  es la debida a la densidad de carga inducida por ésta en el medio<sup>2</sup> y su valor es:

$$\vec{F} = Z_1 \vec{\mathcal{E}}_{\text{ind}}(\vec{r}, t) \Big|_{\vec{r}=\vec{v}t} = Z_1 \left[ -\vec{\nabla} \phi_{\text{ind}}(\vec{r}, t) \Big|_{\vec{r}=\vec{v}t} \right] \quad (1.21)$$

Por cuestiones de simetría, puede verse que esta fuerza estará dirigida a lo largo de la dirección de movimiento del proyectil y que su sentido será opuesto al de la velocidad de éste.

Dado que el campo inducido se opone al movimiento de la partícula, el trabajo realizado por ésta será negativo, lo cual implica que perderá una energía al recorrer una distancia  $d\vec{r}$ , que está dada por  $dE = -\vec{F} d\vec{r}$ .<sup>3</sup> Con lo cual, el poder de frenado  $S_p$  (stopping power) o pérdida de energía por unidad de camino recorrido será simplemente:

<sup>2</sup>El campo que genera la propia carga no actúa sobre ella.

<sup>3</sup>Ponemos el signo "menos" en  $dE = -\vec{F} d\vec{r}$  para obtener una cantidad positiva para la energía perdida por la partícula, dado que  $\vec{F} d\vec{r} < 0$ .



$$S_p = \frac{dE}{dz} = -\vec{F} \frac{\vec{v}}{v} = Z_1 \frac{\vec{v}}{v} \vec{\nabla} \phi_{\text{ind}}(\vec{r}, t) \Big|_{\vec{r}=\vec{v}t} \quad (1.22)$$

Desarrollando la ecuación (1.22) y usando la propiedad (1.16) de la función dieléctrica, se llega a la siguiente ecuación para el poder de frenado:

$$S_p = \frac{2Z_1^2}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} d\omega \omega \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon(k, \omega)} \right]. \quad (1.23)$$

Vemos que el frenado que experimenta un proyectil depende de éste a través de su velocidad y carga y del material a través de su función dieléctrica.

En realidad, el frenado de una partícula en un medio material es de naturaleza estadística, en el sentido de que no todas las partículas de un haz perderán la misma energía al atravesar un espesor  $\Delta z$  de material. En la figura 1.3 se ilustra un haz de partículas cuya energía inicial vale  $E_0$  y que incide sobre una lámina delgada de espesor  $\Delta z$ . Después de atravesar la lámina, la energía del haz ha variado; pero no todas las partículas han perdido la misma energía. Se observa que, debido a las fluctuaciones en las interacciones que tienen lugar cuando las partículas viajan a través del material, el haz saliente tiene una distribución energética cuyo pico corresponde a un valor menor que la energía incidente (debido a la energía perdida al atravesar el material) y que es más ancha que la distribución incidente (a causa de la naturaleza estocástica de la pérdida de energía).

A partir de la distribución energética del haz saliente y conocida la energía del haz incidente, es fácil obtener la distribución de la energía perdida por el haz. Dividiendo ésta por el espesor de la lámina se obtiene una distribución del poder de frenado similar a la que aparece en la figura 1.4, cuyo valor medio, correspondiente al primer momento de la distribución, es el poder de frenado que hemos definido en la ecuación (1.23). El segundo momento de esta distribución energética recibe el nombre de "straggling" y está relacionado con la desviación cuadrática media (o varianza) de la pérdida de energía mediante:

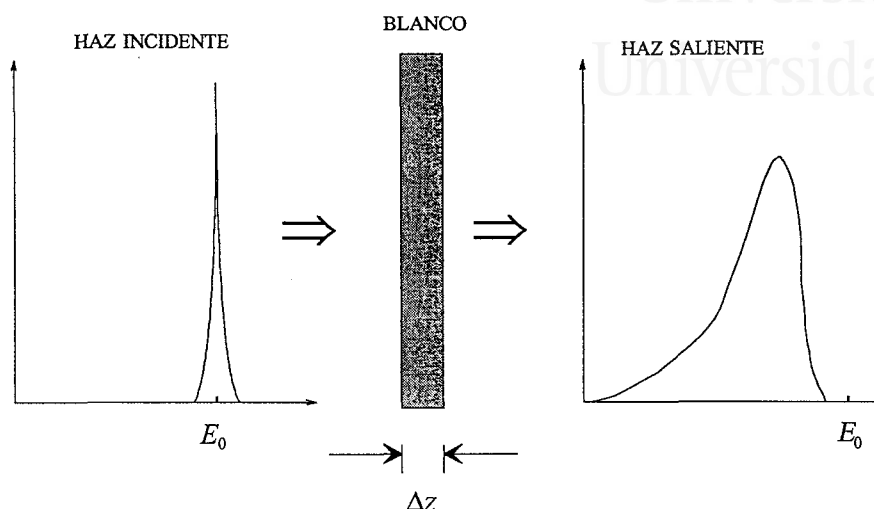


Figura 1.3: Distribución energética de un haz de iones antes y después de atravesar una lámina de espesor  $\Delta z$ .

$$\Omega^2 = \frac{(\overline{\Delta E - \overline{\Delta E}})^2}{\Delta z}. \quad (1.24)$$

El straggling nos da información sobre la anchura de la distribución. Para ser más exactos, el straggling está relacionado con la mitad de la anchura de la distribución a mitad de altura HWHM por la siguiente ecuación:

$$\text{HWHM} = \sqrt{2 \ln 2} \Omega \quad (1.25)$$

Los demás momentos de la distribución dan cuenta de las asimetrías de ésta. En la aproximación de una distribución gaussiana, lo cual se da en un gran caso de situaciones experimentales, podemos despreciar los restantes momentos frente a los dos primeros momentos.

Dentro del formalismo dieléctrico, el straggling puede calcularse de forma análoga al poder de frenado, obteniéndose la siguiente expresión:

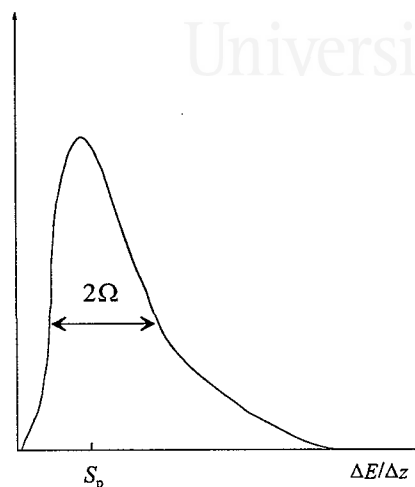


Figura 1.4: Distribución de  $\Delta E/\Delta z$ , cuyo valor medio es el poder de frenado  $S_p$  y su ancho es  $\Omega$ .

$$\Omega^2 = \frac{2Z_1^2}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} d\omega \omega^2 \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon(k, \omega)} \right]. \quad (1.26)$$

### 1.3 Función dieléctrica de Lindhard

En 1954 Lindhard<sup>4</sup> [1954] dedujo la función dieléctrica de un gas ideal de electrones mediante una teoría de perturbaciones a primer orden, consistente con la respuesta lineal del formalismo dieléctrico. Para un gas de electrones de densidad  $n$  a temperatura cero, la función dieléctrica de Lindhard  $\epsilon_L(k, \omega)$  tiene la siguiente expresión analítica:

$$\epsilon_L(k, \omega) = 1 + \frac{\chi^2}{4z^3} [g(u + x + i\zeta) - g(u - x + i\zeta)], \quad (1.27)$$

<sup>4</sup>El profesor Lindhard falleció durante la realización de esta tesis. Va aquí nuestro reconocimiento por sus importantes contribuciones al campo de la interacción de partículas con la materia.

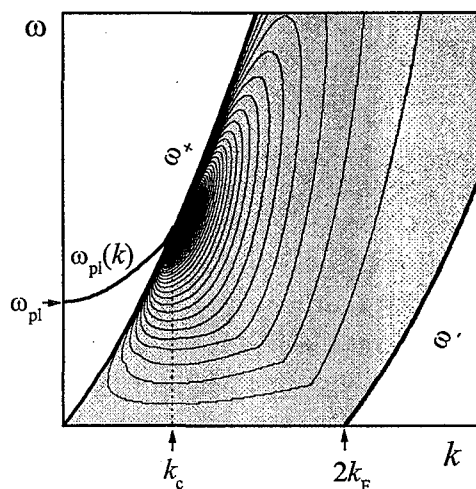


Figura 1.5: Función de pérdida de energía de Lindhard,  $\text{Im}(-1/\epsilon_L)$ .

en función de las variables adimensionales  $x = k/(2k_F)$  y  $u = \omega/(v_F k)$ , y el parámetro de densidad  $\chi^2 = 1/(\pi v_F)$ ;  $v_F$  y  $k_F$  son la velocidad y el momento de Fermi, respectivamente, y  $\zeta$  es un infinitésimo positivo. La función  $g(y)$  está dada por

$$g(y) = y + \frac{1}{2} (1 - y^2) \ln \left( \frac{y+1}{y-1} \right). \quad (1.28)$$

Como vimos en la expresión (1.23), el poder de frenado de un material depende de la función de pérdida de energía  $\text{Im}(-1/\epsilon)$  (a la cual también nos referiremos como ELF, Energy Loss Function), ya que esta función está relacionada con la absorción de energía que se produce en un medio material. En la figura 1.5 se analiza el comportamiento de  $\text{Im}(-1/\epsilon)$  en el plano  $(k, \omega)$ . Observamos que  $\text{Im}(-1/\epsilon) \neq 0$  en una franja central delimitada por las curvas  $\omega_+(k)$  y  $\omega_-(k)$  dadas por:

$$\omega_{\pm} = \frac{1}{2} (k^2 \pm 2k v_F). \quad (1.29)$$

Estas dos curvas corresponden a la mínima y a la máxima transferencia

de energía para una dada transferencia de impulso a un electrón de la esfera de Fermi. Por lo tanto, en esa franja están representados los procesos de entrega de energía a electrones individuales o creación de pares electrón-hueco.

Pero hay otra región de excitaciones que también contribuye a la pérdida de energía. En la figura 1.5 hemos representado esta región por la línea  $\omega_{pl}(k)$ , y en ella se verifica que  $\text{Re}(\epsilon) = 0$  e  $\text{Im}(\epsilon)$  es un infinitésimo, por lo tanto hay una contribución infinita a la ELF en forma de delta de Dirac sobre esta línea. Esta contribución corresponde a la excitación de modos colectivos de oscilación del gas de electrones, cuya naturaleza explicaremos a continuación. En la figura 1.5,  $k_c$  representa el valor de  $k$  en el cual la curva  $\omega_{pl}(k)$  se une a la curva  $\omega_+(k)$ .

Supongamos que por algún motivo se induce en el medio un desbalance local de carga y que no hay cargas externas. De esta manera se destruye localmente la neutralidad eléctrica del material y el campo eléctrico resultante tenderá a mover los electrones del medio para restablecerla. La ecuación de movimiento para cada electrón afectado por el campo eléctrico  $\vec{\mathcal{E}}$  será:

$$\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -\vec{\mathcal{E}} \quad (1.30)$$

donde  $\vec{\mathcal{E}}$  es el campo eléctrico originado por la densidad de carga inducida,  $\rho_{ind}$ , que dependerá de la posición. Por otra parte se debe cumplir la ecuación de Maxwell (1.5), pero ahora con  $\rho_{ext} = 0$ :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{\mathcal{E}} = 4\pi \rho_{ind} \quad (1.31)$$

y la ecuación de continuidad:

$$0 = \vec{\nabla} \cdot \left(-n \frac{d\vec{r}}{dt}\right) + \frac{\partial \rho_{ind}}{\partial t} \quad (1.32)$$

donde hemos despreciado el término de segundo orden  $\vec{\nabla}(\rho_{ind} \vec{r})$ . Sustituyendo en la ecuación (1.30) obtenemos:

$$\frac{\partial^2 \rho_{ind}}{\partial t^2} + 4\pi n \rho_{ind} = 0 \quad (1.33)$$

Como podemos apreciar, esta ecuación indica que la densidad de carga inducida  $\rho_{\text{ind}}$  oscila en el tiempo con una frecuencia característica llamada “frecuencia de plasma”, dada por:

$$\omega_{\text{pl}} = \sqrt{4\pi n} \quad (1.34)$$

Intuitivamente podemos pensar que al crear en el material una zona de mayor densidad de carga que la media (y, por ende, otra de menor densidad) los electrones van a repelerse entre sí en las zonas más pobladas y van a tender a ir a zonas de menor concentración electrónica. Pero en este proceso, los electrones van a ser acelerados por el campo eléctrico resultante y adquirirán cierta energía cinética. Por lo tanto, al llegar a las zonas menos pobladas, los electrones siguen de largo y generan un nuevo desequilibrio de carga. En este sentido, las oscilaciones son autosostenidas y tendrían una vida media infinita si su movimiento no se amortiguase al interactuar con el medio material. Es por esto que hablamos de modos de oscilación, pues la densidad electrónica del medio puede oscilar sin presencia de ninguna carga externa. Debido a que el campo eléctrico es paralelo a la dirección de movimiento de los electrones, los modos de oscilación resultan ser longitudinales y presentan cierta similitud con las ondas de sonido, aunque en el plasma son las fuerzas eléctricas, y no la presión, las responsables de sacar a las partículas de las zonas de mayor densidad. Estos modos propios del sistema ocurren cuando se verifica la condición  $\epsilon(k, \omega) = 0$ . Un plasmón es un cuanto de la oscilación de plasma, cuya energía vale  $\omega_{\text{pl}}$ , y puede excitarse cuando pasa una partícula cargada a través del material.

## 1.4 Descripción dieléctrica de materiales reales

Una de las limitaciones de la función dieléctrica de Lindhard a la hora de describir materiales reales es que no tiene en cuenta que los plasmones no tienen una vida media infinita, sino que efectúan oscilaciones amortiguadas y pueden decaer en excitaciones individuales (pares electrón-hueco). Esta circunstancia hace que el pico de plasmones que presenta la función  $\text{Im}(-1/\epsilon)$  no sea deltiforme sino que posea un ancho finito (el



ancho es inversamente proporcional a la vida media de la excitación). En las figuras 1.6 y 1.7 hemos representado mediante una línea discontinua la ELF correspondiente a momento transferido nulo,  $k = 0$ , obtenida a partir de experimentos ópticos [Hagemann *et al.* 1974, 1975, Palik 1985], para aluminio y silicio respectivamente. Se observa que en el caso del aluminio la descripción mediante una función de Lindhard está mucho más justificada que para el silicio, dado el pequeño ancho del pico de plasmones que presenta este material.

Una manera de generalizar la función dieléctrica de Lindhard para tener en cuenta la vida media finita de los plasmones es la que propuso Mermin [1970] dentro de la aproximación de tiempo de relajación. La expresión de la función dieléctrica de Mermin  $\epsilon_M$  viene dada en términos de la función dieléctrica de Lindhard  $\epsilon_L$  por la siguiente expresión:

$$\epsilon_M(k, \omega) = 1 + \frac{(1 + i\gamma/\omega) [\epsilon_L(k, \omega + i\gamma) - 1]}{1 + (i\gamma/\omega) [\epsilon_L(k, \omega + i\gamma) - 1] / [\epsilon_L(k, 0) - 1]}, \quad (1.35)$$

donde  $\gamma = 1/\tau$  es la constante de amortiguamiento, siendo  $\tau$  la vida media del plasmón. Este término da cuenta del decaimiento de los plasmones a excitaciones individuales. La influencia del amortiguamiento de los plasmones en el frenado de iones tiene gran importancia como se demuestra en [Ashley 1980, Gras-Martí *et al.* 1985, Ashley y Echenique 1987].

Hay otros materiales donde la descripción dieléctrica no es tan sencilla como en el aluminio y el silicio. Si observamos la ELF del carbono amorfo y del cobre (figuras 1.8 y 1.9) veremos que presentan una estructura mucho más compleja, y no se puede hablar de un solo pico de resonancia de plasma.

Una manera posible de describir los materiales reales es obteniendo la ELF del material mediante un ajuste con una suma de ELF tipo Mermin [Abril *et al.* 1994, Planes *et al.* 1996, Abril *et al.* 1997]. Construimos la ELF de un material en el límite óptico ( $k = 0$ ) ajustando la ELF experimental en un amplio rango de energías transferidas, para lo cual utilizamos una combinación lineal de ELF tipo Mermin, usando como parámetros libres  $\omega_i$ ,  $\gamma_i$  y  $A_i$ :



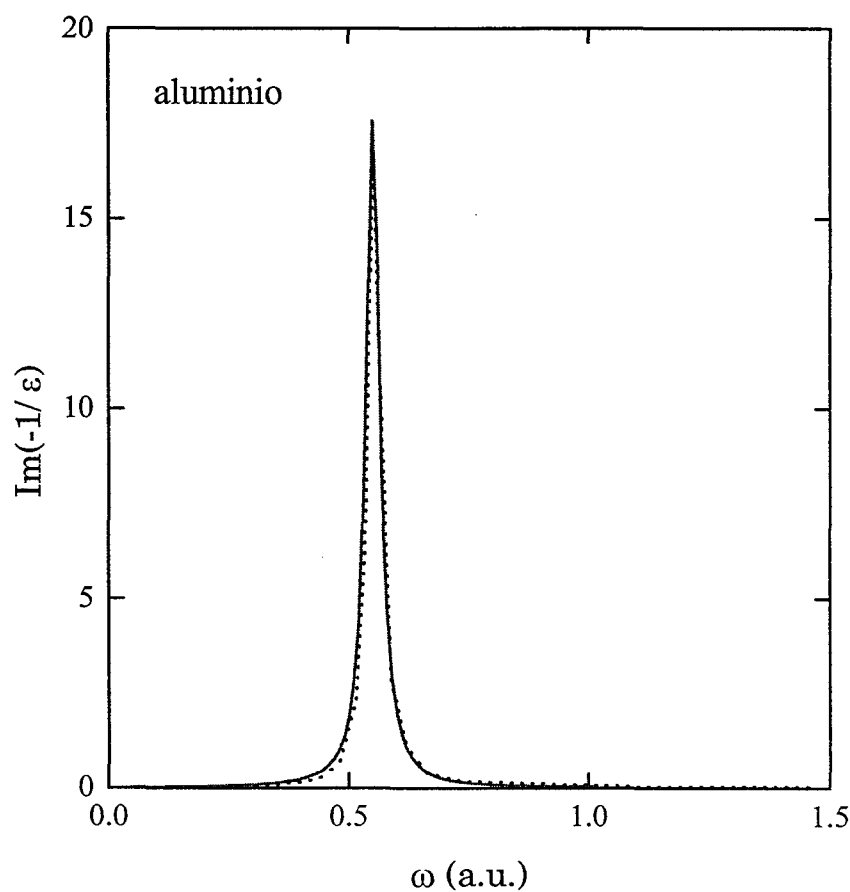


Figura 1.6: ELF de aluminio a  $k = 0$ . La línea rayada representa los datos experimentales [Hagemann *et al.* 1974], mientras que la línea continua corresponde al ajuste obtenido con funciones tipo Mermin; los parámetros del ajuste aparecen en la tabla 1.1.

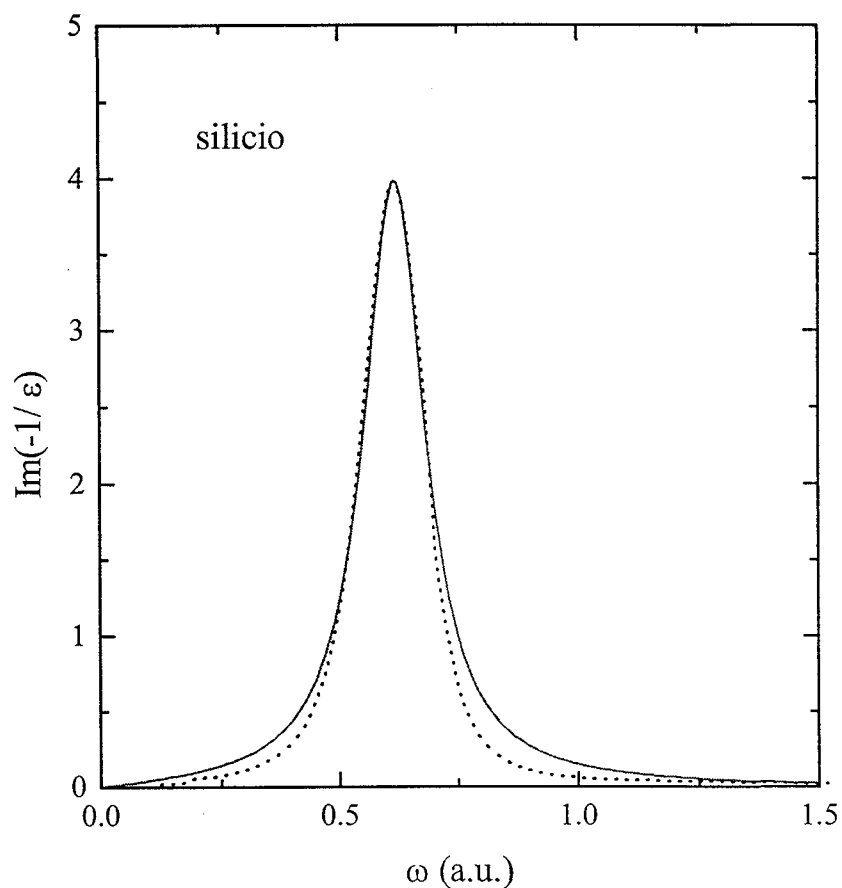


Figura 1.7: ELF de silicio a  $k = 0$ . La línea rayada representa los datos experimentales [Palik 1985], mientras que la línea continua corresponde al ajuste obtenido con funciones tipo Mermin; los parámetros del ajuste aparecen en la tabla 1.1.

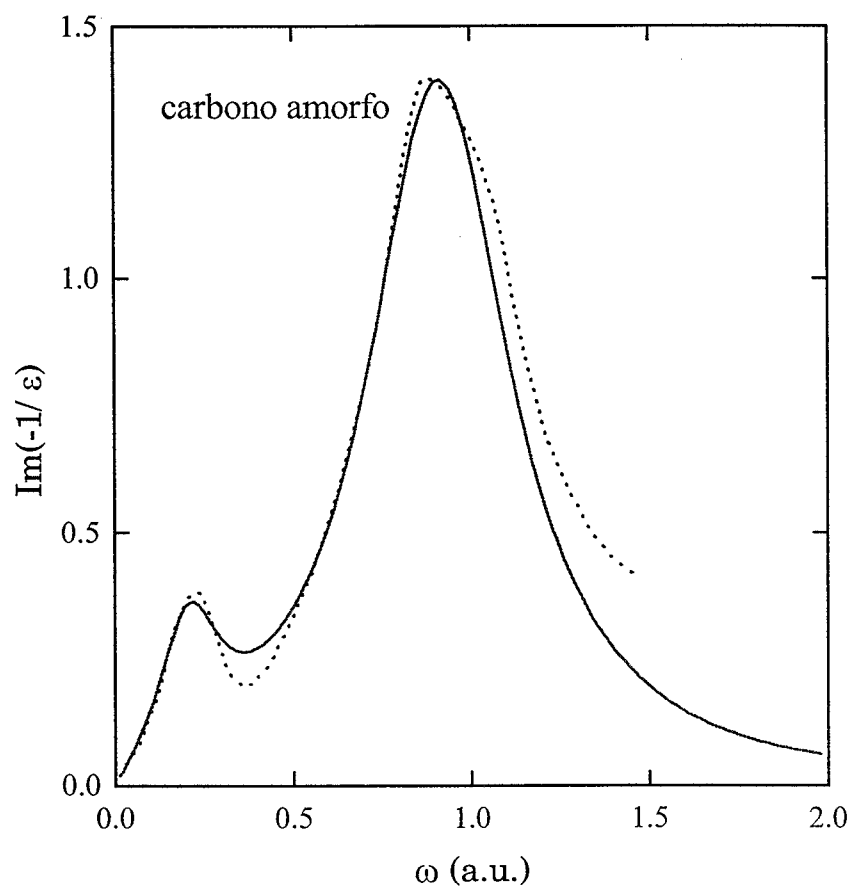


Figura 1.8: ELF de carbono amorfo a  $k = 0$ . La línea rayada representa los datos experimentales [Cazaux y Gramari 1977], mientras que la línea continua corresponde al ajuste obtenido con funciones tipo Mermin; los parámetros del ajuste aparecen en la tabla 1.1.

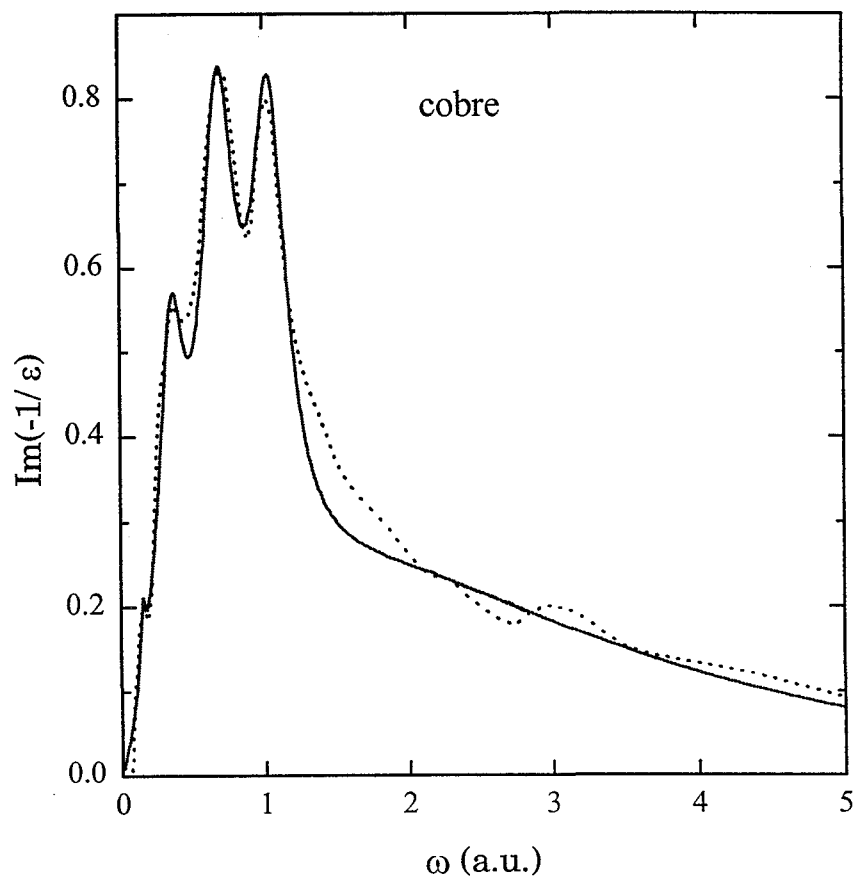


Figura 1.9: ELF de cobre a  $k = 0$ . La línea rayada representa los datos experimentales [Hagemann *et al.* 1974], mientras que la línea continua corresponde al ajuste obtenido con funciones tipo Mermin; los parámetros del ajuste aparecen en la tabla 1.1



$$\text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon(k=0, \omega)} \right]_{\text{exp}} = \sum_{i=1} A_i \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_M(\omega_i, \gamma_i; k=0, \omega)} \right], \quad (1.36)$$

donde  $\omega_i$  y  $\gamma_i$  están relacionados con la posición y el ancho de cada resonancia del espectro experimental que deseamos ajustar. Los coeficientes  $A_i$  representan la importancia relativa de cada pico dentro del espectro y deben de elegirse de manera tal que satisfagan la regla de suma para el número efectivo de electrones en el medio,

$$N_{\text{ef}}(\omega) = \frac{1}{2\pi^2 \mathcal{N}} \int_0^\omega d\omega' \omega' \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon(k, \omega')} \right], \quad (1.37)$$

donde  $\mathcal{N}$  es la densidad atómica del material y  $N_{\text{ef}}$  es el número efectivo de electrones por átomo que participan en la excitación para cada cantidad de energía transferida  $\omega$ . En el límite de altas transferencias de energía ( $\omega \rightarrow \infty$ ) todos los electrones del átomo pueden ser excitados y por lo tanto  $N_{\text{ef}} = N$ , siendo  $N$  el número total de electrones de cada átomo.

$$N = \frac{1}{2\pi^2 \mathcal{N}} \int_0^\infty d\omega' \omega' \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon(k, \omega')} \right]. \quad (1.38)$$

A esta última ecuación se le denomina regla de suma  $f$ . Debe notarse que el uso de funciones dieléctricas tipo Mermin asegura que la regla de suma  $f$  se satisface para todo  $k$ , si se satisface para  $k=0$ , lo cual representa una importante ventaja de esta representación.

Los parámetros usados para ajustar la ELF a los datos experimentales de cada material aparecen en la tabla 1.1. En el caso del cobre aparece una estructura muy compleja en el espectro de absorción, relacionada con las transiciones interbandas [Hagemann *et al.* 1974], que es típica de los metales de transición. Para realizar el ajuste de su ELF se ha usado la suma de cinco funciones de Mermin. El carbono presenta el interesante comportamiento de una doble resonancia de plasma (cada una atribuida a los electrones de valencia  $\pi$  y  $\pi + \sigma$ , respectivamente, [Taft y Philipp 1965]), por lo tanto es conveniente describir su espectro por una suma de dos funciones de pérdida de energía tipo Mermin.



A medida que aumenta la transferencia de energía  $\omega$ , los electrones de las capas internas que están en estados ligados empiezan a participar en el proceso de excitación. Para tener en cuenta la contribución de esos electrones internos a la función de pérdida de energía, se ha añadido un nuevo término por cada capa interna, cuyos parámetros son  $\omega_{\text{capa } i}$ ,  $\gamma_{\text{capa } i}$  y  $A_{\text{capa } i}$ . Estos nuevos términos no contribuyen a la función de pérdida de energía cuando las energías de excitación  $\omega$  son menores que el umbral correspondiente de dicha capa interna  $\omega_{\text{umbral } i}$ . Los valores de  $\omega_{\text{umbral } i}$  se han obtenido de Lide [1992], mientras que los parámetros  $\omega_{\text{capa } i}$ ,  $\gamma_{\text{capa } i}$  y  $A_{\text{capa } i}$  que se emplearían en la ecuación (1.36) para describir la respuesta de los electrones internos a perturbaciones externas se calculan a partir de los factores de dispersión por rayos X [Henke *et al.* 1982]. Aunque la regla de suma  $f$ , en la que intervienen todos los electrones de un átomo, se ha de cumplir independientemente del valor del número de onda  $k$ , no ocurre lo mismo con la regla de suma dada por la ecuación (1.37), y para que se verifique para todos los valores de  $k$ , se ha parametrizado la evolución de  $\omega_{\text{umbral } i}$  con  $k$  de la siguiente manera:

$$\omega_{\text{umbral } i} = a_{\text{umbral } i} + b_{\text{umbral } i} k^2 + c_{\text{umbral } i} k^4 \quad (1.39)$$

donde  $a_{\text{umbral } i}$ ,  $b_{\text{umbral } i}$  y  $c_{\text{umbral } i}$  son parámetros ajustables para el umbral de la capa  $i$  de cada material. Los parámetros necesarios para tener en cuenta la contribución de los electrones internos figuran en la tabla 1.2. Hemos de notar que en el rango de velocidades del proyectil que discutimos en esta memoria no todos los electrones del blanco participan en los procesos de excitación. Aparte de los electrones de valencia, hemos incluido los electrones de la capa K para el carbono amorfo, los electrones de la capa L para el aluminio y el silicio, y los electrones de la capa M para el cobre. En este último caso, debido al pequeño valor de  $\omega_{\text{umbral } M}$  la contribución de los electrones de la capa M no está separada de la contribución de los electrones de valencia. En la tabla 1.3 figuran los valores de la frecuencia de plasma de los cuatro materiales correspondiente a la descripción empleando funciones de pérdida de energía tipo Lindhard para ajustar la función de pérdida de energía experimental.

El comportamiento de la ELF para valores finitos del momento transferido  $k$  se ha analizado en detalle recientemente por Planes *et*

Tabla 1.1: Parámetros usados para ajustar, a través de la ecuación (1.36), la contribución de los electrones exteriores a la ELF de aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre.

Material	$i$	$\omega_i$ (a.u.)	$\gamma_i$ (a.u.)	$A_i$
aluminio	1	0.551	0.035	1.1178
silicio	1	0.620	0.156	0.9922
carbono amorfo	1	0.230	0.21	0.2362
	2	0.945	0.49	0.7088
cobre	1	0.15	0.04	0.02
	2	0.37	0.22	0.2184
	3	0.70	0.30	0.2449
	4	1.05	0.30	0.1524
	5	2.90	5.6	0.3564

Tabla 1.2: Parámetros usados para ajustar, de acuerdo con las ecuaciones (1.36) y (1.39), la contribución de los electrones internos a la ELF de aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre.

Material	$i$	$\sqrt{a_{\text{umbral}i}}$ (a.u.)	$b_{\text{umbral}i}$ (a.u.)	$c_{\text{umbral}i}$ (a.u.)	$\omega_{\text{capa}i}$ (a.u.)	$\gamma_{\text{capa}i}$ (a.u.)	$A_{\text{capa}i}$
aluminio	L	2.664	1.883	0.359	3.9	3.0	0.0666
silicio	L	3.668	1.182	0.340	4.2	4.9	0.05378
carbono amorfo	K	10.45	2.543	0.34	10.5	7.9	0.004078

*al.* [1996]. En la figura 1.10 se observa el comportamiento de la ELF del aluminio para distintos valores de  $k$ . En línea continua aparecen resultados experimentales [Batson y Silcox 1983], en línea rayada se muestra la aproximación de la suma de ELF tipo Mermin comparada con un modelo tipo Drude<sup>5</sup> extendido para la ELF (línea punteada).

<sup>5</sup>La función dieléctrica de Drude es el límite para  $k = 0$  de la función dieléctrica de Lindhard y su forma funcional es:  $\epsilon(k, \omega) = 1 + \frac{\omega_{\text{pl}}^2(k)}{\omega(\omega + i\gamma)}$ , donde  $\omega_{\text{pl}}(k)$  es la frecuencia de plasma con su dispersión espacial y  $\gamma$  un infinitésimo positivo.



Tabla 1.3: Valores de la frecuencia de plasma de aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre usados para ajustar la ELF experimental mediante ELF tipo Lindhard.

Material	$\omega_{pl}$ (a.u.)
aluminio	0.551
silicio	0.620
carbono amorfo	0.79
cobre	0.702

Hemos de resaltar que a  $k = 0$  se ha empleado el ajuste de la ELF a partir de los datos de la tabla 1.1, el cual da una altura de pico algo mayor que en el experimento de Batson y Silcox. Puede observarse que el ajuste de ELF tipo Mermin da una descripción mucho más realista de la evolución de la ELF para valores finitos del momento transferido  $k$ , pues se ensancha considerablemente conforme crece  $k$ , lo cual coincide con el comportamiento de los datos experimentales. La descripción tipo Drude mantiene la forma picuda de la ELF a medida que aumenta  $k$  y no coincide con los datos experimentales para valores elevados de  $k$ .

## 1.5 Poder de frenado

En este apartado presentamos los resultados que se obtienen para el poder de frenado y el straggling de diversos materiales, como aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre, en el caso de que el proyectil es un protón.

El poder de frenado  $S_p$  y el straggling  $\Omega^2$  de cada material fue evaluado a partir de las expresiones (1.23) y (1.26) respectivamente en función de la velocidad  $v$  del proyectil. La ELF fue modelada según el modelo de suma de ELF tipo Mermin.

En las figuras 1.11 a 1.14 hemos representado el poder de frenado de aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre respectivamente, para el caso de un protón que tiene velocidad  $v$ . En cada caso, los datos experimentales están indicados por diferentes símbolos, cuya procedencia está señalada en cada figura. La línea continua representa el cálculo



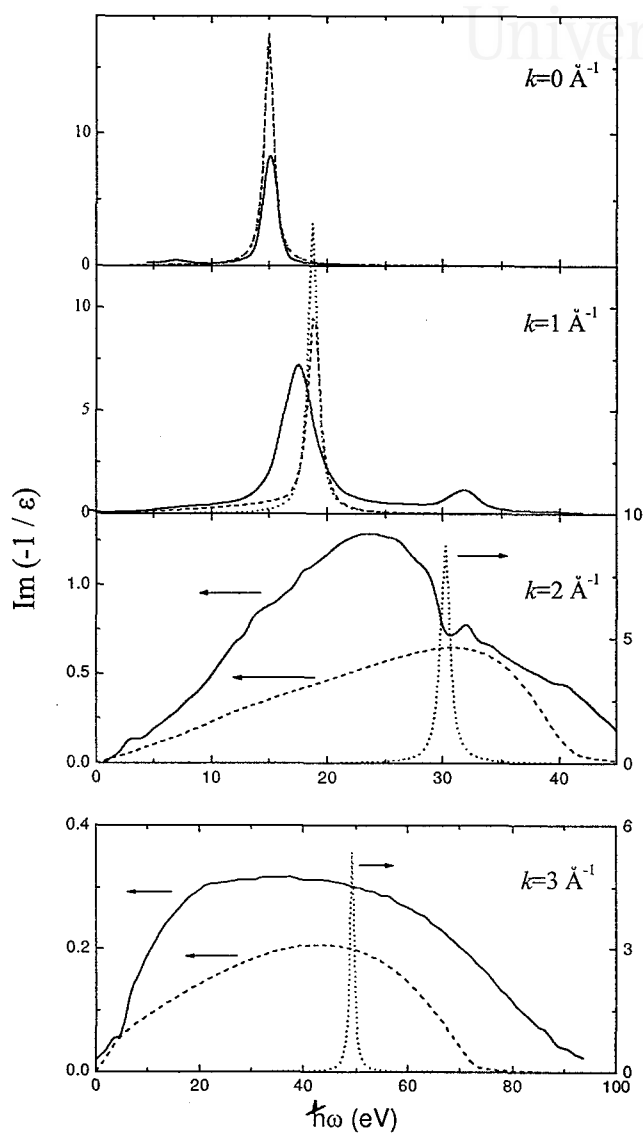


Figura 1.10: Dependencia con  $k$  de la ELF del aluminio. La línea continua representa datos experimentales [Batson y Silcox 1983], la línea rayada representa la evolución del ajuste de Mermin a la ELF a  $k = 0$ , mientras que la línea punteada es la evolución de la ELF tipo Drude.



teórico de  $S_p$  usando un ajuste con ELF tipo Mermin, mientras que la línea rayada representa el cálculo con una ELF tipo Lindhard. Para el caso de un blanco de aluminio (figura 1.11) los resultados de ambos modelos coinciden a bajas velocidades, pero a altas velocidades el uso de una ELF tipo Mermin mejora los resultados, dando mayores poderes de frenado que la descripción de Lindhard y acercándose más a los datos experimentales.

Para el silicio (figura 1.12) ambos modelos para la ELF difieren en el valor del máximo de  $S_p$  y en la cola de altas velocidades, siendo la descripción de Mermin la que mejor ajusta los datos experimentales.

En el caso del carbono amorfo (figura 1.13) ambos modelos para la ELF difieren en los valores de  $S_p$  alrededor del máximo pero coinciden a bajas y altas velocidades. Sin embargo la descripción de Mermin es nuevamente la que mejor describe los datos experimentales en todo el rango de velocidades del protón. La caracterización de las muestras de carbono amorfo merece un comentario aparte ya que en los trabajos experimentales el espesor de la muestra se expresa en función de su densidad y ésta no siempre se indica en los artículos. Por otra parte, la densidad de las muestras depende marcadamente de la forma en que son preparadas. En los trabajos antiguos las muestras eran preparadas por evaporación en arco voltaico, un método muy similar al empleado actualmente para producir  $C_{60}$  [Krätschmer *et al.* 1990], por tanto hemos considerado que la densidad del carbono amorfo para los trabajos antiguos es la del  $C_{60}$ , que vale  $1.7 \text{ g/cm}^3$ , mientras que para trabajos más recientes hemos tomado el valor de  $2 \text{ g/cm}^3$  [Stoner 1991].

Las mayores diferencias en el poder de frenado de los materiales considerados, entre las descripciones de Lindhard y Mermin, aparece en el caso del cobre (figura 1.14), el elemento que tiene el espectro de pérdidas más complejo (figura 1.9) de los que hemos estudiado. Nuevamente, la descripción de Mermin es la que mejor ajusta los datos experimentales de  $S_p$  en todo el rango de velocidades invalidando la descripción basada en el modelo de gas de electrones libres de Lindhard.

Como se puede observar de lo anteriormente expuesto, la descripción dieléctrica de los materiales incluyendo el modelo de suma de ELF tipo Mermin para representar la respuesta del medio da una descripción satisfactoria del poder de frenado,  $S_p$ , de un conjunto de materiales con propiedades electrónicas muy distintas.



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

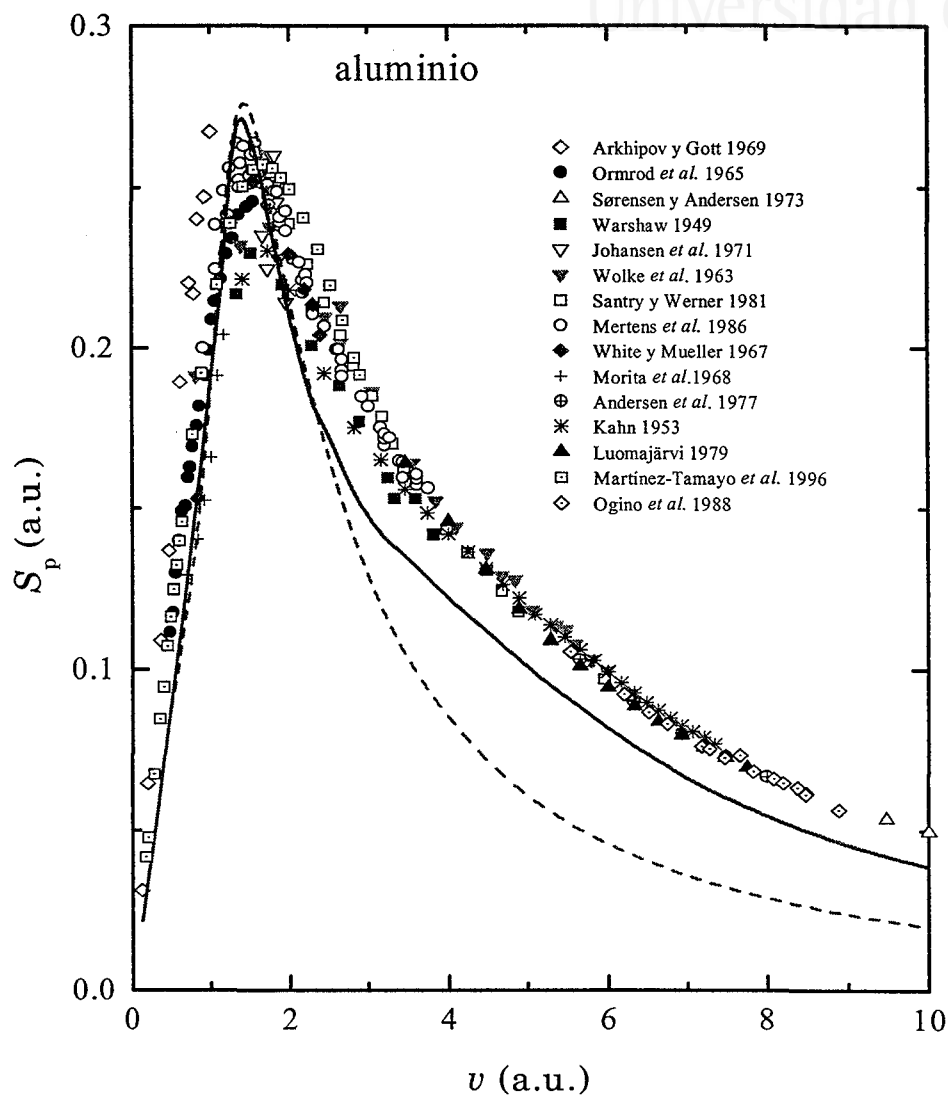


Figura 1.11: Poder de frenado del aluminio para protones. Los símbolos representan diferentes datos experimentales, la línea continua el cálculo usando una ELF tipo Mermin y la línea rayada el cálculo usando una ELF tipo Lindhard.

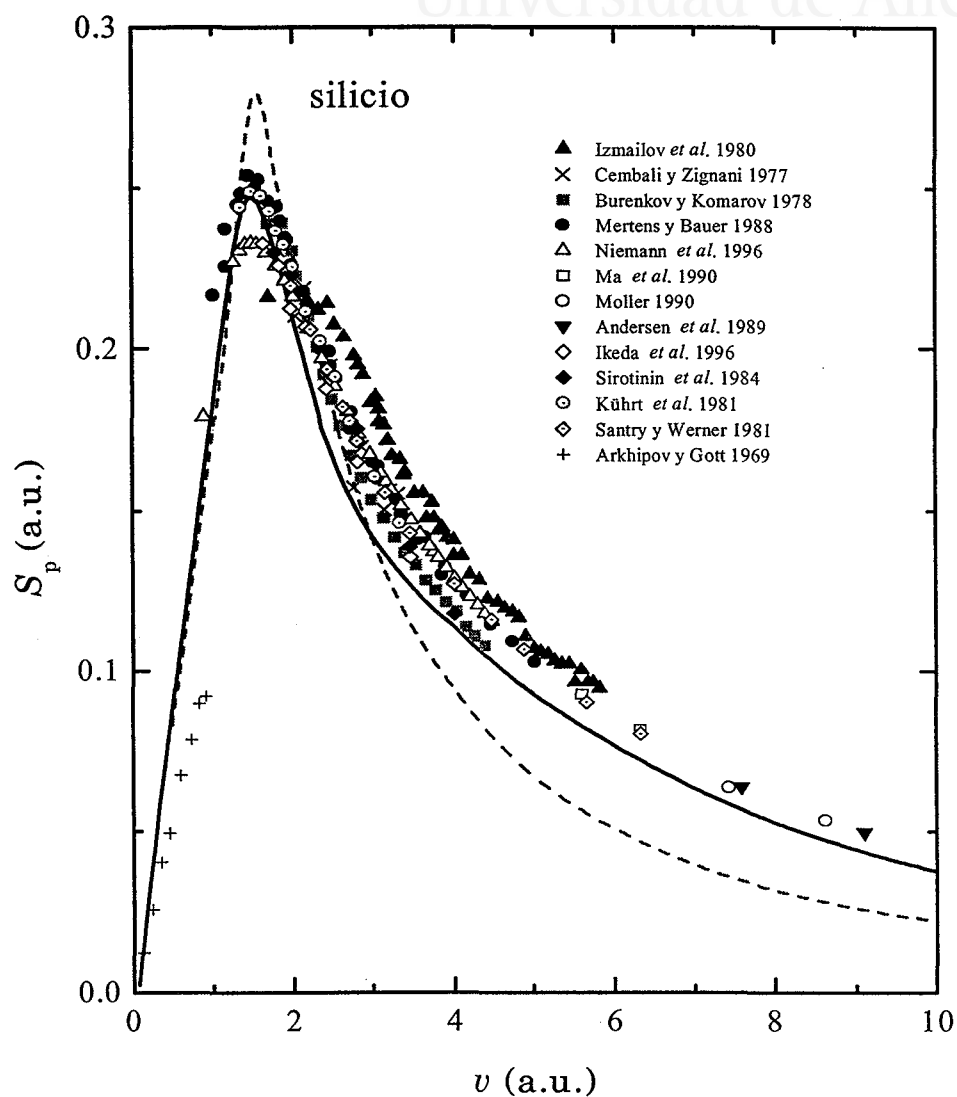


Figura 1.12: Poder de frenado del silicio para protones. Los símbolos representan diferentes datos experimentales, la línea continua el cálculo usando una ELF tipo Mermin y la línea rayada el cálculo usando una ELF tipo Lindhard.

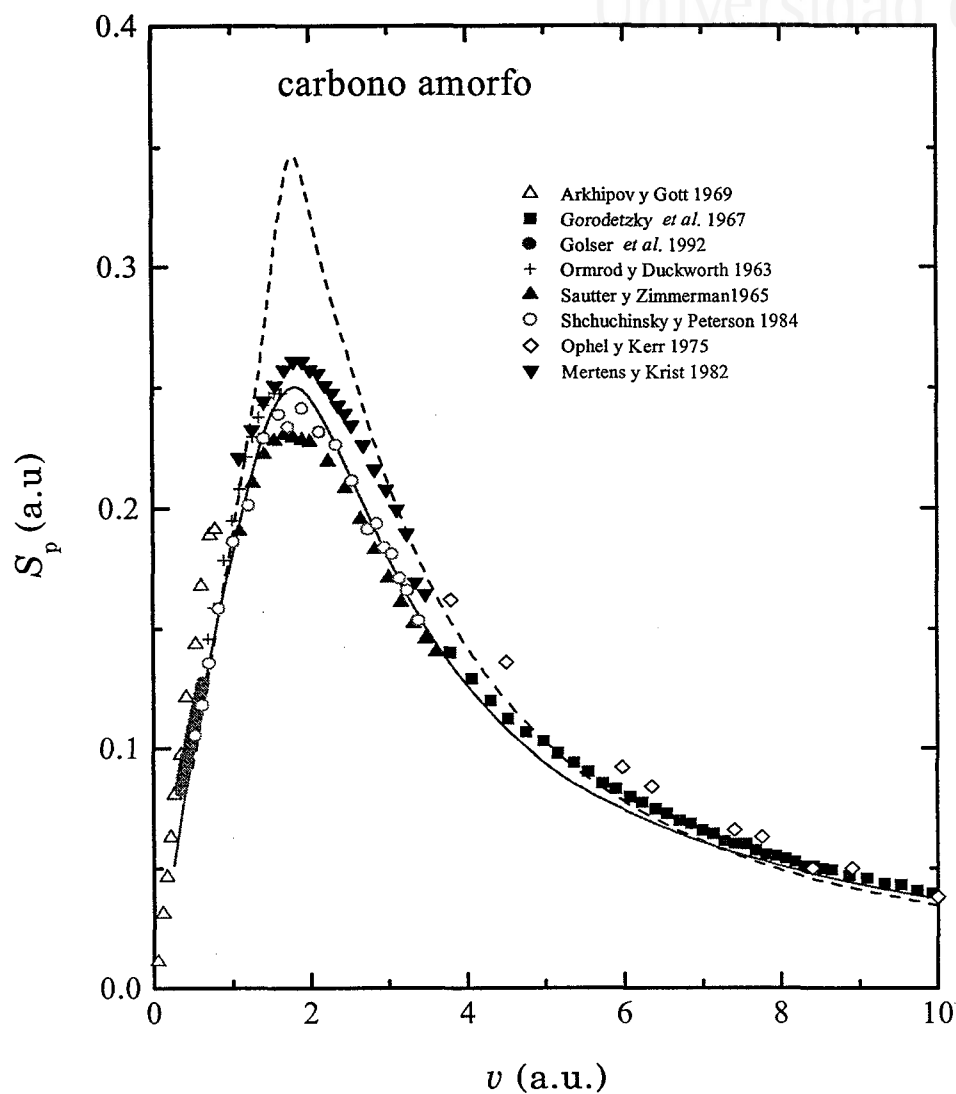


Figura 1.13: Poder de frenado del carbono amorfo para protones. Los símbolos representan diferentes datos experimentales, la línea continua el cálculo usando una ELF tipo Mermin y la línea rayada el cálculo usando una ELF tipo Lindhard.

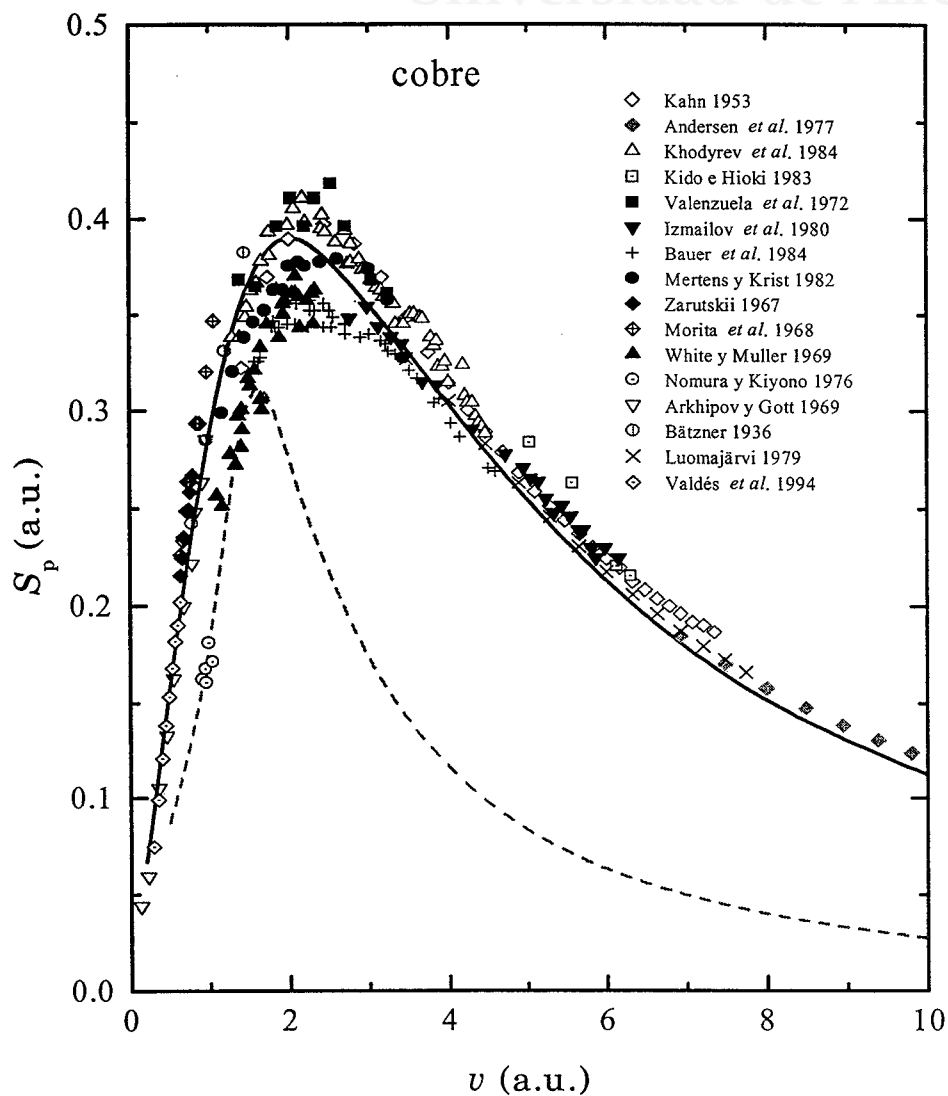


Figura 1.14: Poder de frenado del cobre para protones. Los símbolos representan diferentes datos experimentales, la línea continua el cálculo usando una ELF tipo Mermin y la línea rayada el cálculo usando una ELF tipo Lindhard.

En la figura 1.15 comparamos nuestros cálculos del  $S_p$  con curvas que se han obtenido a partir de la parametrización de gran cantidad de datos experimentales [ICRU 1993, Ziegler 1994]. Debido al método mediante el cual se han obtenido estas curvas es lógico que coincidan mejor con los datos experimentales, pero nuestros cálculos no desmerecen en absoluto de los obtenidos mediante las compilaciones y, lo que es más importante, pueden aplicarse para predecir resultados relativos a materiales que no aparecen recogidos en las compilaciones y obtener otras magnitudes, como por ejemplo el straggling electrónico.

En la figura 1.16 hemos representado el straggling electrónico de aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre para protones, en función de la velocidad del protón. Los cálculos (línea continua) se han realizado empleando la ecuación (1.26) y los datos experimentales (símbolos) proceden de Nomura *et al.* [1976], Kido *et al.* [1997] y Yang *et al.* [1991]. Se observa que el straggling aumenta con la velocidad, y a bajas velocidades se reproduce el correcto comportamiento del straggling con la velocidad en todos los materiales,  $\Omega^2 \propto v^2$ . Los cambios abruptos de pendiente que aparecen a determinadas velocidades están relacionados con el comienzo de la contribución de alguna capa interna a las excitaciones electrónicas, a medida que aumenta la velocidad del protón. En el límite de altas velocidades, cuando todos los electrones del átomo pueden ser excitados, el straggling de cualquier material tiende al straggling de Bohr  $\Omega_B^2$  dado por:

$$\Omega_B^2 = 4\pi N Z_2, \quad (1.40)$$

donde  $Z_2$  es el número atómico de los átomos del blanco. La comparación con los datos experimentales demuestra que nuestro modelo subestima un poco el valor del straggling, sin embargo el acuerdo es razonablemente satisfactorio, dada la dificultad que plantea la determinación experimental del straggling.

Teniendo presente los resultados obtenidos en este capítulo, en esta memoria utilizaremos el formalismo dieléctrico, junto con el modelo de suma de ELF tipo Mermin para describir las propiedades dieléctricas del medio, para calcular la pérdida de energía que sufre una partícula

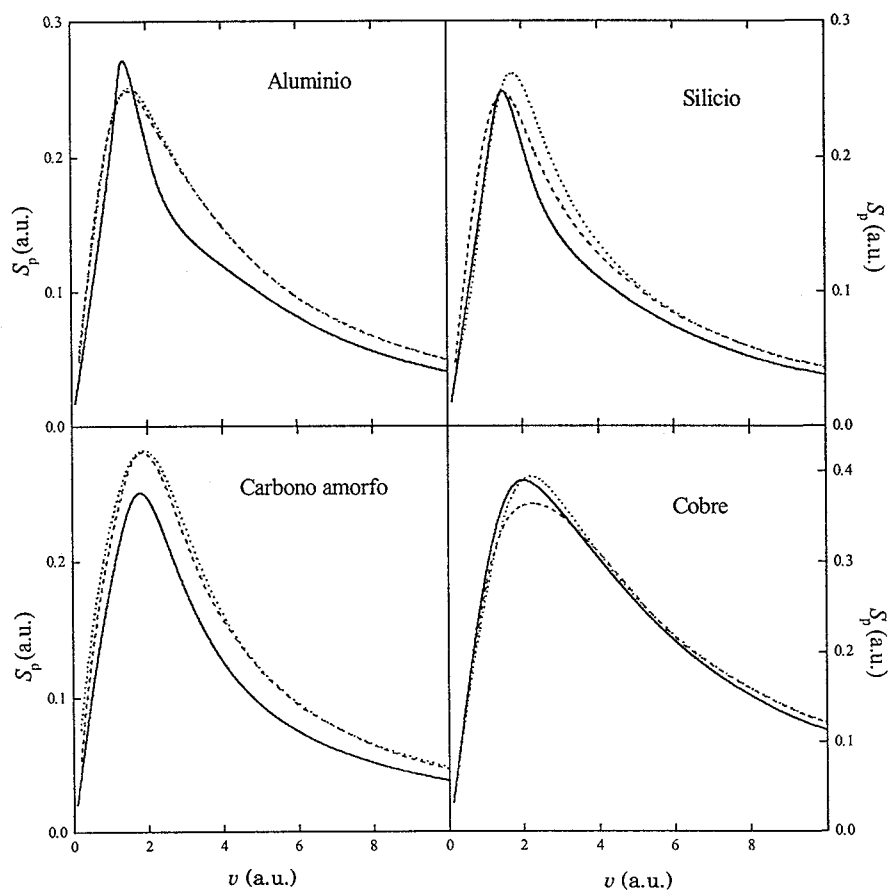


Figura 1.15: Poder de frenado del aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre para protones. Comparación entre el modelo que se emplea en este trabajo (—) y los resultados obtenidos a partir de la parametrización de los datos experimentales mediante curvas analíticas: [ICRU 1993] (— —) y [Ziegler 1994] (···).





Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

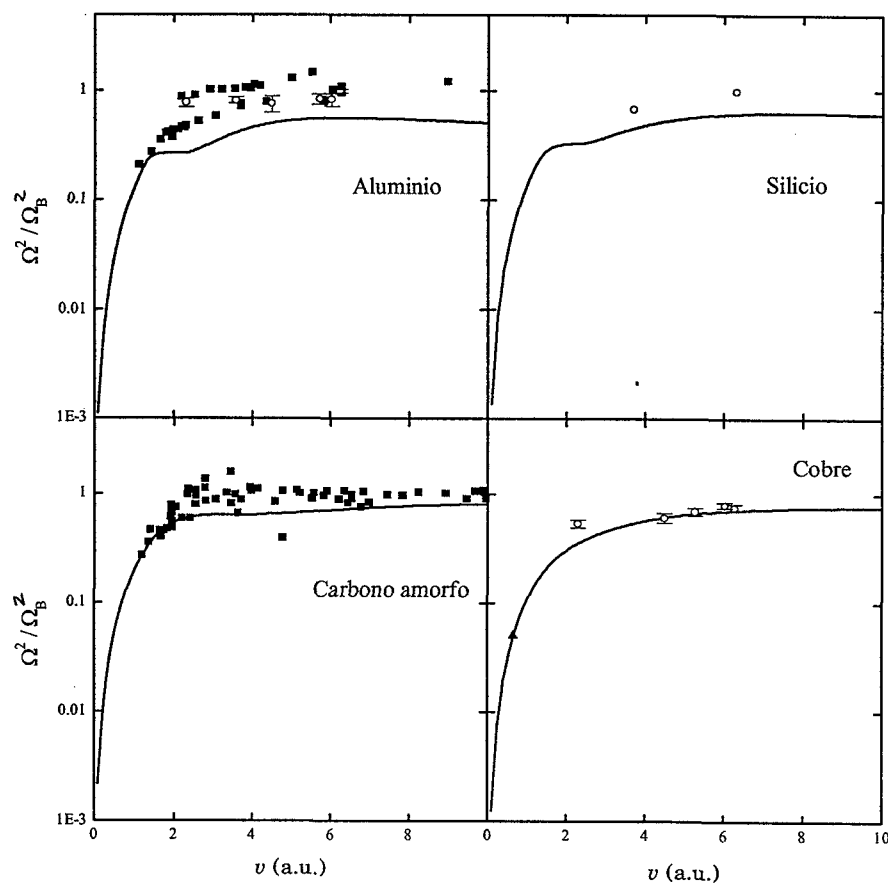


Figura 1.16: Straggling electrónico del aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre para protones, normalizado al straggling de Bohr. Los puntos representan resultados experimentales de: [Kido *et al.* 1987] ( $\bullet$ ), [Yang *et al.* 1991] ( $\square$ ) y [Nomura *et al.* 1976] ( $\triangle$ ).



### 1.5. Poder de frenado

39

cargada al interactuar con un blanco, debido a las excitaciones electrónicas que provoca en el material.

Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

## Capítulo 2

# Interacción de protones con láminas delgadas

### 2.1 Introducción

La interacción de protones con materiales ha sido un tema que ha recibido mucha atención desde el principio de este siglo. Hay muchas referencias que describen los procesos básicos que tienen lugar, desde el clásico artículo de Bohr [1948], hasta recientes proceedings [Gras-Martí *et al.* 1990] o libros de texto [Kumakhov 1981, Balashov 1997]. Sin embargo hay algunos aspectos de este tema que merecen un análisis más detallado y realista, tal como se ha discute en [Denton *et al.* 1998a], por ejemplo.

En el capítulo anterior, a partir del formalismo dieléctrico hemos descrito como calcular el frenado debido a las interacciones electrónicas que sufre un protón al atravesar un material. Para energías altas del protón ( $E \gtrsim 10$  keV), como es el caso que nos ocupa en esta memoria, el frenado electrónico es el principal responsable de la pérdida de energía del proyectil. Sin embargo el formalismo dieléctrico no considera la dependencia del poder de frenado con la velocidad instantánea del proyectil en cada punto de su trayectoria, ni tiene en cuenta las colisiones nucleares que pueden dar lugar a un cambio en la dirección de movimiento del proyectil y a una pérdida de energía.

Para subsanar todas estas deficiencias, hemos desarrollado un código

de simulación basado en dinámica molecular, el cual permite seguir la trayectoria del protón cuando atraviesa el material. Este código resuelve las ecuaciones de movimiento del proyectil, usando en cada instante una fuerza de frenado que dependerá de la velocidad instantánea del protón. La fuerza autofrenante que experimenta el proyectil no vale siempre la misma cantidad sino que varía a medida que cambia su velocidad, como puede observarse en las figuras (1.11-1.14). Este hecho puede hacer que el cálculo de la pérdida de energía que sufre un protón al atravesar una lámina difiera del caso en que se considerare una fuerza autofrenante constante en el tiempo. Esta diferencia será mayor si el espesor de la lámina crece.

Combinando la simulación de dinámica molecular con un modelo tipo Monte Carlo incluiremos el scattering nuclear en nuestro programa, lo cual nos permitirá realizar un análisis sobre los efectos de las colisiones nucleares en el movimiento (frenado y desviación angular) de los proyectiles. Este proceso tendrá mayor importancia a bajas velocidades del proyectil, cuando el protón puede desviarse ángulos mayores y perder más energía debido a scattering nuclear. En el apartado 2.2 se describirá la técnica de dinámica molecular y en el apartado 2.4.2 el modelo de Monte Carlo.

El tercer y último ingrediente que añadiremos al programa es el hecho de que el poder de frenado electrónico no está definido unívocamente para una velocidad dada, sino que es una magnitud que fluctúa según una distribución de valores centrada alrededor de  $S_p(v)$  y con un ancho dado por el straggling  $\Omega^2$ , tal como se ha detallado en la sección 1.2.2.

Finalizaremos este capítulo aplicando nuestro programa para obtener la distribución de pérdidas de energía de un protón en diferentes materiales (tales como aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre). Analizaremos la dependencia de la pérdida de energía de un protón tanto con la velocidad del proyectil como con el espesor de la lámina atravesada. También estudiaremos la distribución angular que poseen los protones a la salida de la lámina, así como la distribución conjunta de la pérdida de energía en función del ángulo de salida. A lo largo de estos análisis y discusiones compararemos nuestro modelo con diferentes resultados experimentales.



## 2.2 Dinámica molecular

La dinámica molecular es una técnica de simulación numérica que permite seguir la evolución dinámica de un grupo de partículas resolviendo las ecuaciones de Newton que describen el movimiento del sistema:

$$m_i \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t} = \vec{p}_i \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} = -\vec{\nabla}_i V = \vec{F}_i, \quad (2.2)$$

donde  $i$  se refiere a cada una de las partículas del sistema.

Esta técnica ha sido usada con éxito para la resolución de problemas tanto en sólidos como en líquidos [Allen y Tildesley 1987, Rapaport 1995]. La creciente capacidad de cálculo de los ordenadores actuales permite realizar simulaciones cada vez más precisas de sistemas reales, incluyendo mayor número de partículas en los cálculos.

La idea general del método de dinámica molecular es la siguiente: dadas las coordenadas y velocidades de un sistema de partículas en un tiempo  $t$ , es posible predecir con suficiente precisión sus nuevas coordenadas y velocidades en un instante de tiempo posterior,  $t + \Delta t$ . Las ecuaciones de movimiento se resuelven paso a paso describiendo las trayectorias de todas las partículas del sistema. Esta discretización en tiempo de las ecuaciones de movimiento se realiza mediante algoritmos de diferencia finita.

Nosotros aplicamos la técnica de dinámica molecular al caso de sistemas formados por pocas partículas (2 protones en el caso de la molécula de  $H_2^+$ ), pero el programa que hemos desarrollado podría modificarse para considerar moléculas más complejas.

### 2.2.1 Algoritmos más usados

Existen muchos algoritmos y la elección de uno u otro va a depender de las características de la simulación que se desea realizar. En general puede decirse que un buen algoritmo debe de ser rápido y requerir poca memoria, debe de permitir el uso de un paso de tiempo  $\Delta t$  grande, ha de obtener la réplica de la trayectoria clásica de la partícula lo más

precisamente posible, tiene que satisfacer las leyes de conservación de energía y momento y ser reversible en el tiempo y, por último, debe de ser simple y fácil de programar. Los algoritmos más usados son los de predicción-corrección o el algoritmo de Verlet en sus diferentes variantes [Allen y Tildesley 1987]. Las ecuaciones que relacionan la posición y velocidad de la partícula en dos instantes de tiempo consecutivos en el algoritmo de Verlet, vienen dadas por:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = 2\vec{r}(t) - \vec{r}(t - \Delta t) + \Delta t^2 \vec{a}(t) \quad (2.3)$$

$$\vec{v}(t) = \frac{\vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (2.4)$$

A este esquema de Verlet básico se le han realizado modificaciones para mejorar sus deficiencias. Una de estas modificaciones es la variante “salto de rana” de medio paso:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \vec{v}(t + \Delta t/2) \quad (2.5)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t/2) = \vec{v}(t - \Delta t/2) + \Delta t \vec{a}(t) \quad (2.6)$$

$$\vec{v}(t) = \frac{1}{2} [\vec{v}(t + \Delta t/2) + \vec{v}(t - \Delta t/2)], \quad (2.7)$$

o la variante “velocidad”:

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \Delta t \vec{v}(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \vec{a}(t) \quad (2.8)$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t) + [\vec{a}(t) + \vec{a}(t + \Delta t)] \Delta t/2 \quad (2.9)$$

La elección del paso de tiempo  $\Delta t$  es crucial para la rapidez y precisión del algoritmo. Los criterios para elegir un valor adecuado de  $\Delta t$  tienen en cuenta la velocidad de las partículas y las fuerzas de interacción entre ellas. Una prueba de que el valor de paso de tiempo usado es correcto es la comprobación de que la energía se conserva a lo largo de la simulación.

En esta memoria se ha usado la variante “velocidad” del algoritmo de Verlet para describir la trayectoria de cada proyectil a medida que viaja por el interior del material, y hemos trabajado con  $\Delta t \simeq (100v)^{-1}$  porque hemos comprobado que se satisfacen las condiciones de conservación de la energía para el rango de velocidades que trabajamos.



## 2.3 Poder de frenado electrónico instantáneo

En este apartado describiremos un modelo que nos permitirá obtener el poder de frenado instantáneo que sufre un proyectil al atravesar un material

El poder de frenado de un proyectil se puede describir en buena aproximación por una distribución gaussiana cuyo valor medio está relacionado con el poder de frenado  $S_p$  y su anchura con el straggling  $\Omega^2$ . La forma funcional de una distribución gaussiana resulta ser:

$$p(w) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Lambda} \exp\left(-\frac{(w - \bar{w})^2}{2\Lambda^2}\right), \quad (2.10)$$

donde  $\bar{w}$  es el valor medio y  $\Lambda$  es la desviación standard de la distribución gaussiana. Según la ecuación anterior, la distribución gaussiana está normalizada, esto es:

$$\int_{-\infty}^{\infty} p(w)dw = 1. \quad (2.11)$$

Con el método de Box-Muller [Press *et al.* 1986] es posible generar números aleatorios dentro de una distribución gaussiana. Consideremos una distribución gaussiana de ancho  $\Lambda = 1$  y la siguiente transformación:

$$w_1 = \sqrt{-2 \ln x_1} \cos(2\pi x_2) \quad (2.12)$$

$$w_2 = \sqrt{-2 \ln x_1} \sin(2\pi x_2), \quad (2.13)$$

donde  $x_1$  y  $x_2$  son dos números aleatorios distribuidos uniformemente entre 0 y 1. Equivalentemente podemos escribir:

$$\begin{aligned} x_1 &= \exp\left[-\frac{1}{2}(w_1^2 + w_2^2)\right] \\ x_2 &= \frac{1}{2\pi} \arctan\left(\frac{w_2}{w_1}\right) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Si calculamos el Jacobiano de esta transformación obtenemos:



$$\begin{aligned} \frac{\partial(x_1, x_2)}{\partial(w_1, w_2)} &= \begin{vmatrix} \partial x_1 / \partial w_1 & \partial x_1 / \partial w_2 \\ \partial x_2 / \partial w_1 & \partial x_2 / \partial w_2 \end{vmatrix} = \\ &= - \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{w_1^2}{2}\right) \right] \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{w_2^2}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (2.15)$$

Se observa que el Jacobiano es el producto de una función que depende únicamente de  $w_1$  por otra que depende únicamente de  $w_2$ , entonces tanto  $w_1$  como  $w_2$  están distribuidas independientemente de acuerdo a una distribución gaussiana. Por lo tanto, sorteando dos números aleatorios  $x_1$  y  $x_2$  uniformemente distribuidos entre 0 y 1 y usando la transformación dada por las ecuaciones (2.12) y (2.13) obtenemos otros dos números aleatorios  $w_1$  y  $w_2$  que responden a una distribución gaussiana. La generalización a una distribución de ancho  $\Lambda \neq 1$  se realiza sustituyendo la variable  $w$  por  $h = w\Lambda$ . Si el valor medio de la distribución no es nulo, hay que sumárselo a los valores obtenidos a partir del sorteo.

Relacionando la discusión anterior con las variables de interés en nuestro caso, la distribución de pérdida de energía  $\Delta E$  que sufre un proyectil al recorrer una distancia  $\Delta z$  dentro de un material será:

$$p(\Delta E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sqrt{\Omega^2\Delta z}} \exp\left[-\frac{\Delta E^2}{2\Omega^2\Delta z}\right], \quad (2.16)$$

donde  $\Omega^2 = \overline{\Delta E^2}/\Delta z$  es el straggling<sup>1</sup> y  $\overline{\Delta E^2}$  es la varianza de la distribución anterior. En nuestro código, el movimiento del proyectil está discretizado en pasos de tiempo  $\Delta t$  a través de la dinámica molecular, este paso de tiempo se corresponderá con un intervalo de distancia  $\Delta z = v\Delta t$ , donde  $v$  es la velocidad instantánea del ion en cada intervalo temporal.

Sorteando los valores de  $u$  por el método de Box-Muller obtenemos una distribución gaussiana para  $u$  y luego realizando el cambio de variable  $u = \Delta E / (\Omega\sqrt{\Delta z})$ , obtenemos los valores de  $\Delta E$  que ocurren tras

<sup>1</sup>De momento, hemos considerado que  $\overline{\Delta E} = 0$ , para simplificar los cálculos. En la ecuación (2.17) ya consideraríamos que  $\overline{\Delta E} \neq 0$  y se lo añadimos al valor sorteado, para obtener finalmente la energía perdida en un recorrido  $\Delta z$ .





un recorrido  $\Delta z$ . De este modo, obtenemos que el ion pierde una energía:

$$\Delta E = \overline{\Delta E} + \Omega \sqrt{\Delta z} u \quad (2.17)$$

en el intervalo de tiempo  $\Delta t$ .

La pérdida de energía por unidad de camino recorrido vale  $\Delta E/\Delta z$  en cada intervalo  $\Delta z$  y como la fuerza es  $F = -\Delta E/\Delta z$ , de este modo obtenemos la fuerza a la que está sometido el protón en cada intervalo de tiempo. Esta fuerza se usará por medio del algoritmo de dinámica molecular para resolver las ecuaciones de movimiento del protón y describir la trayectoria que realiza dentro del material.

## 2.4 Tratamiento del scattering elástico

### 2.4.1 Teoría clásica de scattering

Como se ha mencionado anteriormente, es importante tener en cuenta el efecto de las colisiones elásticas del proyectil con los núcleos del blanco, ya que éstas hacen que el proyectil se desvíe de su dirección inicial, además de contribuir en menor medida a la pérdida de energía. Una manera de especificar la colisión elástica binaria entre un proyectil y un átomo blanco es a través de la magnitud llamada sección eficaz de colisión  $\sigma$ . Ésta representa el número de partículas dispersadas por unidad de tiempo y partícula blanco y por unidad de flujo de proyectiles. Otra magnitud de interés es la sección eficaz diferencial de scattering elástico  $d\sigma/d\Omega$ , que nos informa sobre el número de partículas que se dispersa en cada ángulo  $d\Omega$ .

En la figura 2.1 vemos el esquema de una colisión clásica entre el proyectil y uno de los átomos del blanco, en el sistema laboratorio. Los subíndices 1 y 2 se refieren al proyectil y al blanco, respectivamente. El proyectil, que inicialmente posee energía  $E$ , transfiere al blanco durante la colisión una cantidad de energía  $T$ . Este problema se trata mucho mejor en el sistema centro de masa, dada la simetría que posee. En la figura 2.2 observamos un esquema de la misma colisión en el sistema centro de masa; en este caso el problema se reduce al tratamiento de la dispersión de una sola partícula (con la masa reducida del sistema) por

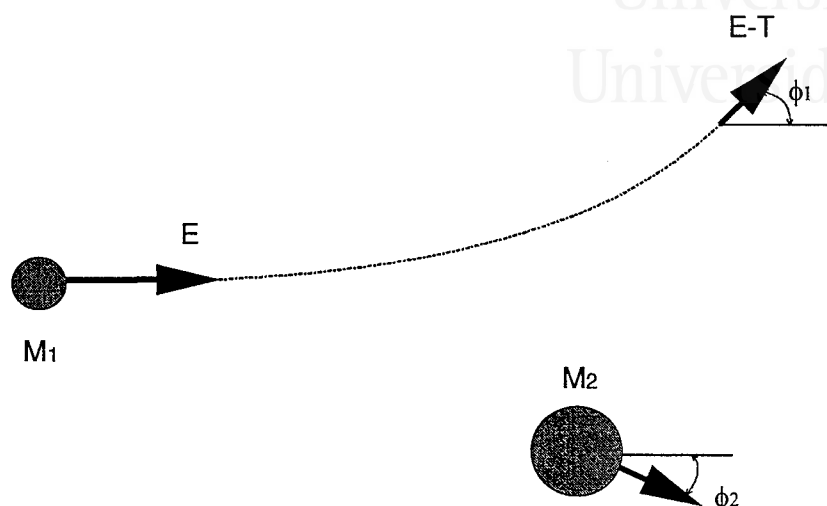


Figura 2.1: Colisión elástica entre dos partículas en el sistema laboratorio.  $M_1$  y  $M_2$  son las masas del proyectil y del átomo blanco, respectivamente, mientras que  $\phi_1$  y  $\phi_2$  son los respectivos ángulos de scattering. La energía inicial del proyectil es  $E$  y en la colisión se transfiere una cantidad de energía  $T$  al blanco.

un potencial central, igual al potencial interatómico  $V$ . El parámetro de impacto  $b$  es la distancia transversal desde el proyectil al centro de fuerzas.

Es inmediato relacionar todas las cantidades del sistema laboratorio con las del sistema centro de masa. Por ejemplo los ángulos de scattering en el sistema laboratorio ( $\phi_1$  y  $\phi_2$ ) y en el sistema centro de masa ( $\theta$ ) están relacionados por [Goldstein 1953]:

$$\tan \phi_1 = \frac{\chi \sin \theta}{1 + \chi \cos \theta} \quad (2.18)$$

$$\phi_2 = \frac{\pi - \theta}{2} \quad (2.19)$$

donde  $\chi = M_2/M_1$ . Las secciones eficaces total y diferencial en ambos sistemas de referencia están relacionadas por:

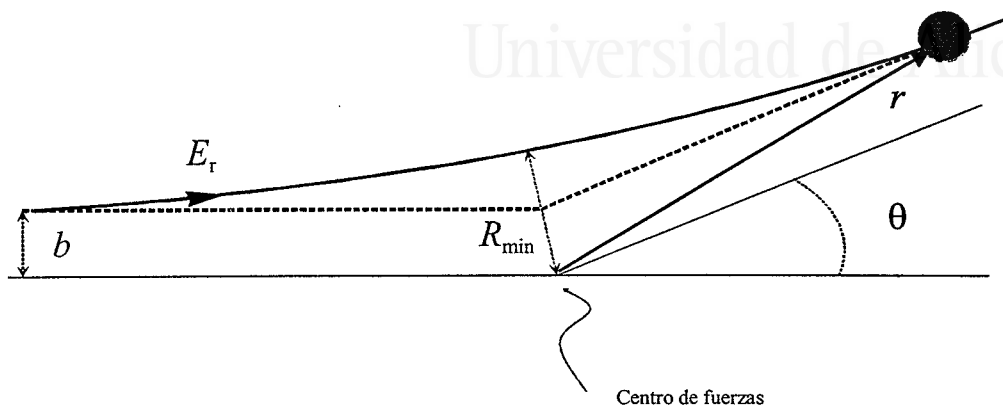


Figura 2.2: Colisión elástica en el sistema centro de masa.  $\theta$  es el ángulo de scattering en este sistema, y  $r$  es la distancia entre el centro de fuerzas y el proyectil.

$$\sigma_{\text{lab}} = \sigma_{\text{CM}} \quad (2.20)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\text{lab}}} = \frac{d\sigma}{d\Omega_{\text{CM}}} \frac{(\chi^2 + 2\chi \cos \theta + 1)^{3/2}}{\chi |\chi + \cos \theta|} \quad (2.21)$$

La sección eficaz de colisión elástica en el sistema centro de masa se puede calcular a partir de la siguiente expresión:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{-b}{\sin \theta} \frac{db}{d\theta} \quad (2.22)$$

sabiendo que la relación entre el ángulo de scattering  $\theta$  y el parámetro de impacto  $b$  es:

$$\theta = \pi - 2b \int_{R_{\min}}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - V(r)/E_r - b^2/r^2}} \quad (2.23)$$

donde  $E_r = 4M_1M_2E/(M_1 + M_2)^2$  es la máxima energía transferible en la interacción,  $r$  es la distancia entre el centro de fuerzas y el proyectil, y  $R_{\min}$  es la distancia de mínimo acercamiento entre el proyectil

y el centro de fuerzas y se corresponde con un cero del radicando en la ecuación (2.24). Por lo tanto, una vez conocido el potencial de interacción  $V(r)$  entre el proyectil y el blanco, a través de las ecuaciones (2.23) y (2.24) se obtiene la sección eficaz de la colisión.

### 2.4.2 Método de Monte Carlo para el scattering nuclear

En esta sección se explicará el modelo de colisión binaria descrito por Moller *et al.* [1975] y empleado por Zafjman *et al.* [1990] para simular mediante la técnica de Monte Carlo el scattering nuclear sufrido por los proyectiles al atravesar un blanco. En la descripción que sigue se usarán unidades reducidas tanto para el camino  $\ell$  recorrido entre dos colisiones sucesivas, como para la energía  $E$  del proyectil; estas magnitudes están definidas de la siguiente manera:

$$\xi = \frac{4\pi a^2 \mu \mathcal{N}}{M_1 + M_2} \ell \quad (2.24)$$

$$\varepsilon = \frac{a M_2}{Z_1 Z_2 (M_1 + M_2)} E \quad (2.25)$$

$Z_1$  y  $Z_2$  representan los números atómicos del proyectil y del blanco, respectivamente,  $\mu = M_1 M_2 / (M_1 + M_2)$  es la masa reducida y  $\mathcal{N}$  es el número de átomos del blanco por unidad de volumen la distancia de apantallamiento del potencial de interacción es [Ziegler *et al.* 1985]:

$$a = 0.8853 \left( Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{-1/2} \quad (2.26)$$

Supondremos que el potencial de interacción entre el proyectil y el átomo del blanco corresponde a un potencial coulombiano apantallado de la forma

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} \Phi\left(\frac{r}{a}\right), \quad (2.27)$$

donde  $\Phi(r/a)$  es la función de apantallamiento de Thomas-Fermi [Ziegler *et al.* 1985]

En unidades reducidas, la sección eficaz total se expresa:

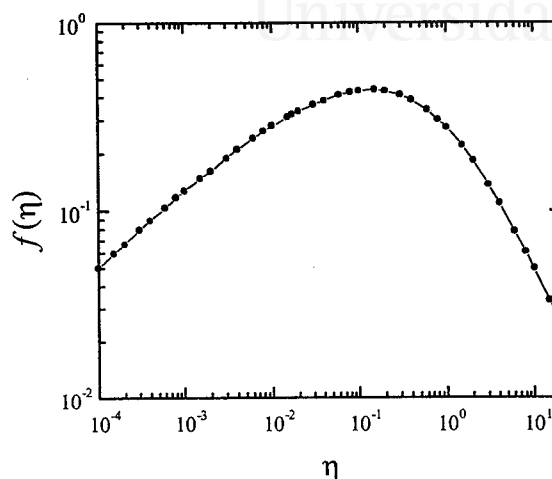


Figura 2.3: Función  $f(\eta)$ . Los puntos representan la tabulación que aparece en [Meyer 1971] y la línea es la interpolación que hemos empleado en este trabajo.

$$J_{\text{tot}} = \frac{\sigma_{\text{tot}}}{\pi a^2} \quad (2.28)$$

Pero para determinar el ángulo que se desvía el proyectil tras cada colisión elástica se necesita conocer la sección eficaz diferencial, que en unidades reducidas tiene la forma:

$$\frac{dJ}{d\eta} = \frac{f(\eta)}{\eta^2} \quad (2.29)$$

donde  $\eta = \varepsilon \sin(\theta/2)$  es la cantidad reducida que corresponde al ángulo  $\theta$  en el sistema centro de masa. La función  $f(\eta)$  fue calculada por Meyer [1971] y tiene la forma representada en la figura 2.3.

Si suponemos que cada centro de dispersión será efectivo dentro de un volumen esférico de radio  $r_0$ , igual a la mitad de la distancia entre átomos vecinos,

$$r_0 = \frac{1}{2} \mathcal{N}^{-1/3}, \quad (2.30)$$

entonces  $\sigma_{\text{tot}} = \pi r_0^2$ , con lo cual la sección eficaz total en unidades reducidas estará dada por

$$J_{\text{tot}} = \left( \frac{r_0}{a} \right)^2 \quad (2.31)$$

Esta restricción impone un ángulo de dispersión mínimo  $\eta_{\text{min}}$ , determinado por la sección eficaz total de manera que se satisfaga:

$$J_{\text{tot}} = \int_{\eta_{\text{min}}}^{\varepsilon} \frac{dJ}{d\eta'} d\eta' = J(\varepsilon) - J(\eta_{\text{min}}) \quad (2.32)$$

### Cálculo del camino libre medio

Para calcular el recorrido entre dos colisiones sucesivas y los ángulos de scattering tras cada colisión, necesitamos tres números aleatorios  $k_1$ ,  $k_2$  y  $k_3$ , mutuamente independientes y uniformemente distribuidos entre 0 y 1.

La distancia que viaja el proyectil entre dos colisiones nucleares sucesivas se determina por el método de Monte Carlo. De la definición de sección eficaz y suponiendo que los átomos en el sólido tienen una distribución homogénea, la probabilidad  $k_1$  de colisión es una función de la distancia  $\ell$  recorrida, dada por:

$$k_1 = 1 - \exp(-n\sigma_{\text{tot}}\ell) = 1 - \exp\left(\frac{-(M_1 + M_2) J_{\text{tot}} \xi}{4\mu}\right) \quad (2.33)$$

siendo  $\xi$  el recorrido (en unidades reducidas) entre dos colisiones sucesivas. Por lo tanto, para un valor al azar de  $k_1$  uniformemente distribuido entre 0 y 1, es posible obtener  $\xi$  de la siguiente manera:

$$\xi = \frac{-4\mu}{M_1 + M_2} \frac{\ln(k_1)}{J_{\text{tot}}} \quad (2.34)$$



### Cálculo de los ángulos de scattering

A partir de la ecuación (2.33) y el número aleatorio  $k_2$  podemos calcular el ángulo de scattering reducido  $\eta$  en el sistema centro de masa. Puesto que

$$0 \leq \frac{J(\eta) - J(\eta_{\min})}{J_{\text{tot}}} \leq 1, \quad (2.35)$$

podemos escribir:

$$k_2 = \frac{J(\eta) - J(\eta_{\min})}{J_{\text{tot}}} \quad (2.36)$$

con lo cual:

$$\eta = J^{-1} [J(\varepsilon) + (k_2 - 1) J_{\text{tot}}] \quad (2.37)$$

donde  $J^{-1}$  es la función inversa de  $J$ . A efectos prácticos y para reducir tiempo de cálculo, primero se integra la función  $J(\eta)$ , ecuación (2.30), y luego se tabula.  $J(\varepsilon)$  y  $\eta$  se pueden obtener por interpolación de los valores tabulados.

El ángulo polar de scattering en el sistema centro de masa,  $\theta$ , se puede obtener a partir de  $\eta$  de la siguiente forma:

$$\cos \theta = \left(1 - \frac{2\mu\eta^2}{M_1^2}\right) \left(1 - \frac{4\mu\eta^2}{(M_1 + M_2)^2}\right) \quad (2.38)$$

El ángulo azimutal  $\psi$  de cada colisión se elige a partir de una distribución uniforme entre 0 y  $2\pi$ , para lo cual se usa el tercer número aleatorio,

$$\psi = 2\pi k_3. \quad (2.39)$$

La dirección de movimiento del proyectil tras cada colisión está definida por dos ángulos direccionales:  $\Theta_i$  (polar) y  $\Psi_i$  (azimutal), referidos a la dirección inicial de movimiento del proyectil. En la figura 2.4 aparecen representados los ángulos  $(\Theta_i, \Psi_i)$  y  $(\Theta_{i+1}, \Psi_{i+1})$  que intervienen en las colisiones que hay al principio y al final, respectivamente, de un recorrido  $\ell$ . Para un proceso de scattering con ángulos  $(\theta, \psi)$  en el sistema de referencia centro de masa, resulta la siguiente relación:

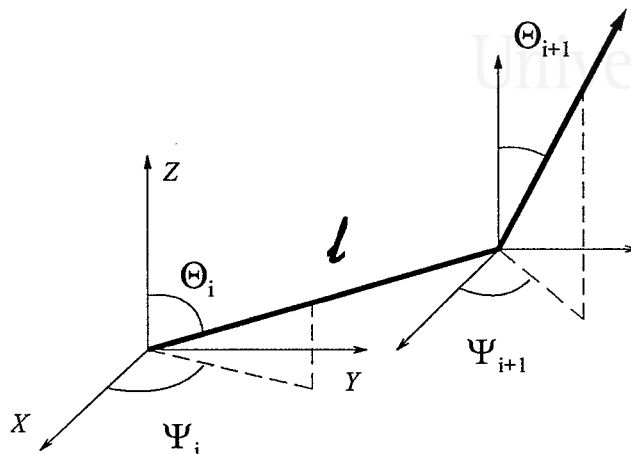


Figura 2.4: Esquema de los ángulos que intervienen en las colisiones elásticas que tiene lugar al principio y al final de un recorrido de longitud  $\ell$ .

$$\cos \Theta_{i+1} = -\sin \theta \cos \psi \sin \Theta_i + \cos \theta \cos \Theta_i \quad (2.40)$$

$$\cos \Psi_{i+1} = \frac{1}{\sin \Theta_{i+1}} (\sin \theta \cos \psi \cos \Theta_i \cos \Psi_i - \sin \theta \sin \psi \sin \Psi_i + \cos \theta \sin \Theta_i \cos \Psi_i) \quad (2.41)$$

### Cálculo de la pérdida de energía

La energía  $T$  que transfiere un proyectil al experimentar una colisión elástica con un núcleo del material está relacionada con el ángulo de scattering  $\theta$  en el sistema centro de masa, a través de:

$$T = \frac{4M_1M_2E}{(M_1 + M_2)^2} \sin^2(\theta/2) \quad (2.42)$$

Por lo tanto se observa que mientras mayor sea el ángulo de scattering, mayor será la energía que perderá el protón debida a scattering nuclear. Dentro del programa de Monte Carlo que hemos desarrollado, al obtener





## 2.5. Distribución de la energía perdida por un haz de protones 55

el ángulo  $\theta$  también calculamos la energía  $T$  que pierde el proyectil en esa colisión.

Como resumen de este apartado, tenemos que las colisiones nucleares se incluyen de la siguiente forma práctica. En cada instante el protón lleva una cierta dirección de movimiento, determinada por los ángulos  $\Theta_i$  y  $\Psi_i$ . Mediante el método de Monte Carlo que acabamos de describir se realiza un sorteo de la distancia  $\ell$  entre colisiones sucesivas, y la partícula evoluciona temporalmente sin colisionar hasta que se llega a un tiempo  $t = \ell/v$ . En este instante tiene lugar una colisión elástica y mediante la simulación por Monte Carlo se sorteán los ángulos de colisión  $\theta$  y  $\psi$ , lo cual dará lugar a una nueva dirección de movimiento del protón caracterizada por los ángulos  $\Theta_{i+1}$  y  $\Psi_{i+1}$ . En el caso más general, la evolución del protón entre dos colisiones elásticas sucesivas no es libre sino que está determinada por la fuerza de autofrenado que actúa sobre éste; el código de dinámica molecular que hemos discutido anteriormente se aplica para seguir el movimiento de cada protón entre dos colisiones elásticas sucesivas.

Como el programa nos permite conocer las coordenadas y la velocidad de cada protón en todo instante, podemos determinar qué velocidad tiene cuando ha recorrido el espesor de la lámina. De este modo, la energía que pierde al atravesar la lámina será la diferencia entre la energía cinética  $E = M_1 v^2/2$  que tenía al entrar y la que tiene al salir  $E = M_1 v_{\text{salida}}^2/2$ .

## 2.5 Distribución de la energía perdida por un haz de protones

A pesar de que la técnica de simulación por dinámica molecular es totalmente determinista, la naturaleza estocástica tanto de las colisiones nucleares como del poder de frenado electrónico que sufre el proyectil, para cada combinación de material y velocidad del protón, hace que tengamos que ejecutar numerosas historias. A partir de estas historias se ha realizado un estudio estadístico y se ha calculado la distribución energética de los protones a la salida de la lámina para distintos espesores. A partir de estas distribuciones, es posible obtener el valor medio



y el ancho de la distribución de pérdida de energía. En la mayoría de los casos discutidos en este capítulo se han simulado del orden de 50000 o más historias.

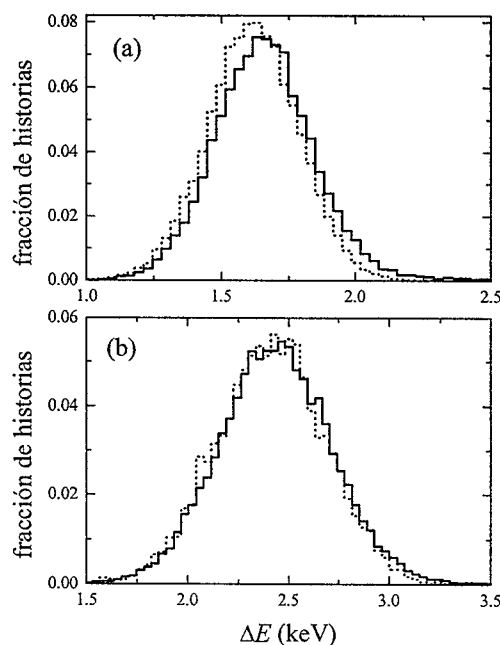


Figura 2.5: Distribución de pérdida de energía para un haz de protones de energía (a)  $E = 10$  keV y (b)  $E = 25$  keV, después de atravesar una lámina de carbono amorfo de  $265 \text{ \AA}$  de espesor. La línea continua corresponde al cálculo que tiene en cuenta las colisiones nucleares en las simulaciones, mientras que la línea discontinua muestra los resultados que se obtienen al no incluir las colisiones nucleares. En ambos casos se ha incluido el straggling en el frenado electrónico.

En la figura 2.5 se presentan los cálculos de las distribuciones de pérdida de energía, que sufre un haz de protones, para las energías incidentes  $E = 10$  keV y  $E = 25$  keV, después de atravesar una lámina de carbono amorfo de  $265 \text{ \AA}$ . A efectos de valorar la importancia de las colisiones nucleares hemos representado el caso en que sí se incluyen en la



## 2.5. Distribución de la energía perdida por un haz de protones 57

simulación (línea continua) y el caso en que no se incluyen (línea discontinua); en ambos casos se incluyó el straggling en el frenado electrónico. Como se puede observar, el principal efecto de las colisiones nucleares es el de aumentar el valor medio de la pérdida de energía, pero no afecta de manera apreciable el ancho de las distribuciones. Este resultado puede entenderse como debido al incremento del recorrido efectivo de los protones dentro del material (debido a las deflexiones que sufren las trayectorias, las cuales serían completamente rectas si no hubiese colisiones nucleares) y teniendo en cuenta el insignificante efecto que tienen las colisiones nucleares en la pérdida de energía. Por lo tanto es evidente que los efectos de las colisiones nucleares se harán más notorios en el caso de bajas energías y espesores gruesos.

En la figura 2.6 se muestra el efecto de incluir o no el straggling en los cálculos. Los resultados son para dos energías de los protones ( $E = 25$  keV y  $100$  keV), y para varios espesores ( $159$  Å,  $317$  Å y  $519$  Å) del blanco de carbono amorfo. Las colisiones nucleares que fueron incluidas en ambos casos producen una ligera asimetría de la distribución hacia mayores pérdidas de energía, pero esto sólo se aprecia si no se incluye el straggling electrónico en los cálculos. Nuevamente se puede observar que el efecto de las colisiones nucleares se hace más pequeño para espesores delgados y altas energías.

Para poder representar en la misma gráfica las distribuciones de pérdida de energía obtenidas para diferentes energías del haz y espesores de la lámina definiremos la siguiente magnitud:

$$R_1 = \frac{\Delta E}{S_p D} \quad (2.43)$$

donde  $\Delta E$  es la pérdida de energía que experimenta un protón al atravesar una lámina de espesor  $D$ , y  $S_p$  es el poder de frenado del material correspondiente a la velocidad de incidencia del haz de protones. Es decir,  $R_1$  representa la pérdida de energía que se obtiene haciendo un seguimiento detallado del movimiento del protón, dividida por el valor que predice el formalismo dieléctrico (en el cual se considera que la velocidad instantánea del proyectil es igual a la inicial, y que no hay colisiones nucleares).

En las figuras 2.7 a 2.9 hemos representado el resultado de nuestra simulación para la distribución de  $R_1$  que poseen los protones al atra-

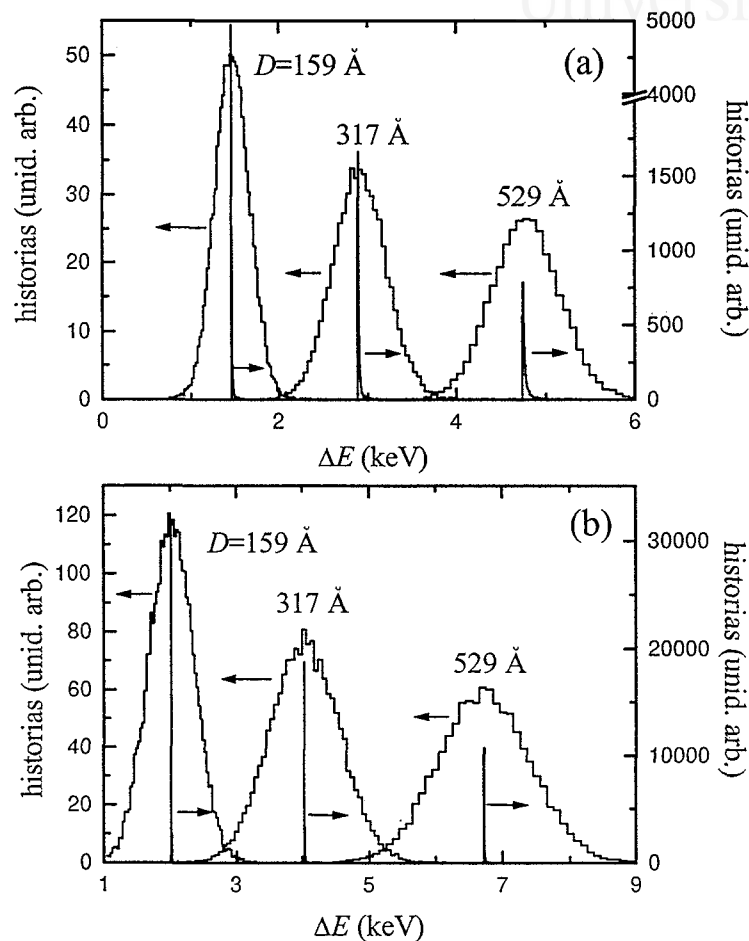


Figura 2.6: Distribuciones de pérdida de energía calculadas para un haz de protones de energía (a)  $E = 25$  keV y (b)  $E = 100$  keV, después de atravesar láminas de carbono amorfo de diversos espesores ( $D = 159$  Å,  $317$  Å y  $529$  Å). Las distribuciones anchas (eje de la izquierda) corresponden al cálculo con straggling, mientras que las angostas (eje de la derecha) se han calculado sin straggling. En ambos casos se han tenido en cuenta las colisiones nucleares.



## 2.5. Distribución de la energía perdida por un haz de protones 59

vesar láminas de aluminio. Se muestran los resultados obtenidos para velocidades  $v = 2$  a.u. y  $v = 4$  a.u. y tres espesores diferentes de la lámina (500 a.u., 1000 a.u. y 1500 a.u.)

Si comparamos las distribuciones de  $R_1$  para la misma velocidad y diferentes espesores observamos que el ancho de la distribución es menor a medida que aumenta el espesor. En la figura 2.8 hemos representado las distribuciones de pérdida de energía  $\Delta E$  del haz de protones en lugar de  $R_1$ , para  $v = 2$  a.u. y tres espesores de una lámina de aluminio (500 a.u., 1000 a.u. y 1500 a.u.). Puede observarse que las distribuciones se ensanchan al aumentar el espesor, de acuerdo con la definición del straggling (1.24), ya que a mayores espesores, las fluctuaciones en el poder de frenado darán lugar a una diferencia mayor entre la energía perdida por los diferentes protones del haz. La posición del pico también se mueve hacia pérdidas de energías mayores según aumenta el espesor, de acuerdo con la definición del poder de frenado.

A efecto de comparar los resultados para dos velocidades diferentes, hemos representado en la figura 2.9 las distribuciones de la energía que pierden dos haces de protones de  $v = 2$  a.u. y  $v = 4$  a.u., respectivamente, tras atravesar una lámina de aluminio de 500 a.u. de espesor. Se aprecia que para  $v = 4$  a.u. la pérdida de energía es menor que para  $v = 2$  a.u., debido a que es menor el poder de frenado a esta velocidad (vease la figura 1.11). También observamos que el ancho de la distribución es mayor para la velocidad más alta, de acuerdo con los resultados mostrados en la figura 1.16.

En las figuras 2.10 a 2.12 hemos representado las distribuciones de  $R_1$  que poseen los protones de dos haces de  $v = 2$  a.u. y  $v = 4$  a.u., tras atravesar láminas de silicio, carbono amorfo y cobre, respectivamente, para el caso de tres espesores diferentes (500 a.u., 1000 a.u. y 1500 a.u.). Las conclusiones obtenidas para el caso de aluminio son cualitativamente válidas también para estos tres materiales.

En la figura 2.13 aparece una comparación entre nuestros cálculos y una distribución experimental de pérdida de energía [Ormrod y Duckworth 1963]. De acuerdo con la técnica usada para preparar la lámina, hemos considerado que la densidad de la muestra era de  $1.7 \text{ g/cm}^3$ , lo cual da un espesor de  $128 \text{ \AA}$ . La posición del pico que se predice con nuestro método coincide con la experimental aunque el ancho de la distribución es un poco más pequeño que el experimental, lo cual es debido

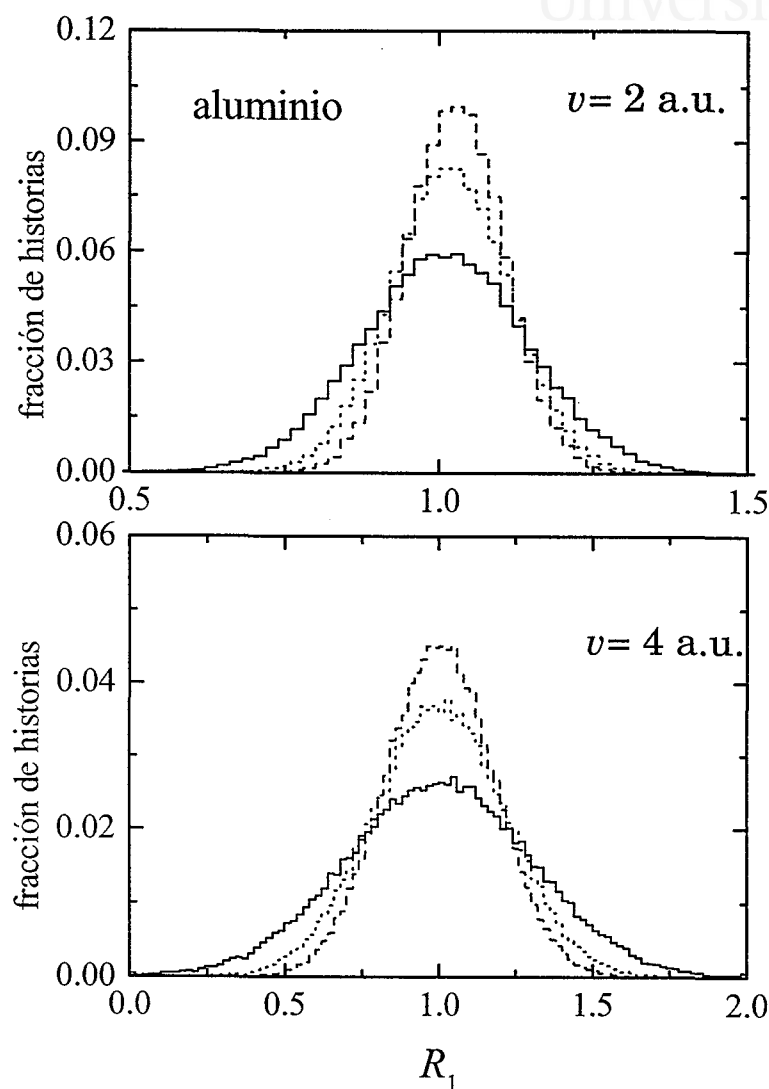


Figura 2.7: Distribución de  $R_1$  correspondiente a un haz de protones de  $v = 2$  a.u. y 4 a.u., respectivamente, que atraviesa una lámina de aluminio de espesor 500 a.u. (—), 1000 a.u. ( $\cdots$ ) o 1500 a.u. (— —).



## 2.5. Distribución de la energía perdida por un haz de protones 61

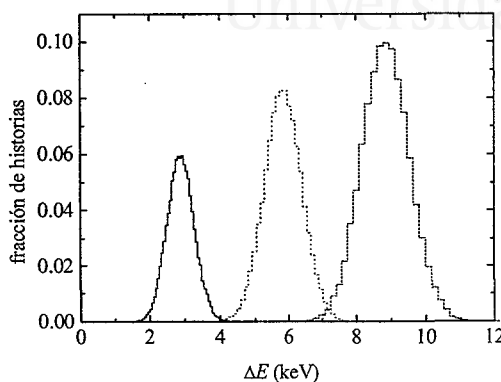


Figura 2.8: Distribución de la pérdida de energía  $\Delta E$  que presenta un haz de protones de  $v = 2$  a.u. tras atravesar una lámina de aluminio, en el caso de tres espesores diferentes: 500 a.u. (—), 1000 a.u. ( $\cdots$ ) y 1500 a.u. (— —).

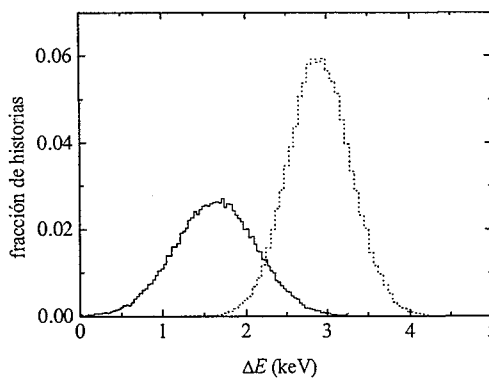


Figura 2.9: Distribución de la pérdida de energía  $\Delta E$  que presentan dos haces de protones de  $v = 2$  a.u. ( $\cdots$ ) y  $v = 4$  a.u. (—), tras atravesar una lámina de aluminio de 500 a.u. de espesor.

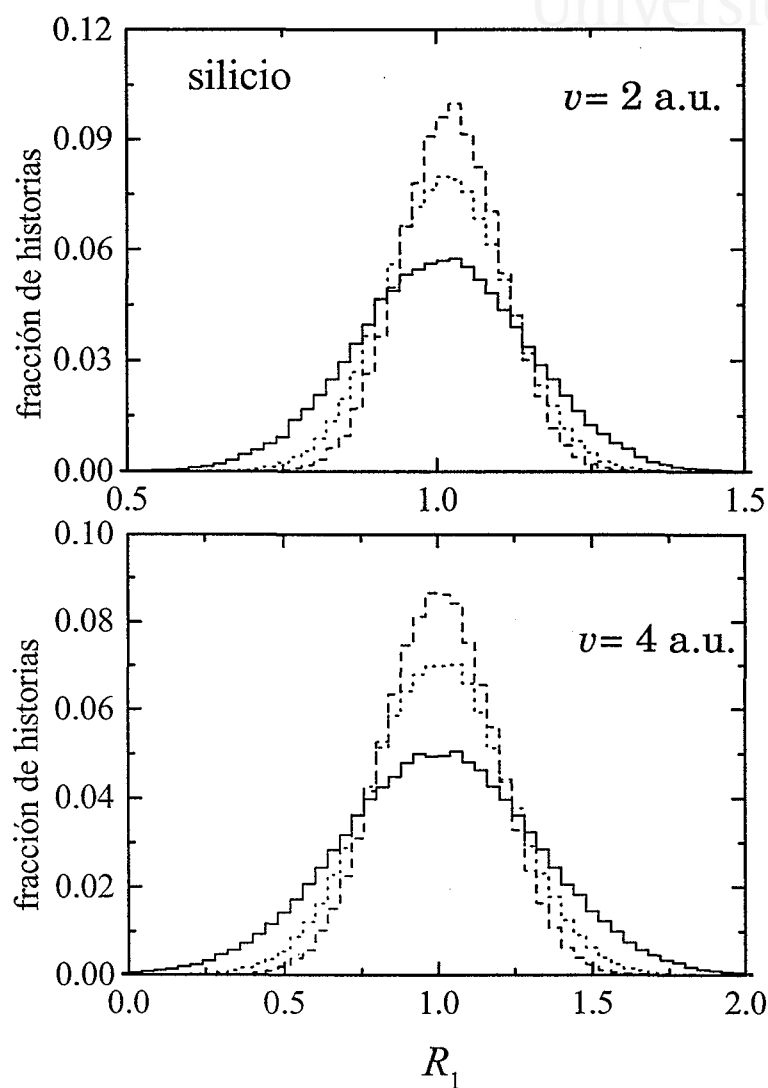
Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

Figura 2.10: Distribución de  $R_1$  correspondiente a un haz de protones de  $v = 2$  a.u. y 4 a.u., respectivamente, que atraviesa una lámina de silicio de espesor 500 a.u. (—), 1000 a.u. ( $\cdots$ ) o 1500 a.u. (— —).



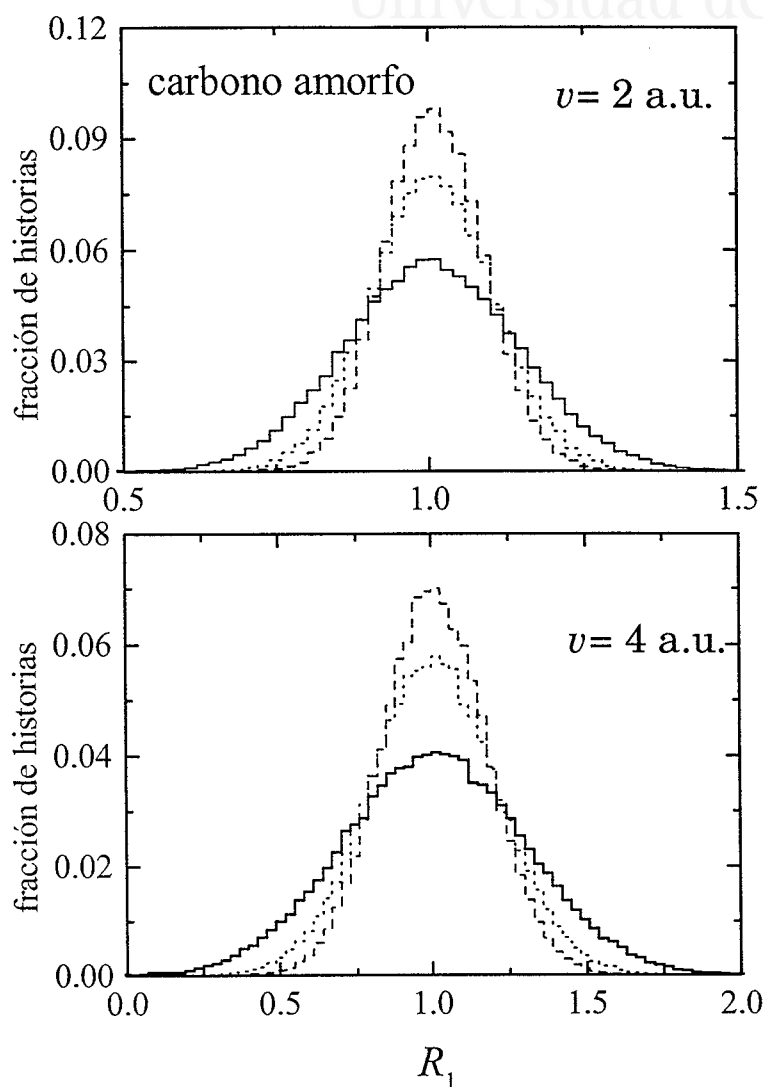


Figura 2.11: Distribución de  $R_1$  correspondiente a un haz de protones de  $v = 2$  a.u. y 4 a.u., respectivamente, que atraviesa una lámina de carbono amorfo de espesor 500 a.u. (—), 1000 a.u. (···) o 1500 a.u. (— —).

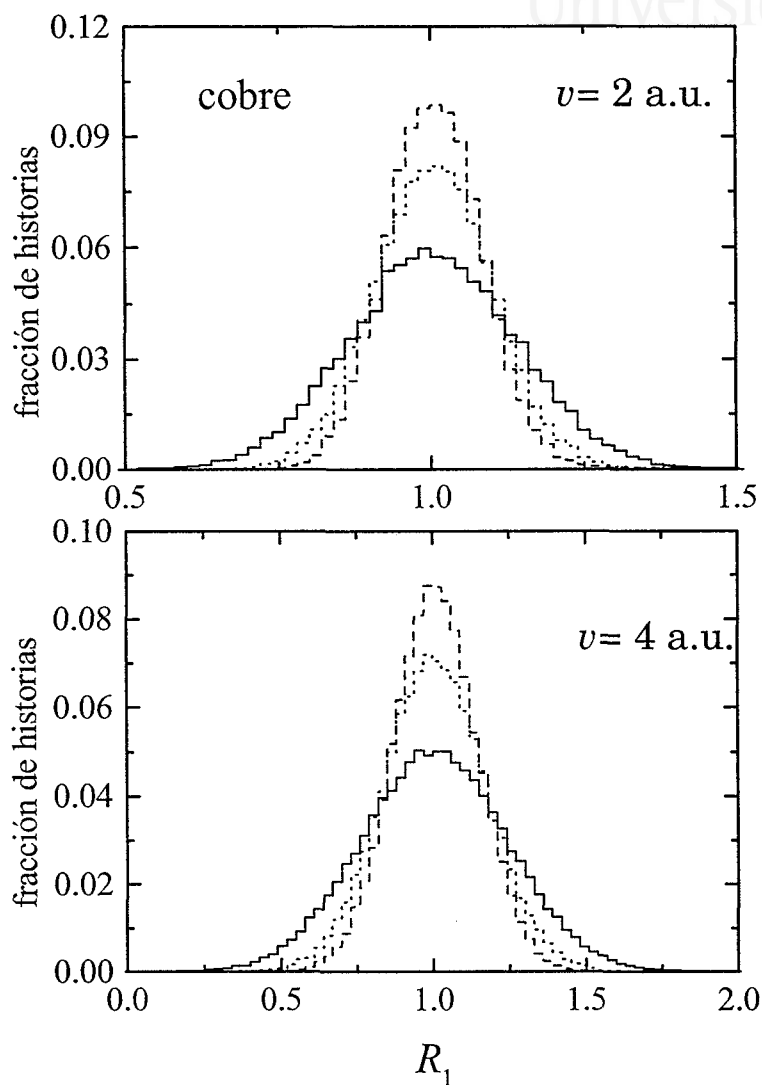
Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

Figura 2.12: Distribución de  $R_1$  correspondiente a un haz de protones de  $v = 2$  a.u. y 4 a.u., respectivamente, que atraviesa una lámina de cobre de espesor 500 a.u. (—), 1000 a.u. (···) o 1500 a.u. (— —).



## 2.5. Distribución de la energía perdida por un haz de protones 65

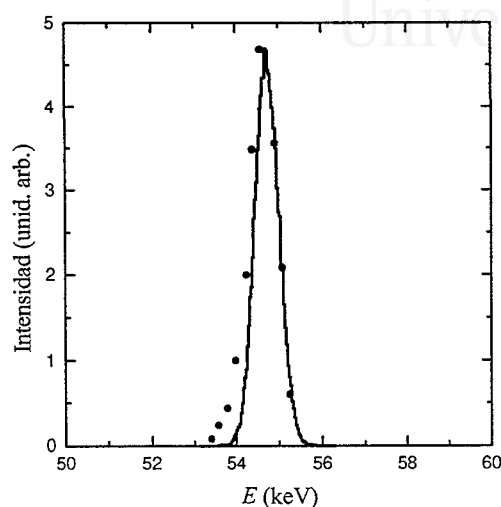


Figura 2.13: Distribución de energía que resulta cuando un haz de protones de 56.3 keV atraviesa una lámina de carbono amorfo de 128 Å de espesor. La línea continua representa nuestro cálculo y los puntos son datos experimentales [Ormrod y Duckworth 1963]. Hemos normalizado nuestros cálculos para que tengan la misma intensidad en el máximo que los datos experimentales.

a que nuestro cálculo dieléctrico subestima el straggling electrónico, según se aprecia en la figura 1.16. Esto demuestra que nuestro método de simulación funciona razonablemente bien

En la figura 2.14 mostramos nuestro cálculo de la energía con que salen los protones procedentes de un haz que atraviesa una lámina de aluminio de 361 a.u. de espesor, para el caso de diferentes energías iniciales, y los comparamos con los resultados experimentales obtenidos por Vidal Russell [1996].

Al igual que en la otra comparación, se observa que nuestro modelo predice razonablemente bien la posición del pico de la distribución energética de los protones a la salida de la lámina. Sin embargo, el ancho de la distribución presenta una pequeña discrepancia con los re-

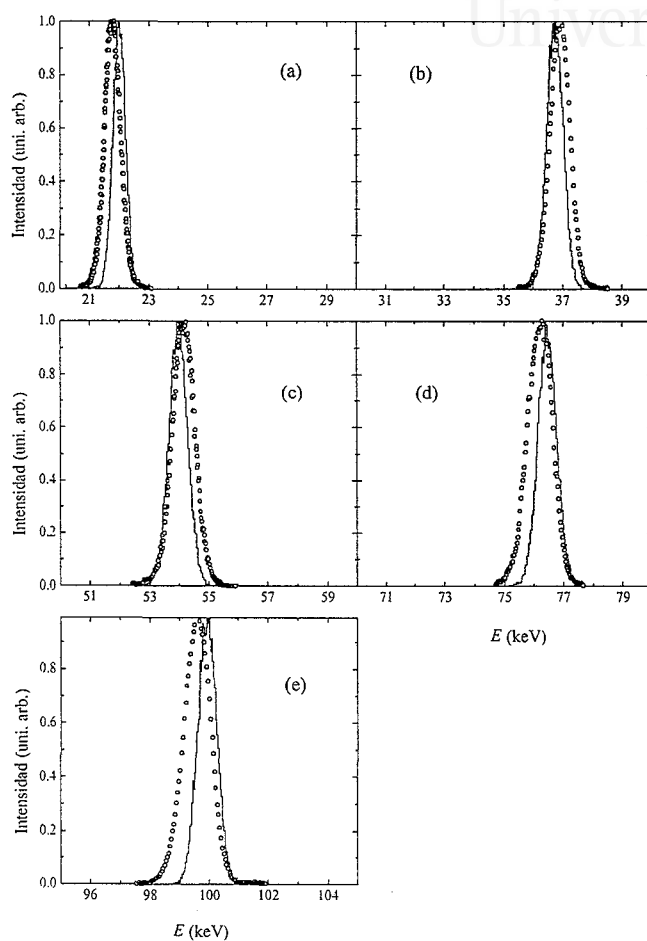


Figura 2.14: Distribución energética que poseen los protones procedentes de haces de diferente energía que atraviesan una lámina de aluminio de 361 a.u. de espesor. Hemos comparado nuestro cálculo (—) con los datos experimentales de Vidal Russell [1996] (○). (a)  $E = 24$  keV, (b)  $E = 39.7$  keV, (c)  $E = 60$  keV, (d)  $E = 79.2$  keV y (e)  $E = 103$  keV. Hemos representado nuestros cálculos de forma que el valor máximo tenga la misma altura que la máxima intensidad experimental.



## 2.5. Distribución de la energía perdida por un haz de protones 67

sultados experimentales, lo cual se puede entender debido a que nuestra predicción subestima el straggling en aluminio (como se aprecia en la figura 1.16).

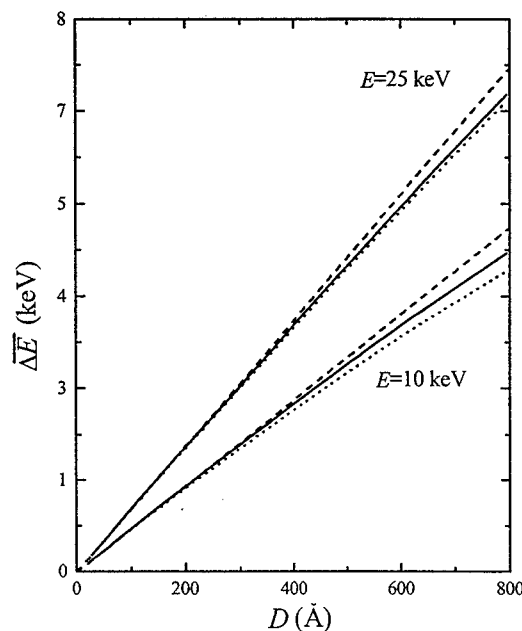


Figura 2.15: Valor medio de la pérdida de energía en función del espesor del blanco, para dos energías del haz de protones (10 keV y 25 keV). (—): se han incluido las colisiones nucleares en los cálculos; (· · ·): no se han incluido las colisiones nucleares en los cálculos; (- -): no se han incluido las colisiones nucleares en los cálculos y se ha tomado un poder de frenado que no varía con la velocidad instantánea del proyectil mientras viaja por el interior del material.

En la figura 2.15 se muestra el valor medio de la energía perdida por un haz de protones,  $\overline{\Delta E}$ , en función del espesor de la lámina para dos valores de la energía del haz de protones (10 y 25 keV) y un blanco de carbono amorfo. La línea continua corresponde al caso en que las colisiones nucleares fueron tenidas en cuenta en la simulación, mien-



tras que la línea punteada representa el caso contrario. Nótese que los resultados previos fueron obtenidos teniendo en cuenta que tanto el poder de frenado como el straggling varían con la velocidad instantánea del proyectil. Para comprobar la conveniencia de esto hemos incluido también el caso más simple que corresponde a la situación de poder de frenado constante (correspondiente a la energía inicial) sin colisiones nucleares, representado por la línea rayada; en este caso, al ser el poder de frenado constante se obtiene una línea recta. Para ambas energías podemos observar que los cálculos más completos (línea continua) claramente difieren del caso más simple (línea rayada). El caso intermedio (línea punteada) presenta muy poca variación respecto de los cálculos completos a altas energías, pero muestra diferencias apreciables a bajas energías y espesores gruesos.

La discusión anterior pone de manifiesto que hay diferencias entre la pérdida de energía de un haz de protones usando el cálculo directo del formalismo dieléctrico o empleando la simulación que hemos utilizado en este capítulo. Estas diferencias son más notables en el caso de bajas energías y espesores gruesos, como se aprecia en la figura 2.15. Por este motivo, en el capítulo siguiente, en vez del simple formalismo dieléctrico emplearemos el procedimiento de la simulación para estudiar el movimiento de los protones que resultan al fragmentarse una molécula de  $H_2^+$  mientras atraviesa una lámina delgada.

## 2.6 Distribución de ángulos de salida

Finalizaremos este capítulo estudiando la distribución de ángulos con que salen los protones tras atravesar una lámina de material. Definimos el ángulo de salida  $\theta$  como el ángulo que forma la velocidad de un protón a la salida de una lámina de espesor  $D$ , respecto de su velocidad original, tal como puede observarse en la figura 2.16. Como ya se ha mencionado anteriormente, el scattering elástico será el principal responsable de que los protones se desvíen de su dirección de incidencia.

Definiremos la densidad de partículas que se detecta en cada ángulo como el número de partículas que han salido entre un ángulo  $\theta$  y  $\theta + \Delta\theta$ , normalizado a la superficie del anillo detentado por ese intervalo infinitesimal de ángulos. Por lo tanto, si se conoce la distancia entre

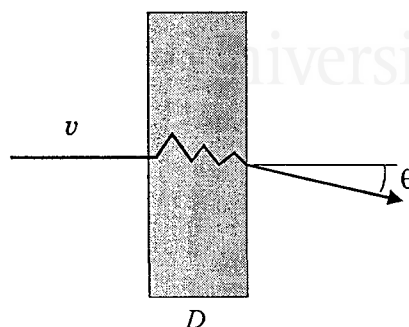


Figura 2.16: Ángulo  $\theta$  con que sale un protón tras atravesar una lámina de espesor  $D$ .

el detector y la lámina, a partir de consideraciones geométricas sería posible obtener el número total de partículas detectadas dentro del intervalo angular antes mencionado.

Puesto que el programa que hemos desarrollado nos permite conocer la posición y velocidad del protón en cada instante, es inmediato saber qué componentes tiene su velocidad a la salida de la lámina y, a partir de aquí, calcular el ángulo  $\theta$  de salida como  $\theta = \arctan(\sqrt{v_x^2 + v_y^2}/v_z)$ , siendo  $(v_x, v_y, v_z)$  las componentes de la velocidad del protón a la salida de la lámina. En la figura 2.17 hemos representado la densidad de partículas que se detectarían en cada ángulo, para dos velocidades diferentes del haz de protones ( $v = 2$  a.u. y  $4$  a.u.) y tres espesores distintos de una lámina de aluminio (500 a.u., 1000 a.u. y 1500 a.u.). Podemos observar que para cada velocidad del haz de protones, éstos son dispersados a ángulos mayores a medida que aumenta el espesor de la lámina. Esto puede entenderse claramente si pensamos que mientras más viaje un protón dentro de un material mayor será la probabilidad de que sufra una colisión elástica de ángulo grande y, por lo tanto, aumentará su desviación respecto de la dirección original de movimiento. Por otra parte, en el límite de espesores muy pequeños se obtiene que los protones del haz prácticamente no se han desviado y por lo tanto la distribución está concentrada alrededor de  $\theta = 0^\circ$  (la cual no hemos mostrado en la figura 2.17 debido a su estrechez y altura).

Tabla 2.1: Valores del número atómico  $Z_2$  y de la densidad atómica  $\mathcal{N}$  de aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre

Material	$Z_2$	$\mathcal{N}$ (a.u.)
aluminio	13	$8.92 \cdot 10^{-3}$
silicio	14	$7.4 \cdot 10^{-3}$
carbono amorfo	6	$1.45 \cdot 10^{-2}$
cobre	29	$1.25 \cdot 10^{-2}$

Si comparamos la densidad de protones desviados en cada ángulo, en el caso de haces de diferentes energías incidiendo sobre una lámina de un dado espesor, encontraremos que a mayor velocidad del haz es menos probable encontrar protones que se hayan desviado ángulos grandes. Esto puede entenderse dado que el ángulo de scattering  $\theta$  que se desvía una partícula en una colisión elástica es menor mientras mayor sea la energía de la partícula, como puede intuirse de la ecuación (2.24).

En las figuras 2.18 a 2.20 hemos representado la densidad de protones por unidad de ángulo de salida para el caso de láminas de silicio, carbono amorfo y cobre respectivamente. Los comentarios y conclusiones que hemos hecho para el caso de aluminio son aplicables para estos materiales también.

Al comparar la dispersión angular que ocurre en cada material, para un espesor de la lámina y energía del haz de protones fijados, cabe destacar que en láminas de carbono los protones se dispersan poco en comparación con los otros materiales. En aluminio y silicio la dispersión es similar y en láminas de cobre es donde los protones se dispersan a ángulos mayores. Si analizamos el método de Monte Carlo descrito en la sección 2.4.2 vemos que dentro de este modelo el blanco está especificado por su número atómico  $Z_2$  y por su densidad atómica  $\mathcal{N}$ ; por ello cabe esperar que haya mayor dispersión angular para los materiales con mayores valores de  $Z_2$  y  $\mathcal{N}$ . En la tabla 2.1 presentamos los valores de  $Z_2$  y  $\mathcal{N}$  para los cuatro materiales antes mencionados.

También hemos estudiado la distribución conjunta de ángulo de salida y pérdida de energía de los protones de un haz tras atravesar una lámina delgada. En la figura 2.21 hemos representado la densidad de partículas que han perdido una energía determinada (cuantificada por



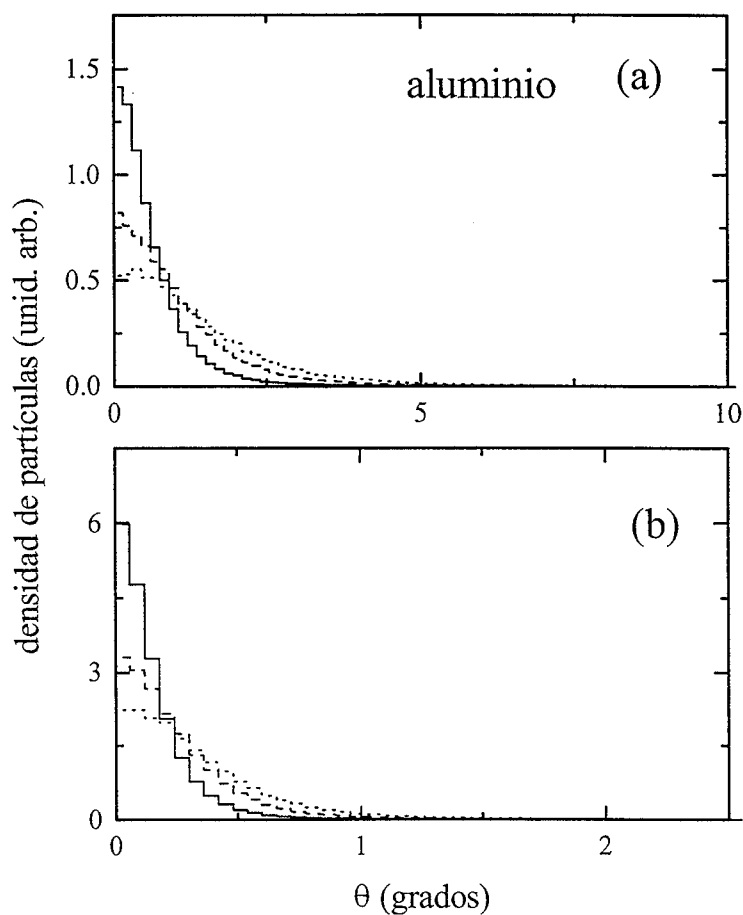


Figura 2.17: Densidad de protones por ángulo de salida, para un haz de protones de velocidad (a)  $v = 2$  a.u. o (b)  $v = 4$  a.u. que atraviesa una lámina de aluminio de espesor 500 a.u. (—), 1000 a.u. (— —) y 1500 a.u. (···).

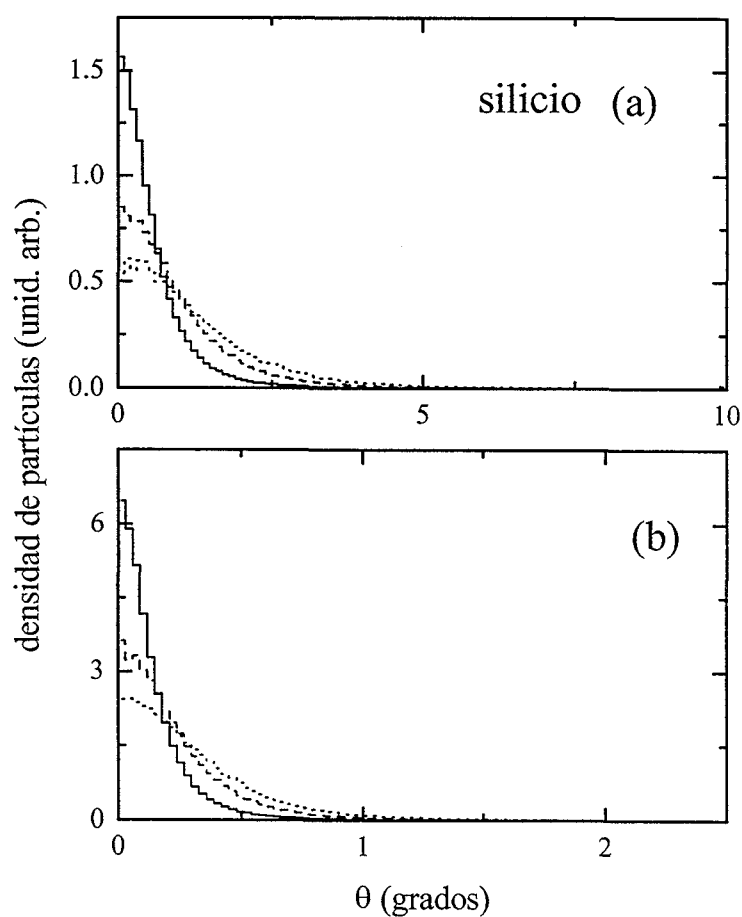
Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

Figura 2.18: Densidad de protones por ángulo de salida, para un haz de protones de velocidad (a)  $v = 2$  a.u. o (b)  $v = 4$  a.u. que atraviesa una lámina de silicio de espesor 500 a.u. (—), 1000 a.u. (— —) y 1500 a.u. (···).

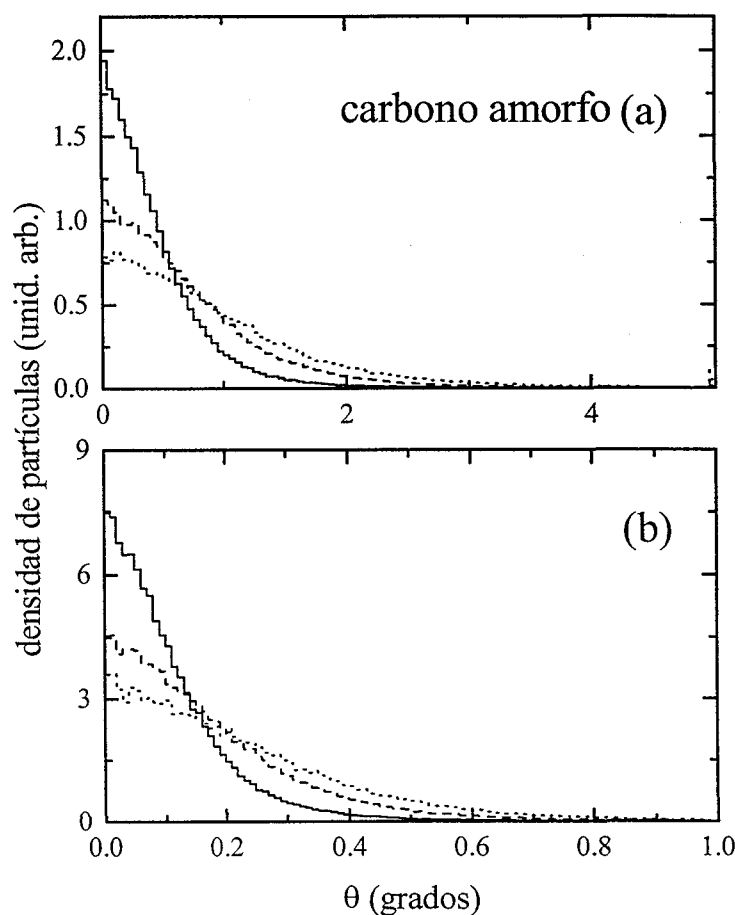


Figura 2.19: Densidad de protones por ángulo de salida, para un haz de protones de velocidad (a)  $v = 2$  a.u. o (b)  $v = 4$  a.u. que atraviesa una lámina de carbono amorfo de espesor 500 a.u. (—), 1000 a.u. (— —) y 1500 a.u. (···).

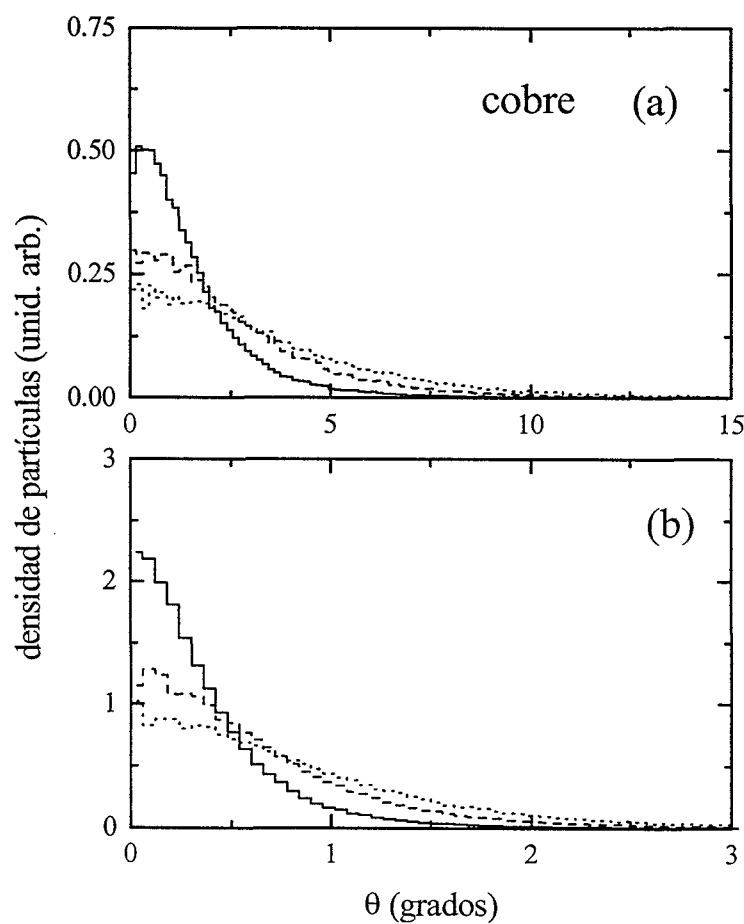


Figura 2.20: Densidad de protones por ángulo de salida, para un haz de protones de velocidad (a)  $v = 2$  a.u. o (b)  $v = 4$  a.u. que atraviesa una lámina de cobre de espesor 500 a.u. (—), 1000 a.u. (— —) y 1500 a.u. (···).

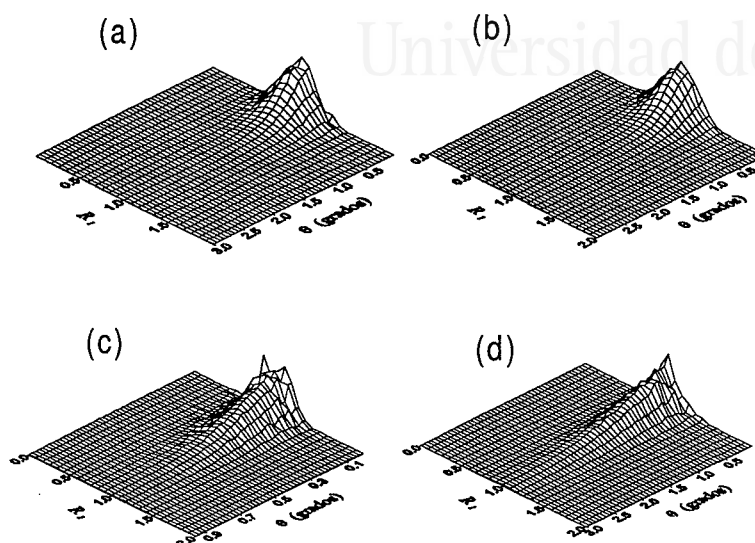


Figura 2.21: Densidad de protones que pierden una energía determinada (representada por  $R_1$ ) y que salen con ángulo  $\theta$  tras atravesar una lámina de espesor  $D = 1000$  a.u. La velocidad del haz de protones es  $v = 4$  a.u. y las láminas son de: (a) aluminio, (b) silicio, (c) carbono amorfo y (d) cobre.

$R_1$ ) y que han salido con ángulo  $\theta$ , para el caso de un haz de protones de velocidad  $v = 4$  a.u. tras atravesar una lámina de aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre, respectivamente, de espesor  $D = 1000$  a.u. A partir de estas distribuciones conjuntas es posible conocer la pérdida de energía en función del ángulo de salida, por lo tanto, los espectros representados en la figura 2.21 serían susceptibles de compararse con aquellos datos experimentales que discriminasen la pérdida de energía en función del ángulo de detección.



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

## Capítulo 3

# Interacción de moléculas $H_2^+$ con láminas delgadas

### 3.1 Introducción

Después de haber discutido el paso de protones a través de láminas delgadas, vamos a analizar el paso de moléculas de  $H_2^+$  a través de láminas de carbono amorfo y de aluminio. El interés del estudio de la interacción de moléculas de  $H_2^+$  con sólidos se debe a que es el proyectil molecular más simple (tanto a nivel de producción como de análisis), y el estudio de su pérdida de energía pondrá de manifiesto efectos moleculares que no están presentes en el caso de proyectiles mononucleares.

El estudio del frenado de  $H_2^+$  comenzó con el trabajo pionero de Brandt *et al.* [1974]. En las últimas decenas de años un gran número de artículos se han dedicado a su estudio, tanto teóricamente [Brandt y Ritchie 1976, Arista 1978, Basbas y Ritchie 1982, Steuer 1986, Arnau *et al.* 1989, Jakas y Capuj 1995ab, Denton *et al.* 1998b] como experimentalmente [Tape *et al.* 1976, Eckardt *et al.* 1978, Laubert 1979, Escovitz *et al.* 1979, Remillieux 1980, Levi-Setti *et al.* 1982]. En particular se ha analizado cómo las fuerzas mutuas que se ejercen entre los protones de la molécula afecta a fenómenos tales como: la pérdida de energía [Eckardt *et al.* 1978, Arista 1978 y Laubert 1979], el estado de carga [Zaikov *et al.* 1988], el porcentaje de iones transmitidos en forma molecular [Escovitz *et al.* 1979, Cue *et al.* 1980] y la emisión de

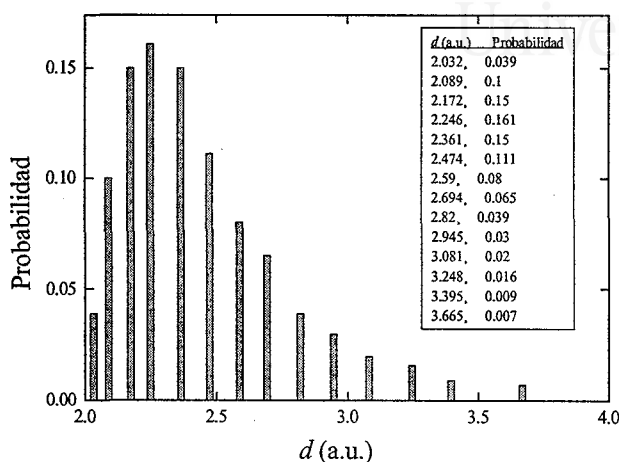


Figura 3.1: Probabilidad relativa de las diferentes distancias internucleares en la molécula de  $H_2^+$  [Brandt *et al.* 1974].

electrones secundarios [Rothard *et al.* 1990].

La molécula de  $H_2^+$  está compuesta por dos protones separados por una distancia internuclear  $d$ . Su estado de carga inicial (+1) se debe a que la molécula de hidrógeno debe ser acelerada y por lo tanto es necesario ionizarla, arrancándole un electrón. Cuando la molécula de  $H_2^+$  incide sobre un material, pierde el electrón en las primeras capas atómicas [Bohr 1948], por lo tanto la situación real es la de dos protones con una cierta configuración espacial. La distancia entre los dos protones depende de qué estado vibracional de la molécula estuviera ocupado; esta ocupación está relacionada con el proceso de producción y aceleración de la molécula de  $H_2^+$ . En la figura 3.1 hemos presentado la probabilidad relativa de las diferentes distancias internucleares de la molécula de  $H_2^+$  [Brandt *et al.* 1974], cada una de las cuales corresponde a un estado vibracional diferente.

El estudio del paso de moléculas de  $H_2^+$  a través de medios materiales es similar al estudio del paso de protones, sin embargo el hecho



de ser proyectiles de más de un componente añade al análisis nuevos elementos. Además de la fuerza autofrenante, que ya se discutió en el capítulo 1, el hecho de que cada protón perturbe el medio electrónico a medida que se mueve dentro del material, hace que el protón vecino experimente una fuerza extra; este fenómeno es conocido como efecto de interferencia o vecindad. Por otro lado existe el fenómeno de la repulsión coulombiana entre los dos protones de la molécula; este fenómeno se denomina explosión coulombiana.

Supondremos que la manera en la cual dos partículas perturban un punto del espacio dado será la suma de ambas perturbaciones individuales en dicho punto. Por lo tanto el potencial inducido en un punto será la suma de los potenciales inducidos en dicho punto por cada protón:

$$\phi_{\text{ind}}(\vec{r}, t) = \sum_i \phi_{\text{ind},i}(\vec{r}, t) . \quad (3.1)$$

Esto hará que la fuerza debida a la perturbación del medio, que siente cada uno de los protones, sea la suma de la propia fuerza autofrenante y de una fuerza de interferencia que está dada por la perturbación que genera un protón en la posición donde se encuentra el protón vecino.

Así pues, la fuerza total que experimentará un protón de la molécula de  $H_2^+$  será la suma de las fuerzas anteriores:

$$\vec{F} = \vec{F}_{\text{autofr}} + \vec{F}_{\text{interf}} + \vec{F}_{\text{coul}} \quad (3.2)$$

siendo  $\vec{F}_{\text{autofr}}$  la fuerza autofrenante que sufre cada protón,  $\vec{F}_{\text{interf}}$  la fuerza de interferencia y  $\vec{F}_{\text{coul}}$  la fuerza de repulsión coulombiana.

Conocida la fuerza total que actúa sobre cada protón de la molécula, es posible seguir la evolución dinámica de su trayectoria, usando el método descrito en la sección 2.2. Como la fuerza autofrenante viene dada por el poder de frenado,  $\vec{F}_{\text{autofr}} = -S_p$ , ya discutido con anterioridad, seguidamente analizaremos con más detalle las otras dos fuerzas.

## 3.2 Explosión coulombiana

Cuando la molécula de  $H_2^+$  penetra en un material sus dos protones empiezan a repelerse a través de una fuerza coulombiana. El efecto



de esta fuerza es incrementar la distancia internuclear a medida que la molécula avanza por el medio. El potencial de interacción a través del cual se repelen los protones es un potencial coulombiano apantallado por los electrones del medio. Dicho potencial puede modelarse por un apantallamiento del tipo Yukawa [Brandt 1975]:

$$V(r) = \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{a}\right), \quad (3.3)$$

donde  $a$  es la constante de apantallamiento. Esta constante de apantallamiento depende de la velocidad del proyectil, ya que si éste es muy rápido los electrones del medio no serán los suficientemente rápidos para apantallar al proyectil y el potencial será esencialmente coulombiano puro. Un valor bastante aceptado para esta constante de apantallamiento [Brandt 1975] es:

$$a = \begin{cases} v/\omega_{p1} & \text{si } v > v_F \\ v_F/\omega_{p1} & \text{si } v \leq v_F \end{cases} \quad (3.4)$$

Es bien sabido [Echenique *et al.* 1990] que cuando un protón viaja por la materia va capturando o perdiendo electrones a lo largo de su recorrido y como resultado de ello su carga efectiva es diferente de la unidad. Hay varios modelos para la carga efectiva [Yarlagadda *et al.* 1978], pero ninguno de éstos ha logrado describir este fenómeno de manera completamente satisfactoria; la mayoría de estos modelos predicen un valor cercano a la unidad cuando la velocidad del protón es  $v \gtrsim 1$  a.u. Por otra parte, la carga efectiva de cada uno de los protones que viajan correlacionados no está estudiada. Por todo ello, en esta memoria se usará que la carga efectiva de los protones es 1, pues nuestro interés se centra en velocidades que son del orden o superiores a 1 a.u.

En la figura 3.2 observamos cómo aumenta con el tiempo la separación internuclear,  $d$ , debido a la explosión coulombiana. Puede verse que a medida que aumenta la velocidad de los protones el potencial es menos apantallado y los protones se separan más entre sí.

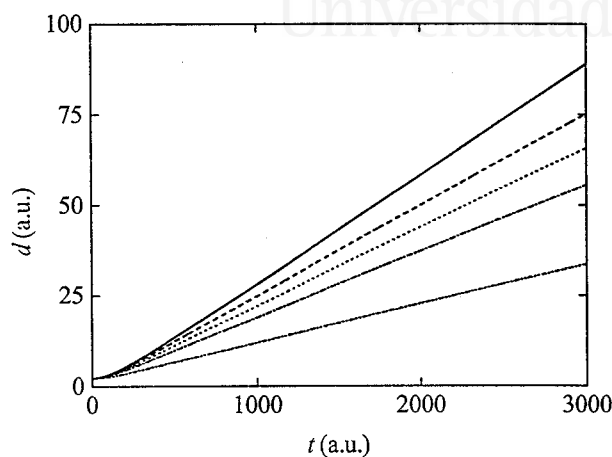


Figura 3.2: Evolución de la distancia internuclear en la molécula de  $H_2^+$  debido a la explosión coulombiana. Hemos representado los casos de explosión coulombiana pura (—),  $v = 5$  a.u. (— —),  $v = 3$  a.u. (····),  $v = 2$  a.u. (— · · —) y  $v = 1$  a.u. (— · · · —).

### 3.3 Efectos de interferencia

El otro efecto que aparece cuando se estudia el paso de agregados moleculares en materiales es debido a la vecindad entre iones de la misma molécula, lo cual da lugar a que el frenado de un grupo de iones sea diferente de la suma del frenado de los iones considerados individualmente. Este fenómeno es conocido como interferencia y para estudiarlo es preciso analizar el comportamiento del potencial inducido en el medio por cada protón, ecuación (1.17).

En las figuras 3.3 y 3.4 se observan los potenciales inducidos por un protón cuando viaja con velocidad  $v = 2$  a.u. y  $5$  a.u., respectivamente, en carbono amorfo. Hemos representado  $\phi_{\text{ind}}$  en función de las coordenadas cilíndricas  $\tilde{z}$  y  $\rho$  que introdujimos en el capítulo 1 (ver figura 1.2). Se observa que el potencial inducido,  $\phi_{\text{ind}}$ , presenta un comportamiento oscilatorio detrás de la posición del ion, con una longitud de onda que

vale aproximadamente  $\lambda \sim v/\omega_{pl}$ . La amplitud de este comportamiento oscilatorio está significativamente amortiguada debido a la inclusión en la función dieléctrica de Mermin del mecanismo de decaimiento de los plasmones. En la dirección transversal al movimiento del protón, el potencial inducido decae de una manera aproximadamente exponencial. El gradiente de  $\phi_{ind}$  en una dada posición nos da información sobre el campo eléctrico generado por un protón, a partir del cual se puede obtener la fuerza que experimentaría una carga situada en dicha posición. Dado el comportamiento oscilatorio del potencial inducido, está claro que el campo puede ser positivo o negativo, dependiendo del lugar donde se evalúe dicho campo. Por ello, otra partícula vecina experimentará un efecto de interferencia que será una fuerza frenante o acelerante, según sea la posición relativa entre ésta y la partícula que genera el campo.

Este efecto puede observarse más directamente en las figuras 3.5 y 3.6 donde se representan las componentes  $\mathcal{E}_z$  y  $\mathcal{E}_\rho$  del campo eléctrico creado en una posición  $\tilde{z}$  y  $\rho$  por un protón (ver figura 1.2). Hemos representado los campos para dos valores de la velocidad del protón ( $v = 2$  a.u. y  $5$  a.u.). Si tenemos dos protones que viajan con la misma dirección prácticamente a lo largo de todo su recorrido, como la componente  $\mathcal{E}_z$  del campo eléctrico es paralela a la velocidad del protón que lo crea, se puede observar claramente que si un protón se encuentra detrás de otro ( $\tilde{z} < 0$ ) la fuerza que sentirá puede ser acelerante o frenante dependiendo de la distancia a la que se encuentre del protón que genera la perturbación. Sin embargo, si un protón se encuentra delante de otro ( $\tilde{z} > 0$ ) la fuerza que experimentará será siempre frenante. En cambio, al ser el campo  $\mathcal{E}_\rho$  perpendicular al movimiento, sólo puede afectar al protón vecino cambiando su dirección. En el caso de una molécula de  $H_2^+$ , el efecto de la fuerza debida a este campo  $\mathcal{E}_\rho$  puede ser una tendencia al alineamiento entre los dos protones (si  $\mathcal{E}_\rho < 0$ ) o lo contrario si ( $\mathcal{E}_\rho > 0$ ). Como puede observarse de las figuras 3.5 y 3.6 la tendencia al alineamiento es el efecto que va a predominar.

Los comentarios anteriores, realizados para el caso en que la molécula viaja a través de carbono amorfo, son cualitativamente los mismos para los casos en que los materiales son aluminio, silicio o cobre.

En definitiva, vemos que hay una fuerza neta  $F_{interf}$  sobre cada protón de la molécula de  $H_2^+$ , debida al movimiento del protón vecino.

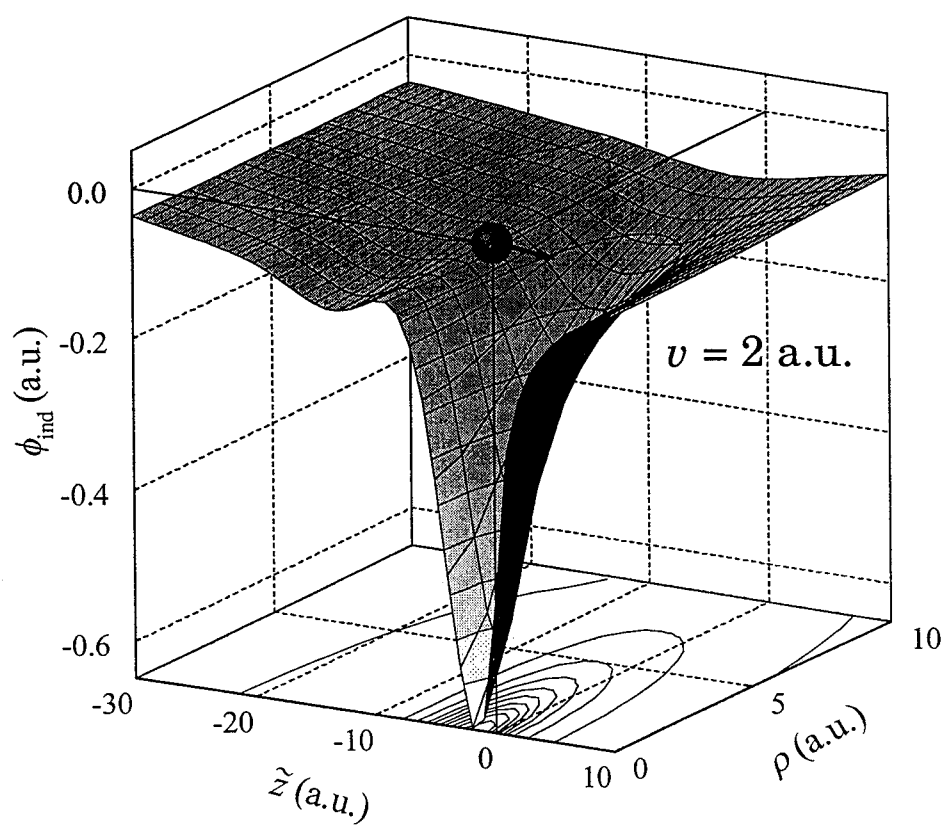
Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

Figura 3.3: Potencial inducido por un protón de velocidad  $v = 2$  a.u. en carbono amorfo.

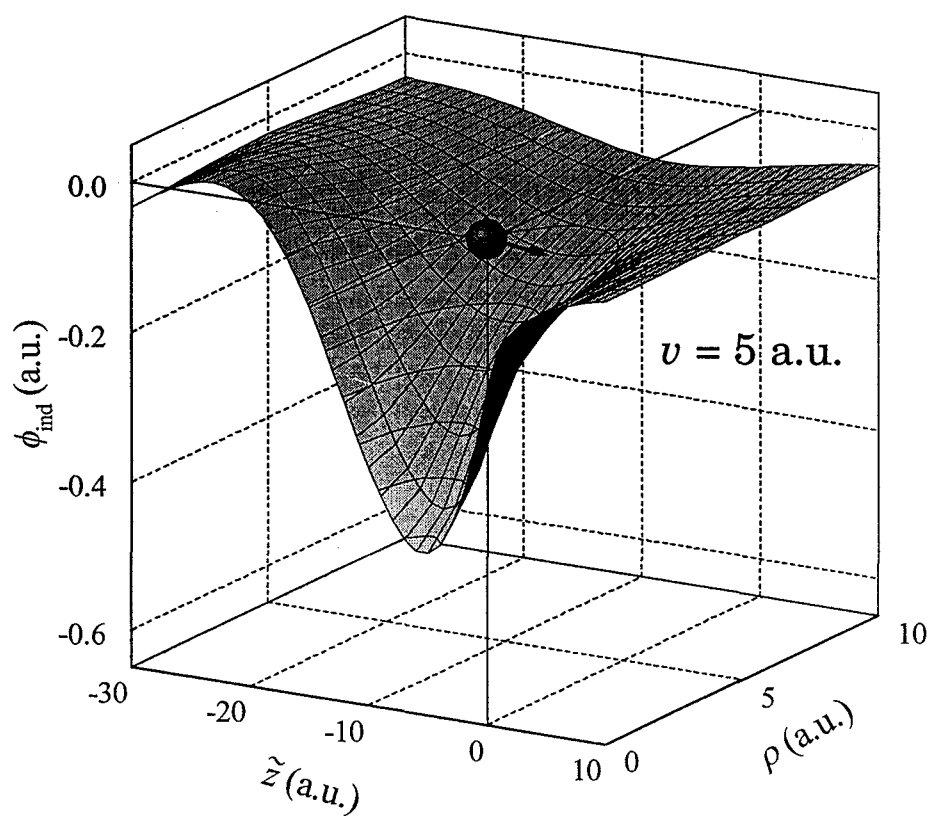


Figura 3.4: Potencial inducido por un protón de velocidad  $v = 5$  a.u. en carbono amorfo.

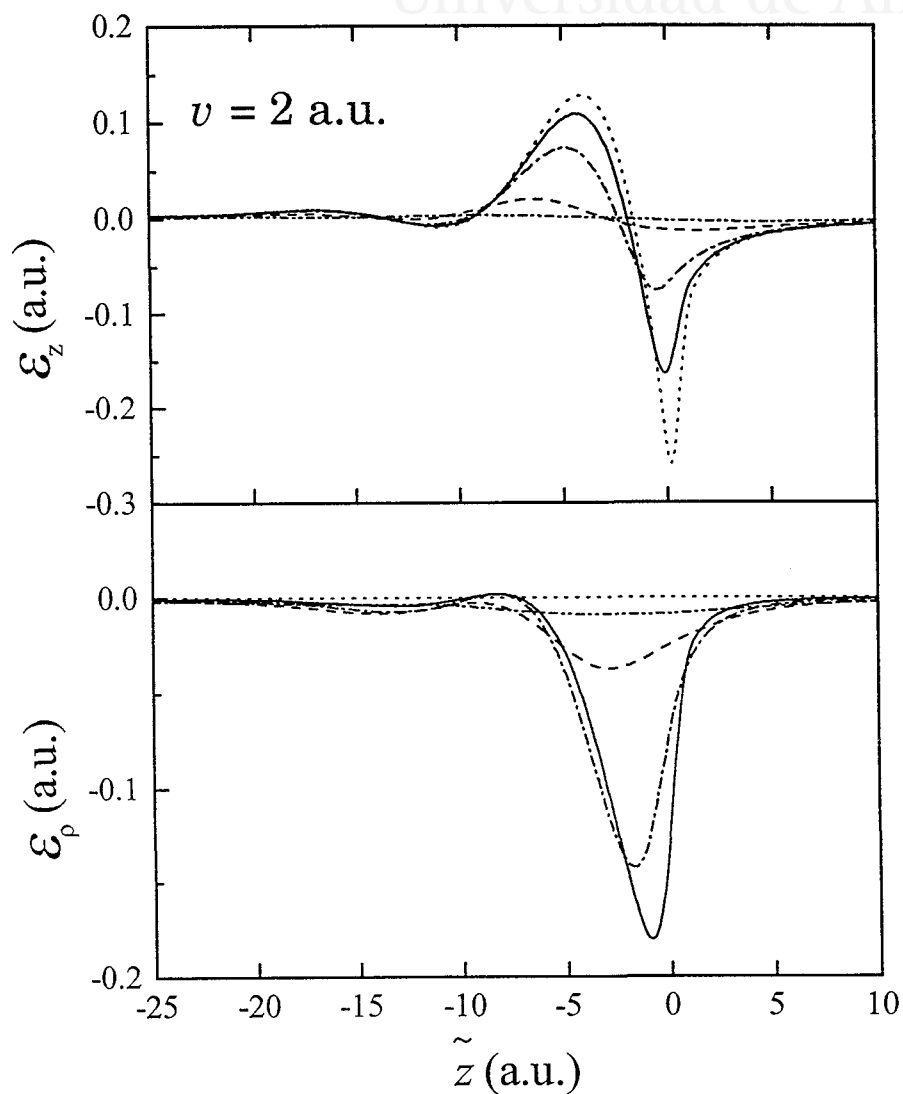


Figura 3.5: Campo eléctrico en función de  $\tilde{z}$  que induce un protón de velocidad  $v = 2$  a.u. que viaja a través de carbono amorfo. La distancia  $\rho$  al protón es: 0 a.u. ( $\cdots$ ), 1 a.u. ( $—$ ), 2 a.u. ( $- \cdot -$ ), 5 a.u. ( $- -$ ) y 10 a.u. ( $- \cdots -$ ).

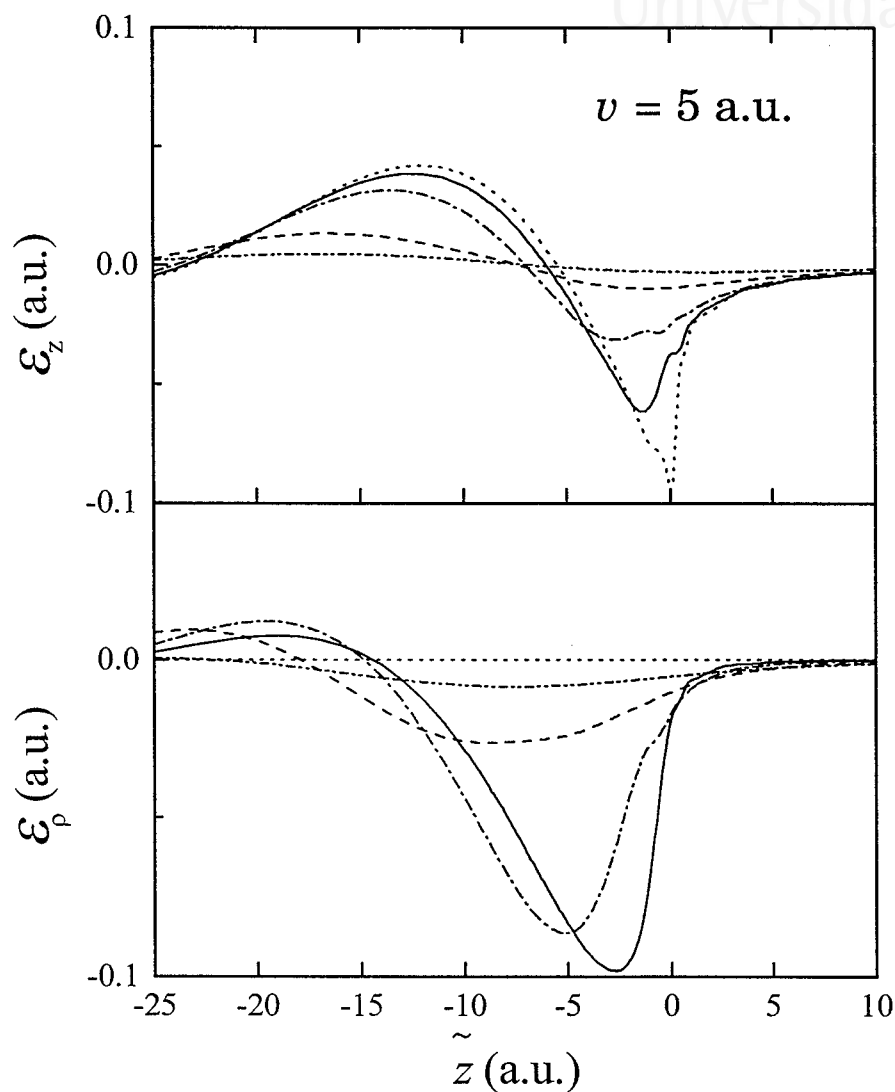


Figura 3.6: Campo eléctrico en función de  $\tilde{z}$  que induce un protón de velocidad  $v = 5$  a.u. que viaja a través de carbono amorfo. La distancia  $\rho$  al protón es: 0 a.u. ( $\cdots$ ), 1 a.u. ( $-$ ), 2 a.u. ( $- \cdot -$ ), 5 a.u. ( $- -$ ) y 10 a.u. ( $- \cdots -$ ).



Esta fuerza va a hacer que el frenado que sufre un protón de la molécula difiera del que experimentaría si se moviera solo. Para cuantificar esta diferencia se define el poder de frenado normalizado  $\mathcal{R}_2$  como:

$$\mathcal{R}_2 = \frac{S_{H_2^+}}{2 S_p} \quad (3.5)$$

donde  $S_{H_2^+}$  es el poder de frenado de la molécula de  $H_2^+$  y  $S_p$  es el poder de frenado de un protón individual.

Es de destacar que la explosión coulombiana también contribuirá a que varíe la energía de cada uno de los protones de la molécula, acelerando al que se encuentra delante y frenando al que se encuentra detrás, en relación a la dirección del movimiento. Sin embargo es de esperar que esta contribución sea simétrica, de modo que la energía que gane el protón delantero sea igual a la que pierda el protón trasero, de manera que a causa de este proceso la molécula no cambia su energía. Por lo tanto, la explosión coulombiana no afecta a  $\mathcal{R}_2$  tal como se ha definido en la ecuación (3.5).

Nosotros estamos interesados en estudiar el comportamiento de la pareja de protones en los cuales se fragmenta la molécula de  $H_2^+$ , cuando se detectan tras atravesar una lámina de espesor  $D$ , por lo tanto redefiniremos el poder de frenado normalizado de uno cualquiera de los protones que resultan de la fragmentación de la molécula como:

$$R_2 = \frac{\Delta E}{S_p D} \quad (3.6)$$

donde  $\Delta E$  es la pérdida de energía que sufre dicho fragmento tras atravesar la lámina. El denominador  $S_p D$  representa la energía que perdería un protón individual (es decir, no correlacionado) al atravesar el mismo espesor. La definición anterior es similar a la que hicimos de  $R_1$  en el capítulo 2 para el caso de un sólo protón.

Según la definición de la ecuación (3.6), la distribución de valores de  $R_2$  que resultan tras el paso de muchas moléculas de  $H_2^+$  por una lámina sí resultaría afectada por la explosión coulombiana, pero el valor medio de la distribución de  $R_2$  debe de coincidir con la ecuación (3.5).

En el código de simulación que combina dinámica molecular y método de Monte Carlo, que fue usado para analizar el frenado de protones, hemos agregado la posibilidad de estudiar la evolución de cada



uno de los protones que forman la molécula de  $H_2^+$ . También hemos tenido en cuenta la presencia de las fuerzas coulombianas de repulsión y de las fuerzas de interferencia recientemente descritas. En este capítulo estudiaremos el ángulo y la energía de salida de los protones en que se fragmenta la molécula de  $H_2^+$  al penetrar en una lámina, de manera análoga a como se hizo en el capítulo anterior. Además, hemos ampliado el programa para que pueda calcular la distribución de las distancias internucleares a la salida de la lámina. Concluiremos este capítulo aplicando el programa desarrollado al estudio del frenado de moléculas cuyos fragmentos se detectan alineados con la dirección del movimiento, en comparación con el frenado de fragmentos que salen en direcciones aleatorias.

### 3.4 Modelo de simulación para moléculas $H_2^+$

Cuando una molécula de  $H_2^+$  penetra en una lámina delgada hay dos parámetros que definen la geometría de la molécula, dependiendo de ellos la evolución de los protones de la molécula dentro del material. Por un lado, según sea el método con que se produjo y aceleró el ion molecular  $H_2^+$ , puede variar la distancia internuclear  $d$ . Por otro lado, también puede variar el ángulo  $\theta$  que forma la distancia internuclear con la velocidad de la molécula; éste puede variar entre  $\theta = 0^\circ$  (vector internuclear paralelo a  $\vec{v}$ ) y  $\theta = 90^\circ$  (vector internuclear perpendicular a  $\vec{v}$ ).

Inicialmente ( $t = 0$ ) los dos protones tienen las siguientes coordenadas y velocidades (ver figura 3.7):

$$\begin{aligned} (x, y, z)_1 &= (0, 0, 0) & (v_x, v_y, v_z)_1 &= (0, 0, v) \\ (x, y, z)_2 &= (0, d \sin \theta, d \cos \theta) & (v_x, v_y, v_z)_2 &= (0, 0, v) \end{aligned} \quad (3.7)$$

En la expresión anterior hemos supuesto que las velocidades de los protones son idénticas, despreciando la contribución a la velocidad global de cada protón debida al movimiento vibracional de la molécula.

Las figuras 3.8a y 3.8c ilustran el caso en que la molécula incide sobre el material con igual orientación angular y diferente distancia

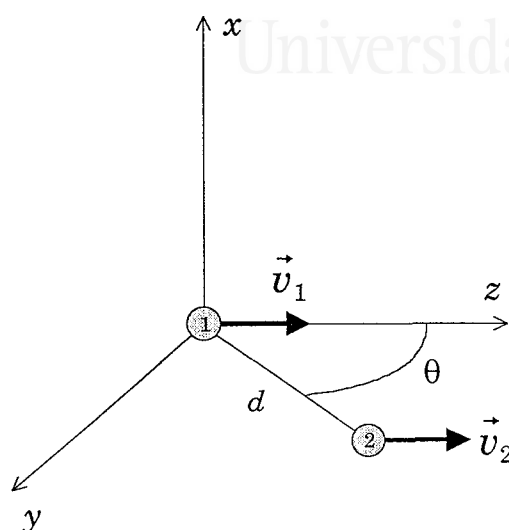


Figura 3.7: Configuración geométrica inicial de la molécula de  $H_2^+$ .

internuclear, mientras que las figuras 3.8a y 3.8b muestran el caso en que la molécula incide sobre el material con la misma distancia internuclear pero diferente orientación angular.

Para tener en cuenta las diferentes orientaciones y distancias internucleares con que llegan las moléculas de  $H_2^+$  a la superficie del material, hemos sorteado los valores de  $d$  y  $\theta$ . Para ello hemos considerado las diferentes probabilidades de las distancias iniciales dadas en el recuadro de la figura 3.1 (para lo cual se ha empleado la técnica de sorteo por rechazo [Press *et al.* 1986]) y que el ángulo  $\theta$  está distribuido uniformemente entre  $0^\circ$  y  $90^\circ$ . En la figura 3.9 se observa un histograma del sorteo de distancias y ángulos iniciales correspondientes a la simulación de 50000 historias. Como vemos, el sorteo de distancias iniciales reproduce las probabilidades de la figura 3.1 y la distribución de ángulos es uniforme.

Para estudiar qué trayectoria sigue cada uno de los protones de la molécula de  $H_2^+$  dentro del material hemos implementado el programa

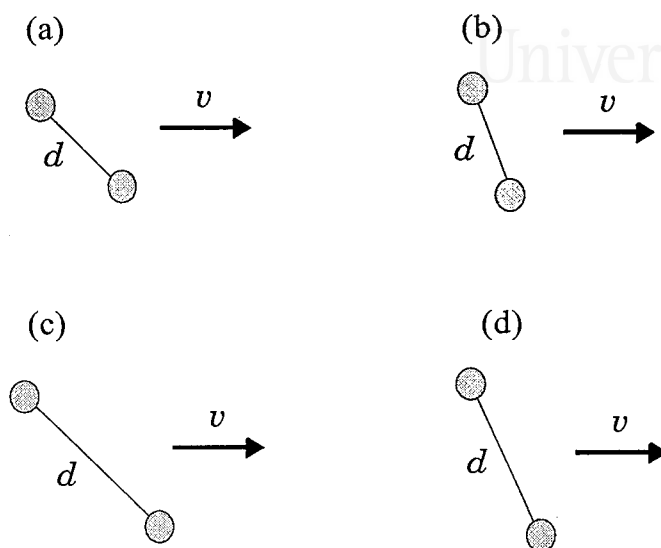


Figura 3.8: Esquema de las diferentes configuraciones iniciales que puede poseer la molécula de  $H_2^+$  en el momento de penetrar en un dado material. Los casos (a) y (b) representan igual distancia internuclear pero diferente ángulo de incidencia análogamente para (c) y (d), mientras que los casos (a) y (c) representan el mismo ángulo de incidencia pero diferente distancia internuclear análogamente para (b) y (d).

que anteriormente habíamos usado para protones individuales, de manera que pueda seguir el movimiento de cada una de las dos partículas. En el caso de  $H_2^+$ , además de la fuerza autofrenante, tenemos que incluir en nuestro programa la fuerza coulombiana y la fuerza de interferencia. En la figura 3.10 hemos representado la dirección de estas tres fuerzas para un caso particular de movimiento de cada uno de los protones de la molécula, etiquetados como 1 y 2. En la figura 3.10a podemos observar la fuerza de autofrenado  $\vec{F}_{\text{autofr}}$ , cuya dirección es siempre opuesta a la velocidad del protón que la experimenta.

En la figura 3.10b podemos observar las fuerzas de interferencia  $\vec{F}_{\text{interf}}$ , separadas en sus componentes  $z$  y  $\rho$ . La componente  $\vec{F}_{\text{interf}-z}$  que actúa sobre el protón 1 tiene la misma dirección que la velocidad del

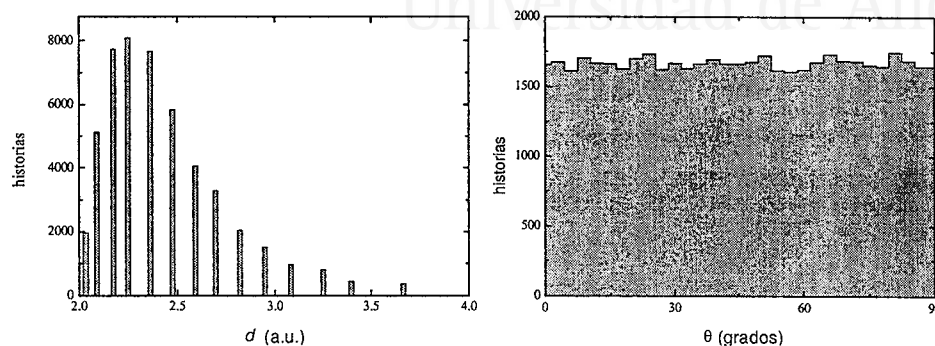


Figura 3.9: Histogramas de distancias internucleares y ángulos iniciales obtenidos tras simular 50000 historias.

protón 2, pero el sentido de esta fuerza dependerá de la posición relativa  $(\tilde{z}_{12}, \rho_{12})$  en la cual se encuentra el protón 1 respecto del protón 2. La componente  $\vec{F}_{\text{interf}-\rho}$  será perpendicular a la componente anterior y su sentido será dependiente de la posición  $(\tilde{z}_{12}, \rho_{12})$  que posee el protón 1 respecto del 2. El análisis recién hecho es también válido para describir la fuerza de interferencia que siente el protón 2, intercambiando el índice 1 por el 2.

En la figura 3.10c se ha esquematizado la fuerza  $\vec{F}_{\text{coul}}$  debida a la repulsión coulombiana. Esta fuerza tiene la dirección del vector internuclear y su sentido es tal que tiende a aumentar la separación entre los protones.

En cada paso de tiempo del código de dinámica molecular hemos calculado las fuerzas de autofrenado, interferencia y coulombiana que actúan sobre cada uno de los protones, de manera que podemos predecir las nuevas posiciones y velocidades que tendrán en un instante posterior. De esta manera es posible seguir la evolución de cada uno de los protones hasta que salgan de la lámina. A la fuerza de autofrenado le hemos incluido el efecto de las fluctuaciones electrónicas (straggling) siguiendo el mismo procedimiento que hemos empleado en el caso de

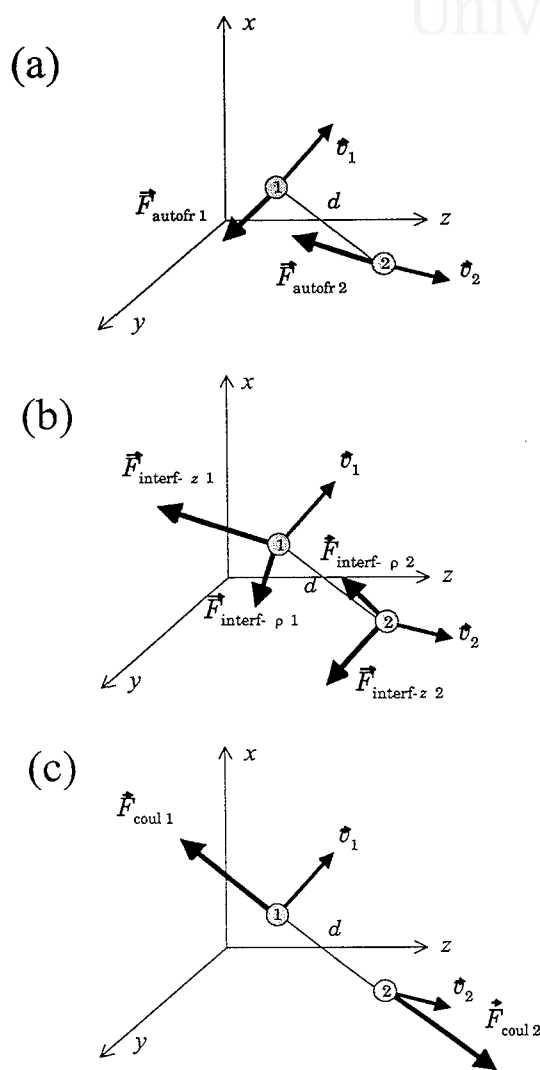


Figura 3.10: Esquema de las fuerzas que actúan sobre un par de protones que se mueven en un material. En la parte (a) se muestran las fuerzas autofrenantes, en la parte (b) se muestran las fuerzas de interferencia y en la parte (c) las fuerzas coulombianas.



protones individuales discutido en la sección 2.3.

Igualmente hemos implementado el código de Monte Carlo descrito en la sección 2.4.2 para tener en cuenta los efectos del scattering nuclear. Sin embargo este efecto se ha tenido en cuenta de manera no correlacionada, esto es, que el scattering nuclear que sufre cada uno de los protones es independiente del movimiento del otro.

En la mayoría de los casos discutidos en este capítulo se han sorteado del orden de 75000 historias.

### 3.5 Pérdida de energía

Seguidamente estudiaremos la pérdida de energía que sufren los fragmentos de la molécula de  $H_2^+$  después de atravesar láminas de carbono amorfo o aluminio. En la figura 3.11 hemos dibujado los histogramas de la pérdida de energía (representada por  $R_2$ ) que sufren los fragmentos al atravesar una lámina de carbono amorfo, para el caso de cinco espesores diferentes ( $D = 250, 500, 750, 1000$  y  $1500$  a.u.) y varios valores de la velocidad de la molécula ( $v = 1$  a.u.,  $2$  a.u. y  $4$  a.u.). Como puede observarse, las distribuciones de  $R_2$  tienden a hacerse más angostas a medida que aumenta el espesor de la lámina, para una dada velocidad de la molécula de  $H_2^+$ . Dado que el valor de  $R_2$  nos da una idea de la diferencia entre el frenado de un protón de la molécula y el de un protón individual, el hecho de que las distribuciones se hagan más picadas alrededor de  $R_2 \simeq 1$  nos está diciendo que los protones se comportan como protones individuales a medida que aumenta el espesor. Esto hecho puede entenderse porque al viajar más tiempo dentro del material los protones se separan entre sí (debido a colisiones nucleares o explosión coulombiana), de modo que gran parte de su camino lo hacen como protones casi independientes y, por tanto, no correlacionados.

También se observa que al aumentar la velocidad de la molécula, para un dado espesor de la lámina, las distribuciones se hacen más anchas y, en el caso de velocidades altas, aparecen dos picos en lugar de uno sólo. Este hecho puede entenderse en función de la explosión coulombiana. Como se puede deducir a partir de las ecuaciones (3.3) y (3.4), a medida que aumenta la velocidad del proyectil mayor será la fuerza de repulsión coulombiana entre los protones, siendo una fuerza

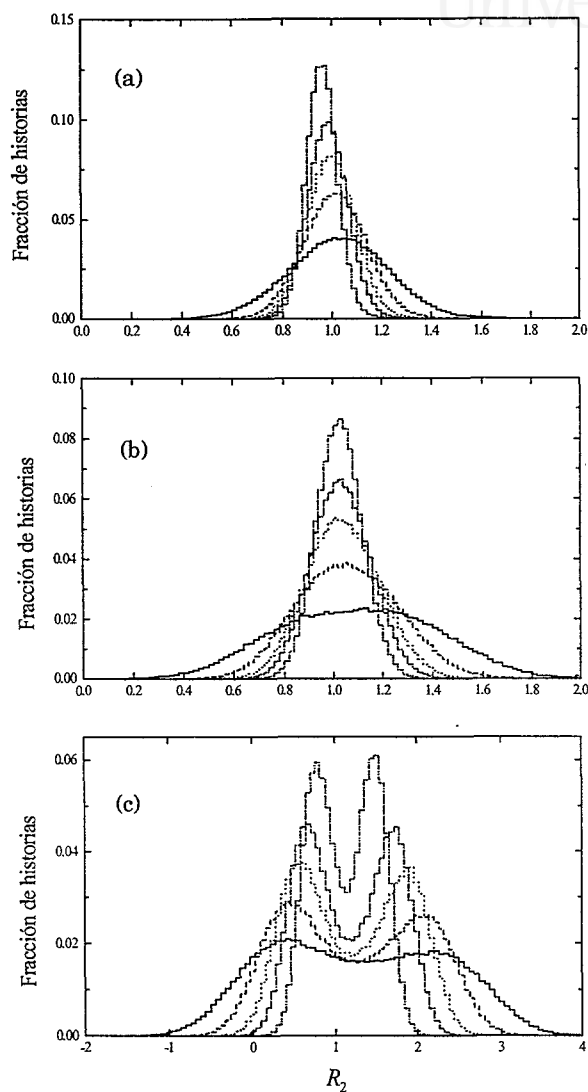


Figura 3.11: Distribuciones de  $R_2$  que poseen los fragmentos de un haz de  $H_2^+$  tras atravesar una lámina de carbono amorfo de espesor 250 a.u. (—), 500 a.u. (---), 750 a.u. (···), 1000 a.u. (- · -) y 1500 a.u. (- · · -). Las velocidades del haz son: (a)  $v = 1$  a.u., (b) 2 a.u. y (c) 4 a.u.

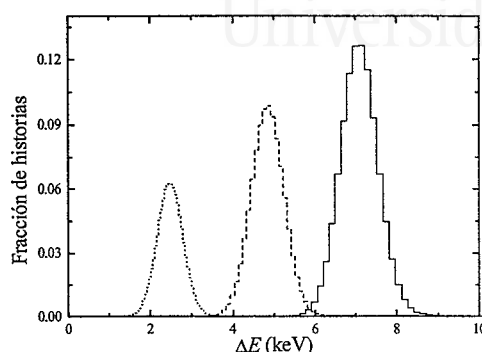


Figura 3.12: Distribuciones de pérdida de energía que poseen los fragmentos de un haz de  $H_2^+$  de velocidad  $v = 1$  a.u. después de atravesar una lámina de carbono amorfo de espesor 500 a.u. ( $\cdots$ ), 1000 a.u. ( $- -$ ) y 1500 a.u. ( $-$ ).

coulombiana pura en el límite de velocidades grandes. Debido a esta circunstancia, el protón de la molécula que se encuentra delante resultará acelerado por esta fuerza mientras que el protón de atrás resultará frenado. Es por esta razón que aparecen dos picos en la distribución de pérdida de energía; el pico que aparece a mayores valores de  $R_2$  (mayor pérdida de energía) corresponde a los protones que resultaron decelerados por la explosión coulombiana, mientras que el pico que aparece a menores valores de  $R_2$  (menor pérdida de energía) corresponde a los protones que resultaron acelerados por este proceso. Por lo anteriormente mencionado, la explosión coulombiana es también la responsable de que las distribuciones sean más anchas a medida que aumenta la velocidad.

Si representamos la distribución de pérdidas de energía tal como hemos hecho en la figura 3.12, veremos que las distribuciones tienden a ensancharse a medida que aumenta el espesor, tal como puede deducirse de la definición de straggling. Además, la posición del pico se mueve hacia mayores pérdidas de energía, de acuerdo con la definición de poder de frenado.



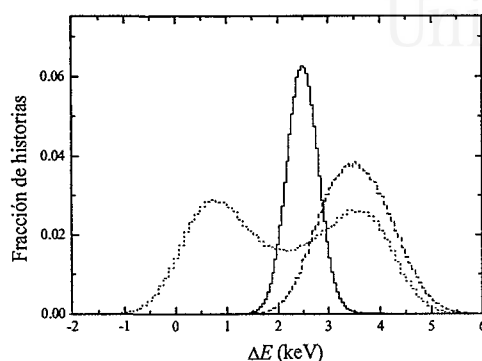


Figura 3.13: Distribuciones de pérdida de energía que poseen los fragmentos de un haz de  $H_2^+$  luego de atravesar una lámina de carbono amorfo de 500 a.u. de espesor. La velocidad del haz es  $v = 1$  a.u. (—), 2 a.u. (— —) y 4 a.u. (···).

En la figura 3.13 podemos observar la distribución energética de los fragmentos tras atravesar una lámina de carbono amorfo de 500 a.u. de espesor, para el caso de tres velocidades del haz de  $H_2^+$ :  $v = 1$  a.u., 2 a.u. y 4 a.u., respectivamente. Vemos que las distribuciones para  $v = 1$  a.u. y  $v = 2$  a.u. poseen un único pico. Para  $v = 4$  a.u. la distribución energética tiene dos picos por el efecto de la explosión coulombiana antes mencionado. Incluso en este último caso hay un pequeño porcentaje de partículas que salen del material con una velocidad mayor ( $\Delta E < 0$ ) que la que poseían antes de entrar en el material; para estas partículas, el efecto neto de todas las fuerzas que actúan sobre ellas ha sido de aceleración, en lugar de frenado.

Las distribuciones de  $R_2$  que poseen los fragmentos de una molécula de  $H_2^+$  tras atravesar una lámina de aluminio se han representado en la figura 3.14. Se muestran los casos correspondientes a distintos espesores de la lámina y tres velocidades del haz. Las conclusiones que fueron obtenidas para el caso de carbono amorfo son cualitativamente válidas para el caso de aluminio, aunque en este último caso la distribución con dos picos que aparece a altas velocidades no es tan marcada como en



el caso de carbono amorfo.

En la figura 3.15 presentamos el valor medio de la pérdida de energía (representado por  $\overline{R}_2$ ) en función del espesor de una lámina de carbono amorfo, para distintas energías de incidencia del haz de  $H_2^+$ . Los símbolos representan diferentes resultados experimentales. Se observa una buena concordancia entre predicciones teóricas y los experimentos, especialmente para los espesores mayores. La diferencia que se aprecia entre nuestra teoría y los experimentos, en el caso de algunas energías y para los espesores más pequeños, puede deberse a la dificultad experimental en la fabricación de láminas tan delgadas que sean homogéneas, así como en la correcta determinación de su espesor. La tendencia de  $\overline{R}_2$  a la unidad para espesores grandes se reproduce muy bien. Esta tendencia, que es más lenta a medida que la energía del haz aumenta, se debe a que después de un tiempo de tránsito grande los protones dejan de estar correlacionados, por el efecto de la repulsión coulombiana y de las colisiones nucleares.

La distribución de energías que tienen los fragmentos de una molécula de  $H_2^+$  tras atravesar una lámina de carbono amorfo se muestra en la figura 3.16, donde se comparan nuestros cálculos, representados por líneas, con los resultados experimentales obtenidos por Kimura *et al.* [1997]. La energía de incidencia del haz es de 1 MeV y se representan seis diferentes espesores. Los cálculos representados en línea continua corresponden a una densidad del carbono amorfo de  $2 \text{ g/cm}^3$ , mientras que la línea punteada corresponden a una densidad de  $1.7 \text{ g/cm}^3$ , dado que la densidad del carbono amorfo varía entre estos dos valores [Stoner 1991]; de todos modos, apenas hay diferencias relevantes entre los resultados obtenidos usando una u otra densidad. Se observa un acuerdo cualitativo con los resultados experimentales, en el sentido de que aparecen dos picos en la distribución; sin embargo hay una discrepancia en la posición y ancho de los picos. Esta discrepancia puede deberse a que estos resultados experimentales son preliminares y tanto la energía de incidencia del haz como la escala horizontal de energías no han sido todavía suficientemente calibradas [Kimura *et al.* 1997]. Además, la caracterización de las muestras de pequeños espesores plantea serias dificultades experimentales.

Cabe destacar de nuestro modelo que predice el resultado esperable a pequeños espesores, donde las distribuciones resultan más angostas.

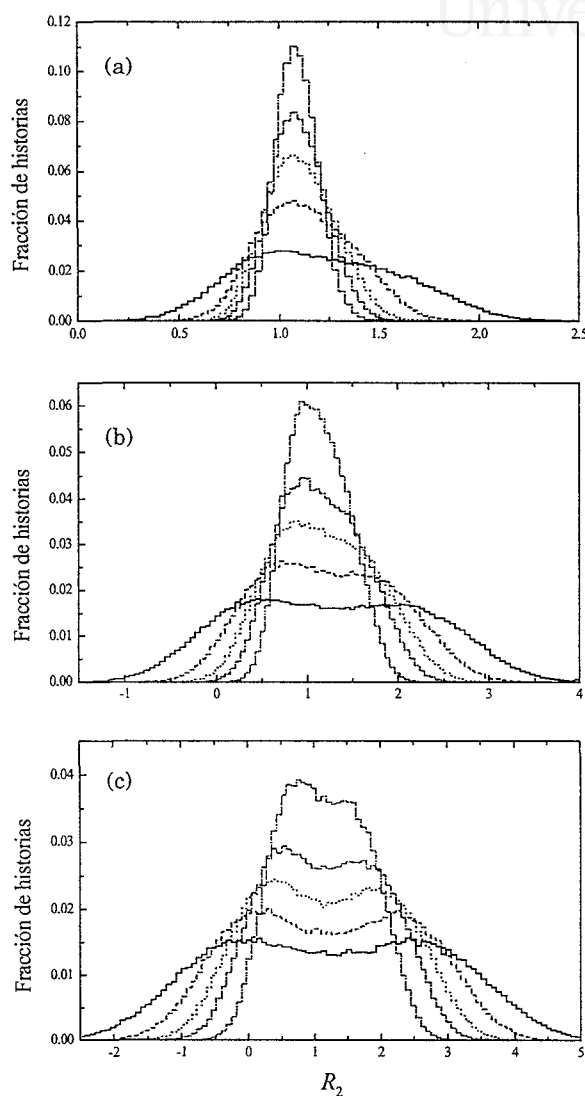


Figura 3.14: Distribuciones de  $R_2$  que poseen los fragmentos de un haz de  $H_2^+$  tras atravesar una lámina de aluminio de espesor 250 a.u. (—), 500 a.u. (— —), 750 a.u. (···), 1000 a.u. (- · -) y 1500 a.u. (- · · -). Las velocidades del haz son: (a)  $v = 2$  a.u., (b) 4 a.u. y (c) 6 a.u.

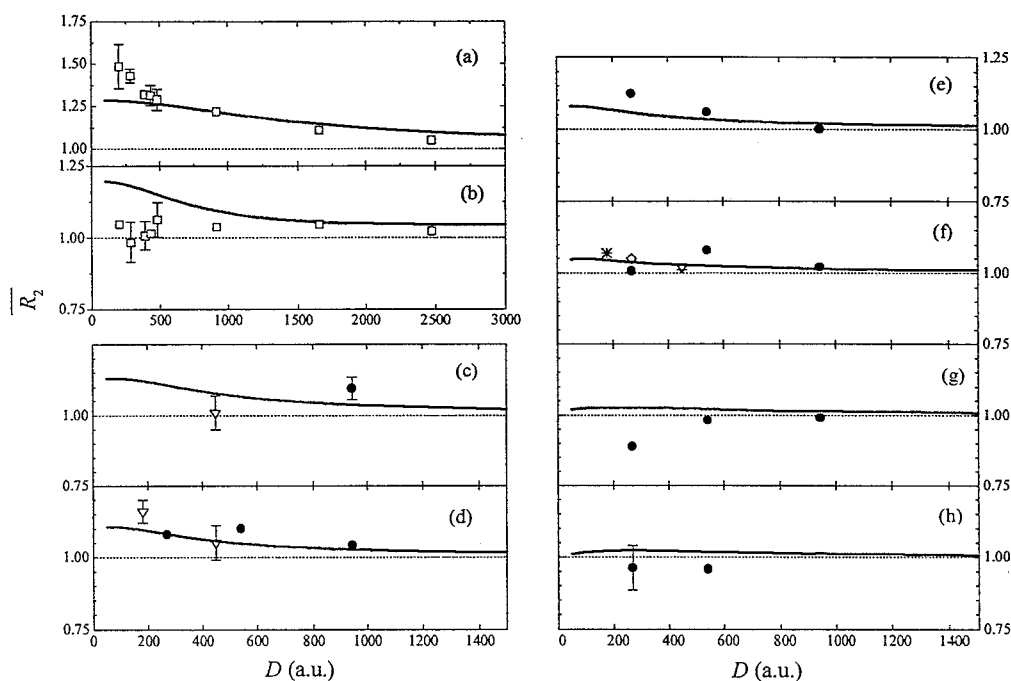


Figura 3.15: Valor medio de las distribuciones de  $R_2$  para diferentes energías de un haz de  $H_2^+$  que incide sobre una lámina de carbono amorfo, en función del espesor de la lámina. La línea continua corresponde a nuestros cálculos mientras que los símbolos son datos experimentales de: Ray *et al.* [1992] (●), Laubert [1979] (▽), Eckardt *et al.* [1978] (◇), Fritz *et al.* 1997 (□) y una simulación de Monte Carlo de Farizon *et al.* [1992] (\*). Las energías del haz de  $H_2^+$  son: (a)  $E = 500$  keV/amu, (b) 200 keV/amu, (c) 120 keV/amu, (d) 100 keV/amu, (e) 80 keV/amu, (f) 60 keV/amu, (g) 40 keV/amu y (h) 30 keV/amu.

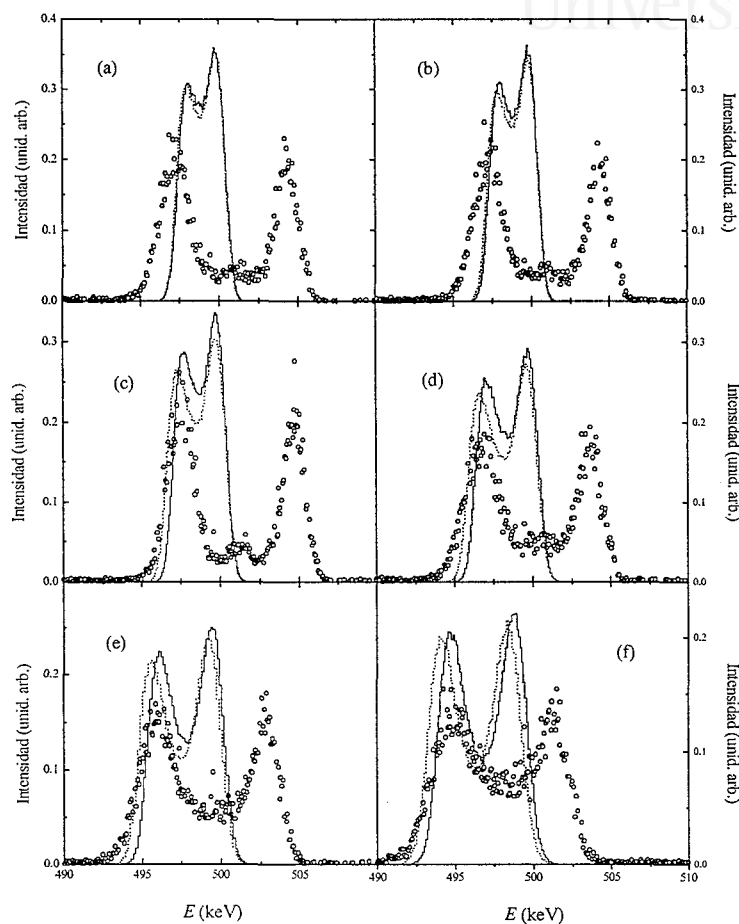


Figura 3.16: Distribuciones energéticas de los fragmentos de una molécula de  $H_2^+$  de 1 MeV de energía, después de atravesar una lámina de carbono amorfo, para el caso de diferentes espesores: (a)  $2.6 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ , (b)  $2.75 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ , (c)  $3.4 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ , (d)  $4.35 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ , (e)  $6.15 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  y (f)  $9.3 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ . La línea continua representa nuestros cálculos teóricos suponiendo una densidad del carbono amorfo de  $2 \text{g}/\text{cm}^3$ , mientras que la línea punteada corresponde a una densidad de  $1.7 \text{g}/\text{cm}^3$ . Los puntos representan los datos experimentales de Kimura *et al.* [1997]. Las curvas están normalizadas de manera que poseen área unidad

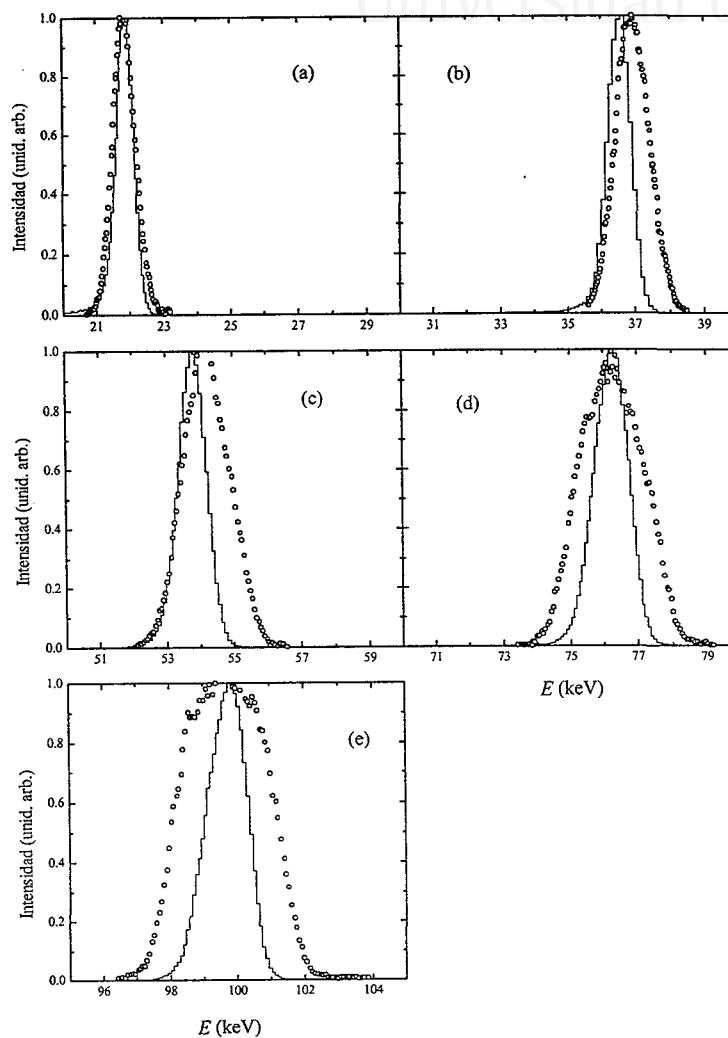


Figura 3.17: Distribuciones energéticas de los fragmentos que resultan cuando una molécula de  $H_2^+$  atraviesa una lámina de aluminio de 361 a.u. de espesor, para el caso de diferentes velocidades: (a)  $v = 0.98$  a.u., (b) 1.26 a.u., (c) 1.51 a.u., (d) 1.78 a.u. y (e) 2.03 a.u. Los puntos representan datos experimentales [Vidal Russell 1996] y las líneas corresponden a nuestros cálculos. Nuestros cálculos están normalizados para tener la misma intensidad máxima que los experimentos.

De hecho, en el límite de espesores muy pequeños la distribución resultante es un pico muy angosto alrededor de la energía de incidencia. Por otra parte, la distribución experimental no cumple con lo anterior y tiene un ancho que apenas varía con el espesor de la lámina.

En la figura 3.17 presentamos la distribución energética de los fragmentos de  $H_2^+$  que resultan cuando un haz de diferentes velocidades incide sobre una lámina de aluminio de 361 a.u. de espesor. Nuestros cálculos, indicados por las líneas continuas, comparan relativamente bien con los resultados experimentales de Vidal Russell [1996]. En concreto, se observa que la posición del pico del espectro coincide con los experimentos, pero la anchura de la distribución calculada es menor que la experimental. Nuevamente, al igual que en el caso de los protones comentado en la sección 1.5, nuestras distribuciones son más estrechas que las experimentales porque nuestro modelo para calcular el straggling subestima dicho valor en comparación con los experimentos (*cf.* figura 1.16).

Podemos concluir esta sección afirmando que nuestro modelo predice razonablemente bien el comportamiento de las distribuciones energéticas de los fragmentos de  $H_2^+$ , dando un único pico para bajas energías y dos picos para altas energías. También se ha analizado el comportamiento de las distribuciones energéticas tanto en función del espesor de la lámina como de la energía de incidencia.

### 3.6 Distribución angular

A continuación analizaremos el ángulo con que salen los fragmentos de una molécula  $H_2^+$  después de atravesar una lámina. Este ángulo está definido de la misma manera que en la sección 2.6, es decir, el ángulo que forma la velocidad de cada protón a la salida de la lámina con respecto a la dirección inicial del movimiento. Está claro que el fenómeno que más contribuye a que se desvíen los protones de su dirección inicial es el scattering nuclear. Como hemos considerado que el scattering de los protones es no correlacionado, cabe esperar que los resultados que obtengamos en esta sección sean muy similares a los obtenidos para el caso de protones individuales, ya discutidos en la sección 2.6.

En la figuras 3.18 y 3.19 hemos representado la distribución angular

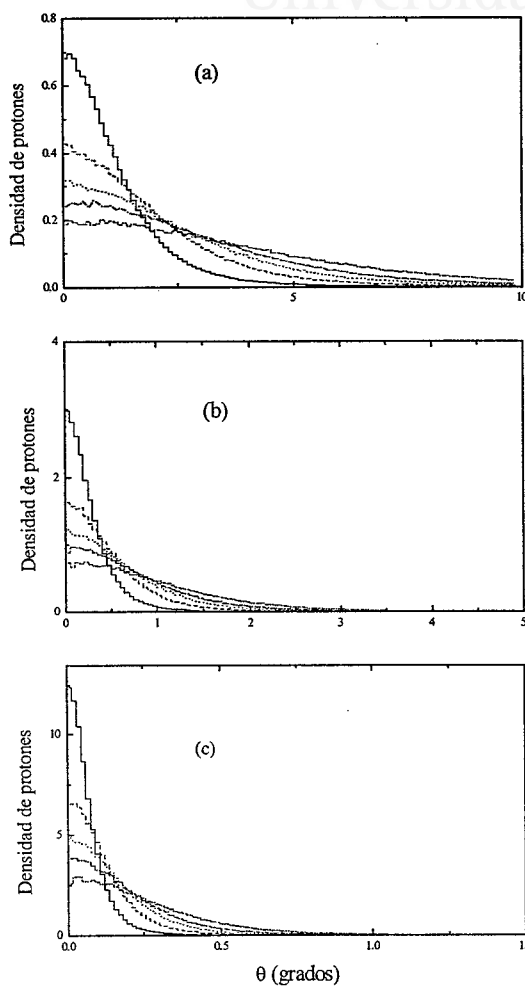


Figura 3.18: Densidad de protones en función del ángulo de salida, después de que un haz de  $H_2^+$  atraviese una lámina de carbono amorfo de espesor 250 a.u. (—), 500 a.u. (---), 750 a.u. (···), 1000 a.u. (- · -) y 1500 a.u. (- · · -). Las energías del haz son: (a)  $E = 25$  keV/amu, (b) 100 keV/amu y (c) 400 keV/amu. La escala vertical está en unidades arbitrarias.



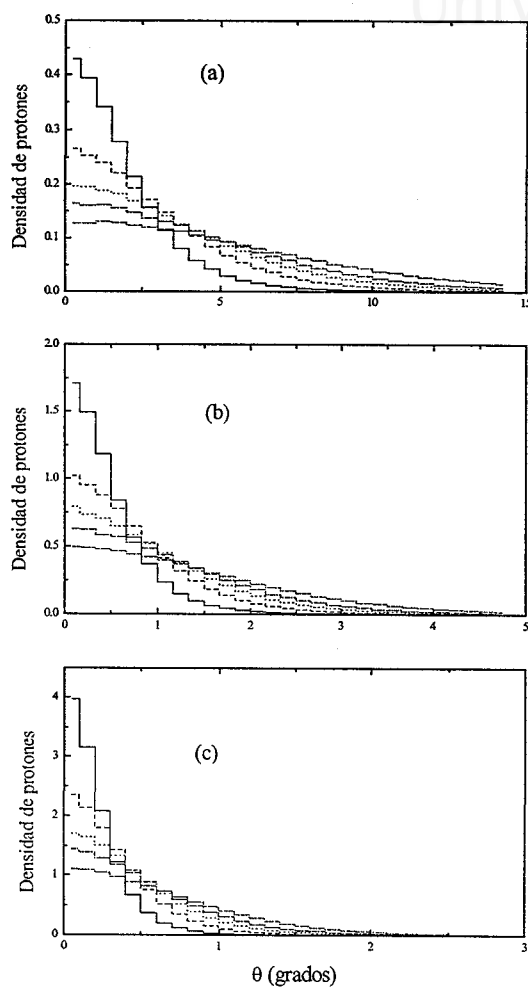


Figura 3.19: Densidad de protones en función del ángulo de salida, después de que un haz de  $H_2^+$  atraviese una lámina de aluminio de espesor 250 a.u. (—), 500 a.u. (— —), 750 a.u. (· · ·), 1000 a.u. (— · —) y 1500 a.u. (— · · —). Las energías del haz son: (a)  $E = 100$  keV/amu, (b) 400 keV/amu y (c) 900 keV/amu. La escala vertical está en unidades arbitrarias.



normalizada, tal como se definió en la sección 2.6, de los fragmentos de la molécula de  $H_2^+$  para distintos espesores ( $D = 250$  a.u.,  $500$  a.u.,  $750$  a.u.,  $1000$  a.u. y  $1500$  a.u.) de láminas de carbono amorfo y aluminio. En el caso de láminas de carbono amorfo, las energías valen  $v = 25$  keV/amu,  $100$  keV/amu y  $400$  keV/amu, y en el caso de aluminio, las energías son  $E = 100$  keV/amu,  $400$  keV/amu y  $900$  keV/amu. Se observa que para una dada energía la distribución angular se ensancha alcanzando mayores ángulos a medida que aumenta el espesor. La explicación de esto es que si el proyectil viaja más tiempo dentro del material es más probable que ocurra una colisión elástica de ángulo grande. También se observa que a medida que aumenta la energía del haz incidente la importancia de la dispersión elástica es menor y las distribuciones angulares son más angostas. Con respecto al tipo de material que constituye el blanco podemos apreciar que para aluminio, que posee un mayor número atómico que el carbono, la dispersión angular es mayor. Como vemos, las mismas deducciones que hicimos en la sección 2.6, al comentar las figuras 2.17 y 2.19 son válidas en este caso.

### 3.7 Distribución conjunta de ángulos y pérdida de energía

En esta sección hemos estudiado la distribución conjunta de pérdida de energía y ángulo de salida de los fragmentos de la molécula de  $H_2^+$  al atravesar láminas delgadas. Es decir, hemos tenido en cuenta con qué energía y ángulo sale cada fragmento del proyectil tras atravesar una lámina de material. Hemos analizado por separado las diferentes contribuciones a la interacción que sufre cada protón de la molécula: explosión coulombiana, respuesta electrónica del medio (efectos de interferencia y fuerza autofrenante) y colisiones nucleares. Tal como está diseñado el programa que estamos empleando en esta memoria, es muy sencillo analizar la contribución relativa de cada efecto.

En la figura 3.20 representamos la densidad conjunta, en función del ángulo de salida y de la pérdida de energía, de las partículas procedentes de la fragmentación de las moléculas de  $H_2^+$  que atraviesan una

lámina de carbono amorfo de 1000 a.u. de espesor. La velocidad de las moléculas es  $v = 4$  a.u. Igual que hicimos en la sección anterior, se ha representado el número de partículas que se detecta normalizado a la superficie del anillo correspondiente al ángulo donde se halla el detector.

Para ver en detalle cómo contribuye cada tipo de interacción a la forma de la distribución conjunta que estamos analizando, en la figura 3.20a presentamos únicamente la contribución de los efectos debidos a las excitaciones electrónicas, es decir, la fuerza autofrenante y la de interferencia, en la figura 3.20b sólo hemos considerado la explosión coulombiana entre los protones de la molécula, mientras que la figura 3.20c muestra los efectos de las colisiones nucleares, y, por último, la figura 3.20d aparece la distribución conjunta resultado de la superposición de todos los efectos anteriores (notemos las diferentes escalas en  $R_2$  y  $\theta$  en cada caso).

Vemos que la mayor contribución al frenado de los fragmentos viene dada por la fuerza autofrenante y la fuerza de interferencia, resultado de las perturbaciones inducidas en el medio. Esto se aprecia muy claramente en la figura 3.20a, puesto que el valor medio de la distribución de  $R_2$  es claramente distinto de cero.

La explosión coulombiana (figura 3.20b) no cambia el valor medio de la distribución de  $R_2$ , aunque es la responsable de que aparezcan dos picos en la misma. Como se ve, estos dos picos son simétricos respecto al valor  $R_2 = 0$ , como era de esperar según la discusión desarrollada en la sección 3.3.

Los dos efectos recién mencionados apenas contribuyen a la dispersión angular de los fragmentos, pues ésta se debe mayoritariamente al scattering nuclear, tal como se deduce de la figura 3.20c, donde la escala de ángulos que aparecen es, con diferencia, mucho mayor que la que aparece en las figuras 3.20a y b. Por otra parte, el scattering nuclear apenas contribuye a la variación energética de las partículas, puesto que  $R_2 \simeq 0$ .

Por último, la figura 3.20d muestra cómo sería la distribución conjunta en ángulos y pérdida de energía de los fragmentos cuando se tienen en cuenta todas las interacciones anteriormente discutidas. En este caso se aprecia claramente la existencia de los dos picos (debida a la repulsión coulombiana), los cuales no están centrados en  $R_2 = 0$

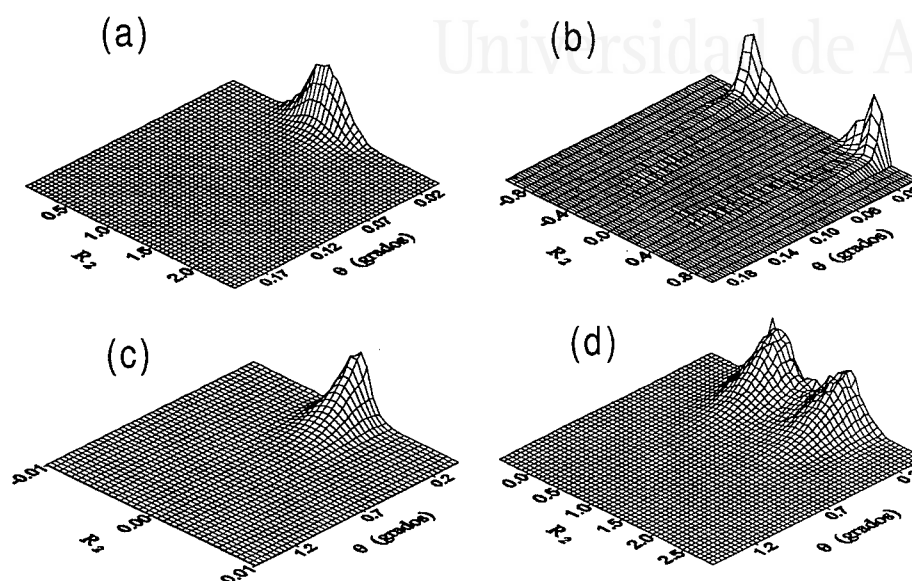


Figura 3.20: Densidad (en unidades arbitrarias) de los fragmentos que pierden una determinada energía (cuantificada por  $R_2$ ) y que salen con un ángulo  $\theta$ , tras atravesar una lámina de carbono amorfo de 1000 a.u. de espesor. La velocidad de las moléculas del haz es 4 a.u. (a) Sólo se ha considerado la interacción debida a las interferencias y a la fuerza autofrenante. (b) Sólo se ha considerado explosión coulombiana. (c) Sólo se han considerado colisiones nucleares. (d) Se han considerado todas las interacciones anteriores.

y se ensanchan (debido a las interacciones electrónicas con el medio); también se observa que la dispersión angular viene gobernada por las colisiones nucleares.

Puesto que en la mayoría de condiciones experimentales lo que se registra es el número de partículas detectadas (en lugar de la densidad de partículas), en la figura 3.21 mostramos las mismas situaciones que en la figura 3.20, pero sin normalizar a la superficie del anillo correspondiente al ángulo de detección. En este caso, no hemos comparado con datos experimentales porque no conocemos la geometría de los dis-

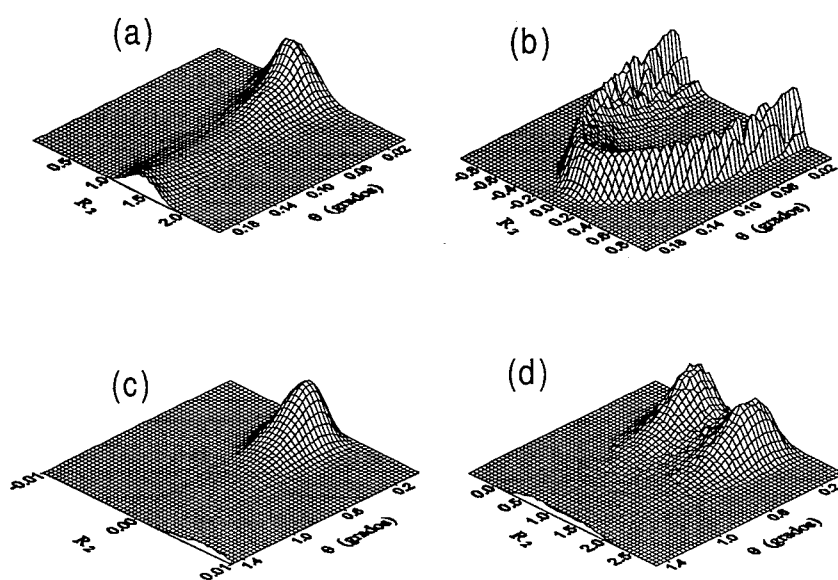


Figura 3.21: Número de fragmentos (en unidades arbitrarias) que pierden una determinada energía (cuantificada por  $R_2$ ) y que salen con un ángulo  $\theta$ , tras atravesar una lámina de carbono amorfo de 1000 a.u. de espesor. La velocidad de las moléculas del haz es 4 a.u. (a) Sólo se ha considerado la interacción debida a las interferencias y a la fuerza autofrenante. (b) Sólo se ha considerado explosión coulombiana. (c) Sólo se han considerado colisiones nucleares. (d) Se han considerado todas las interacciones anteriores.



positivos experimentales de detección.

### 3.8 Distribución de distancias internucleares

A continuación analizaremos la distribución de distancias internucleares a la salida del material. Esta información nos puede dar un indicio acerca de la probabilidad de que la molécula de  $H_2^+$  salga disociada o en forma molecular tras atravesar la lámina. Aunque hay otros factores que pueden influir en la probabilidad de disociación, como puede ser la captura de electrones efectuada por los fragmentos a la salida de la lámina, es claro que si aumenta la distancia internuclear, menor será la probabilidad de que el proyectil pueda salir en forma molecular.

Mediante el programa que hemos desarrollado es muy sencillo obtener la separación internuclear entre los protones en que se fragmenta la molécula de  $H_2^+$ . Puesto que el programa nos da las coordenadas de cada protón, es inmediato obtener la posición relativa entre ellos en cualquier instante. En particular, evaluaremos la separación entre los protones a la salida de la lámina.

En las figuras 3.22 y 3.23 hemos representado la distribución de distancias entre los protones de una molécula de  $H_2^+$  tras atravesar láminas de carbono amorfo y aluminio, respectivamente, de distintos espesores ( $D = 200$  a.u.,  $300$  a.u.,  $400$  a.u. y  $500$  a.u.). Las velocidades del haz de  $H_2^+$  son:  $v = 1$  a.u. y  $v = 2$  a.u. en el primer caso y  $v = 2$  a.u. y  $v = 4$  a.u. en el segundo caso. Se observa claramente que, para el límite de pequeños espesores, la distribución de las distancias internucleares a la salida de la lámina tiende a la distribución inicial (figura 3.1), mientras que a medida que el espesor crece, las distancias aumentan y se ensancha la distribución. Este hecho se debe principalmente al efecto de la explosión coulombiana dentro del material que tiende a separar entre sí a los fragmentos, aunque también puede contribuir el efecto de las colisiones nucleares. Otro resultado de interés es la comparación de la distribución de distancias internucleares para dos tiempos de tránsito iguales; por ejemplo, cuando una molécula de velocidad  $v = 2$  a.u. atraviesa una lámina de espesor  $400$  a.u. y una

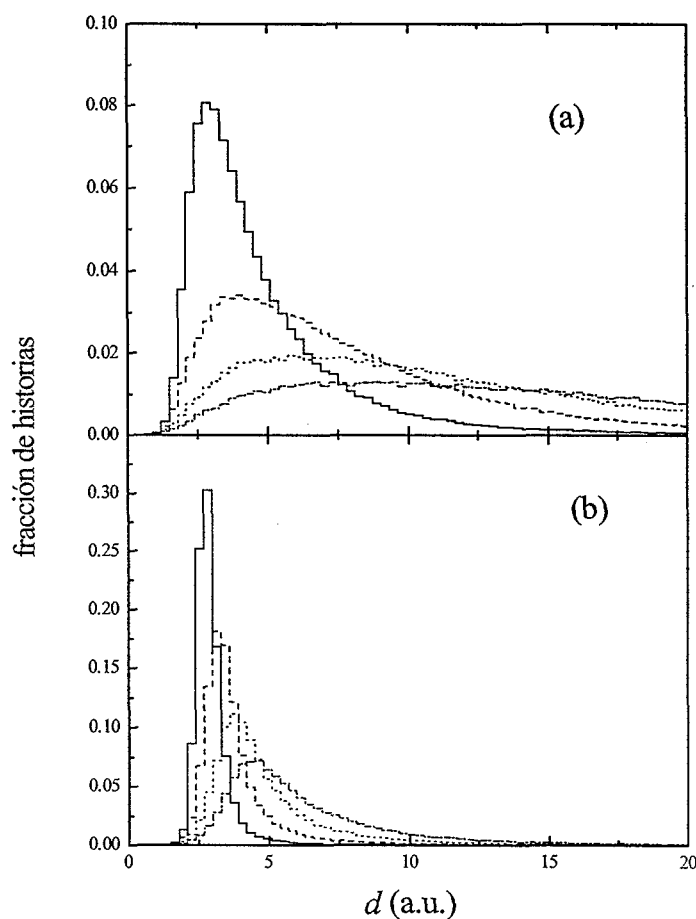


Figura 3.22: Distribución de distancias entre los componentes de una molécula de  $H_2^+$  tras atravesar una lámina de carbono amorfo de espesor: 200 a.u. (—), 300 a.u. (— —), 400 a.u. (···) y 500 a.u. (— · —). Las velocidades del haz son: (a)  $v = 1$  a.u. y (b) 2 a.u.

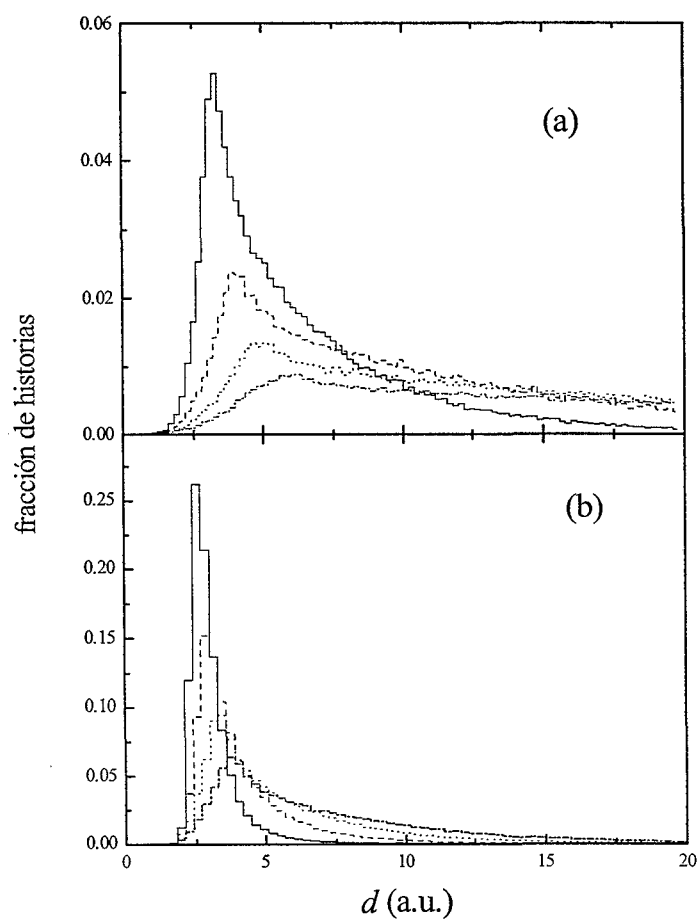


Figura 3.23: Distribución de distancias entre los componentes de una molécula de  $H_2^+$  tras atravesar una lámina de aluminio de espesor: 200 a.u. (—), 300 a.u. (— —), 400 a.u. (···) y 500 a.u. (— · —). Las velocidades del haz son: (a)  $v = 2$  a.u. y (b) 4 a.u.



molécula de velocidad  $v = 1$  a.u. atraviesa una lámina de 200 a.u. de espesor. Se puede ver que para tiempos de tránsito iguales, a velocidades mayores se dan mayores distancias internucleares. Esto es debido a que la explosión coulombiana está menos apantallada y por lo tanto la fuerza de repulsión es mayor a velocidades mayores.

La falta de datos experimentales sobre distancias internucleares a la salida de la lámina nos impide comparar nuestras predicciones para comprobar su validez.

### 3.9 Frenado de partículas alineadas

Concluiremos este capítulo mostrando la versatilidad del programa de simulación que hemos desarrollado. Para ello analizaremos un experimento reciente [Fritz *et al.* 1997] que consiste en hacer incidir sobre una lámina de carbono amorfo un haz de moléculas  $H_2^+$  orientadas al azar, y detectar los pares de protones que salieron alineados (es decir, aquellos cuyo eje internuclear es paralelo a la dirección inicial de movimiento); este experimento es análogo al realizado por Steuer *et al.* [1983]. En el dispositivo experimental, cuyo esquema se observa en la figura 3.24, un detector de partículas situado a una distancia de 278 cm de la lámina de carbono amorfo y que abarca un ángulo de  $0.04^\circ$  es capaz de discriminar si dos protones detectados pertenecían a la misma molécula de  $H_2^+$  y la pérdida de energía de los fragmentos. De esta manera es posible determinar la fracción de pares alineados frente a los fragmentos individuales detectados, así como la pérdida de energía que han experimentado estos pares.

En la figura 3.25 hemos representado la fracción de pares alineados frente a los fragmentos individuales detectados mediante el dispositivo de la figura 3.24, en función del espesor de la lámina. Para obtener una estadística satisfactoria, hemos realizado simulaciones de hasta 300000 historias para cada una de las velocidades y espesores analizados. Podemos ver que a medida que aumenta el espesor es menos probable detectar pares alineados. Esto es debido principalmente a los efectos de las colisiones nucleares, que son las principales responsables de que un proyectil se desvíe de su dirección de movimiento. A menores valores de energía es aún menos probable detectar pares alineados a causa de

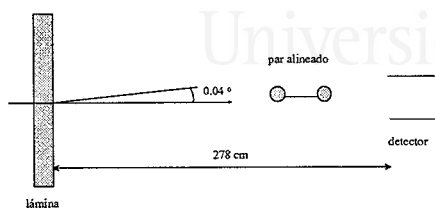


Figura 3.24: Esquema del dispositivo experimental de Fritz *et al.* [1997]. El detector está situado a 278 cm de una lámina de carbono amorfo, y es capaz de discriminar si dos protones que llegan consecutivamente pertenecían a la misma molécula de  $H_2^+$ , así como la pérdida de energía de éstos.

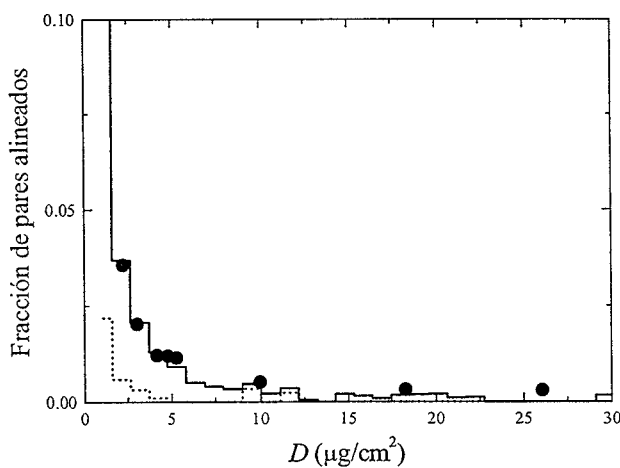


Figura 3.25: Fracción de pares alineados en función del espesor de una lámina de carbono amorfo. Las líneas representan nuestros cálculos para una energía del haz de 0.5 MeV/amu (—) y 0.2 MeV/amu (· · ·). Hemos representado los datos experimentales de Fritz *et al.* [1997] para una energía del haz de 0.5 MeV/amu (●).



los mayores ángulos de scattering que se obtienen a bajas energías. El acuerdo entre nuestros cálculos y los datos experimentales de Fritz *et al.* [1997] es excelente.

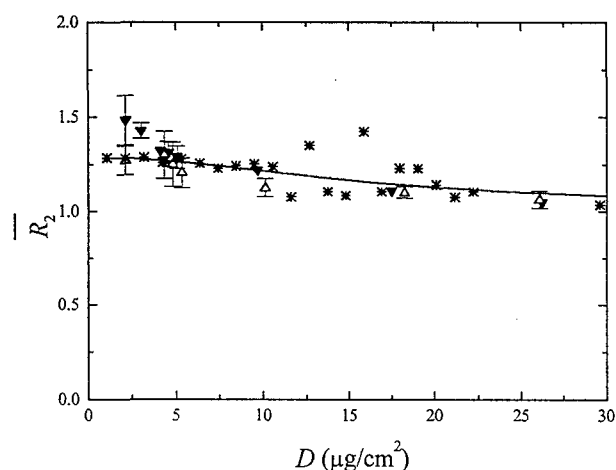


Figura 3.26: Valor de  $\overline{R_2}$  que poseen los fragmentos de una molécula de  $H_2^+$  de 0.5 MeV/amu tras atravesar una lámina de carbono amorfo, en función del espesor de la lámina. Los resultados correspondientes al caso de la detección de pares alineados están representados por los datos experimentales de Fritz *et al.* [1997] ( $\Delta$ ) y nuestros cálculos (\*). Los resultados correspondientes al caso de la detección de los fragmentos que salen con cualquier dirección están representados por los datos experimentales de Fritz *et al.* [1997] ( $\nabla$ ) y nuestros cálculos (—).

En la figura 3.26 mostramos el valor de  $\overline{R_2}$  que poseen los fragmentos de una molécula de  $H_2^+$  de energía  $E = 0.5$  MeV/amu en función del espesor de la lámina sobre la cual inciden. Se han representado nuestros cálculos para los casos de pares alineados con la dirección del haz, o fragmentos que salen en cualquier dirección. También hemos representado los datos experimentales de Fritz *et al.* [1997] para los dos casos anteriores. Observamos que existe un acuerdo razonable entre teoría y

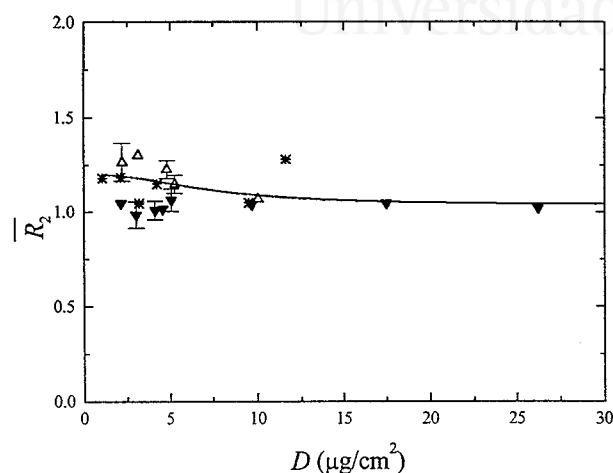


Figura 3.27: Valor de  $\overline{R}_2$  que poseen los fragmentos de una molécula de  $H_2^+$  de 0.2 MeV/amu tras atravesar una lámina de carbono amorfo, en función del espesor de la lámina. Los resultados correspondientes al caso de la detección de pares alineados están representados por los datos experimentales de Fritz *et al.* [1997] ( $\Delta$ ) y nuestros cálculos ( $*$ ). Los resultados correspondientes al caso de la detección de los fragmentos que salen con cualquier dirección están representados por los datos experimentales de Fritz *et al.* [1997] ( $\nabla$ ) y nuestros cálculos ( $-$ ).

experimento, especialmente a espesores grandes de la lámina, donde  $\overline{R}_2$  tiende a la unidad. Sin embargo, nuestros resultados no predicen diferencias apreciables entre el valor medio de la pérdida de energía de los pares de protones que salen alineados de la lámina y los fragmentos que salen con cualquier dirección. La gran dispersión que existe en nuestro cálculo correspondiente al caso de pares alineados a altos espesores se debe a que en esta situación se detectan pocas partículas, por lo que empeora la estadística de nuestra simulación.

En la figura 3.27 hemos representado  $\overline{R}_2$  en función del espesor de la lámina para el caso de una energía de la molécula de  $H_2^+$  de

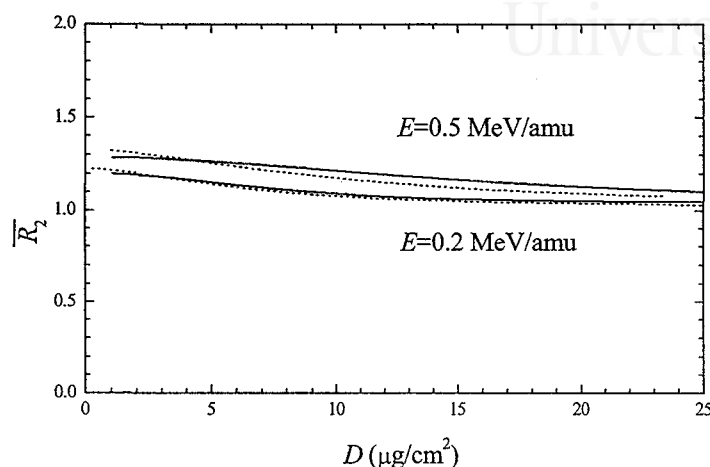


Figura 3.28: Valor de  $\overline{R}_2$  para una molécula de  $H_2^+$  de energía  $E = 0.5$  MeV/amu (pareja de curvas superiores) o  $E = 0.2$  MeV/amu (pareja de curvas inferiores). Comparamos los resultados de nuestra simulación para fragmentos que viajan en direcciones aleatorias (—) con los del modelo analítico ( $\cdots$ ) que se discutirá en el capítulo 4.

0.2 MeV/amu. Las conclusiones que se han obtenido para  $E = 0.5$  MeV/amu son también válidas en este caso. Para esta energía es aún menos probable recibir pares alineados en el detector, especialmente a grandes espesores. Puede observarse que experimentalmente sólo se detectan pares alineados para espesores  $\lesssim 10 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ , lo cual coincide con nuestros cálculos que dan una fracción nula de pares detectados para  $D \gtrsim 10 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  (cf. figura 3.25).

En definitiva, podemos concluir que tanto la fracción de pares alineados detectados como la energía perdida por éstos, así como por los fragmentos que salen en direcciones arbitrarias, concuerdan satisfactoriamente bien con los datos experimentales de Fritz *et al.* [1997], y que las discrepancias a pequeños espesores están relacionadas con las dificultades en la caracterización de las muestras (como se puede inferir



de las barras de error que aparecen en estos casos).

Para comparar con nuestra simulación del valor medio del poder de frenado normalizado correspondiente a fragmentos que viajan en direcciones aleatorias, hemos empleado un modelo analítico más simplificado, que se discutirá en detalle en el capítulo 4. En este modelo, la explosión coulombiana es la responsable de la separación de los protones de la molécula entre sí y los efectos electrónicos (fuerzas de interferencia y autofrenado) son las responsables de la pérdida de energía media de la molécula ( $\overline{R}_2$ ). Obviamente esta pérdida de energía va a depender de la separación entre los protones de la molécula y, por lo tanto, la explosión coulombiana va a ser indirectamente responsable de la pérdida de energía. En este modelo analítico no se incluyen las colisiones nucleares ya que, como hemos mencionado, afecta a la dirección de movimiento de los componentes de la molécula de  $H_2^+$  pero apenas a su pérdida de energía.

En la figura 3.28 hemos representado  $\overline{R}_2$  para  $E = 0.2$  MeV/amu y  $0.5$  MeV/amu en función del espesor de una lámina de carbono amorfo. La línea continua representa los cálculos empleando el programa que hemos usado en este capítulo y en línea punteada los resultados con el modelo simplificado que hemos mencionado. Se aprecia que apenas hay diferencia entre los cálculos realizados por ambos procedimientos para el valor de  $\overline{R}_2$  correspondiente a los fragmentos de  $H_2^+$  que salen de la lámina en cualquier dirección. Por ello, si no deseamos entrar en los detalles de distribuciones de energía, puede calcularse el valor medio del poder de frenado de una molécula empleando el modelo analítico que describiremos en el siguiente capítulo, particularizando el estudio al caso de moléculas  $H_3^+$ .



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

## Capítulo 4

# Interacción de moléculas $H_3^+$ con láminas delgadas

### 4.1 Introducción

En el capítulo anterior hemos estudiado de forma extensa diversos aspectos de la interacción de la molécula  $H_2^+$  con diversos materiales. Como habíamos mencionado al principio de esta memoria, el estudio de haces moleculares al interactuar con láminas delgadas es de interés tanto por sus aplicaciones potenciales como porque permite elucidar cuestiones básicas relacionadas con la diferente pérdida de energía de un conjunto de partículas cargadas viajando de forma correlacionada o no. Por ello, tras analizar lo que sucede en el caso de la molécula  $H_2^+$ , que es la más sencilla, en este capítulo vamos a estudiar la pérdida de energía de haces de moléculas de  $H_3^+$  al atravesar una lámina de carbono amorfo.

La molécula de  $H_3^+$  es la siguiente en complejidad y también es un caso bastante simple de analizar, además se puede generar en descargas de hidrógeno molecular y tiene interés en diversos entornos de astrofísica [Tennyson y Miller 1994], por tanto no resulta extraño que halla sido el tema de extensos trabajos [Carney 1980, Ray *et al.* 1992, Denton *et al.* 1997ab, Pérez-Pérez *et al.* 1997]. Comparada con la molécula de  $H_2^+$ , la molécula de  $H_3^+$  ofrece la posibilidad de investigar efectos relacionados con la orientación molecular que no aparecen en el

caso de  $H_2^+$ , ya que la molécula de  $H_2^+$  es lineal mientras que  $H_3^+$  es una molécula plana.

En este capítulo, analizaremos la dependencia del poder de frenado de la molécula  $H_3^+$  tanto con el espesor de la lámina atravesada como con la velocidad de la molécula incidente. También discutiremos aspectos relacionados con la influencia de geometría de la molécula de  $H_3^+$  con respecto a su dirección de movimiento, pues hemos de tener en cuenta que los efectos de vecindad que tienen lugar entre los componentes moleculares dependen tanto de las propiedades del medio frenante como de la configuración geométrica de la molécula y de la velocidad de la misma.

Sólo estudiaremos el valor medio de la distribución de la energía perdida por los protones en que se fragmenta la molécula de  $H_3^+$  al interactuar con un material, pues para estas moléculas no se dispone de tanta información experimental como para el caso de la molécula de  $H_2^+$ . Además, nos restringiremos al caso de blancos de carbono amorfo, que es el material del cual se disponen más trabajos experimentales.

Cuando las velocidades involucradas son elevadas ( $v \gtrsim 1$  a.u.), el comportamiento del valor medio de la distribución de pérdidas energéticas puede calcularse mediante un formalismo dieléctrico en el cual los principales ingredientes son la repulsión coulombiana, el autofrenado electrónico y los efectos de interferencia entre protones vecinos. Por ello, no es necesario utilizar el método de la simulación completa que se ha discutido en los capítulos 2 y 3, y no consideraremos los efectos de las colisiones elásticas con los átomos del blanco. Además, al finalizar el capítulo 3 vimos que la predicción de los valores medios de la pérdida de energía calculados con el modelo de la simulación completa coinciden prácticamente con los del formalismo dieléctrico aplicado al caso de proyectiles moleculares, que describiremos más adelante.

La interacción de haces moleculares de  $H_3^+$  con medios materiales presenta, genéricamente, las mismas particularidades que aparecen en el caso de moléculas de  $H_2^+$ . La repulsión coulombiana entre los constituyentes de la molécula y su interacción con los electrones del medio (fuerza autofrenante y efectos de interferencia) son los dos procesos principales que tienen lugar, y, en primera aproximación, consideraremos que son independientes; esto es así porque actúan en escalas de tiempo muy diferentes ( $\sim 10^{-15}$  -  $10^{-14}$  s para la explosión coulomb-





biana y  $\sim 10^{-17} - 10^{-16}$  s para las interacciones electrónicas). En otras palabras, esto es equivalente a usar la aproximación de Born-Oppenheimer para separar el movimiento nuclear del electrónico [Mott y Massey 1950]. Por tanto, siguiendo este procedimiento es posible evaluar las posiciones relativas de los protones de la molécula, considerando la repulsión coulombiana por un lado, y el poder de frenado electrónico instantáneo (en función de estas posiciones relativas) por el otro.

Como resultado de la repulsión coulombiana, las posiciones relativas de los tres protones que forman la molécula de  $H_3^+$  cambian al viajar a través del blanco. Este efecto se tendrá en cuenta por medio de cálculos numéricos del movimiento relativo de los fragmentos de la molécula en el sólido. El poder de frenado instantáneo de la molécula de  $H_3^+$  (es decir, el poder de frenado correspondiente a la separación internuclear que hay en cada instante) lo obtendremos a partir del formalismo dieléctrico [Arista 1978]. El poder de frenado total de la molécula de  $H_3^+$  después de atravesar la lámina se obtendrá promediando este poder de frenado instantáneo durante el tiempo de tránsito a través del material.

En la siguiente sección analizaremos la dinámica de la explosión coulombiana, a continuación emplearemos el formalismo dieléctrico [Arista 1978] para describir el poder de frenado de una molécula en función de la orientación respecto de su movimiento, y, para terminar, compararemos nuestros cálculos teóricos con los datos experimentales disponibles hasta el momento.

## 4.2 Explosión coulombiana

Cuando una molécula de  $H_3^+$  interactúa con un sólido pierde sus electrones en las primeras capas atómicas. En subsiguientes colisiones con los electrones del blanco los protones pueden participar en procesos de captura y pérdida de electrones; como resultado de estos procesos a cada protón se le puede asignar una carga efectiva [Yarlagadda *et al.* 1978], la cual es prácticamente la unidad para las velocidades del proyectil que nos interesan discutir en esta memoria ( $v \gtrsim 1$  a.u.).

La interacción entre los protones de la molécula está mediada por un potencial coulombiano apantallado (ecuación 3.3), que depende de la velocidad del proyectil a través de la longitud de apantallamiento

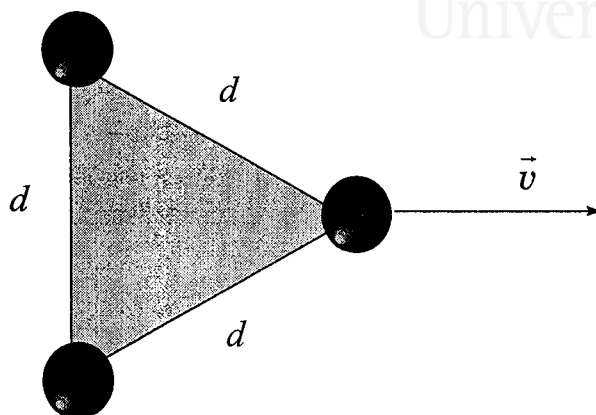


Figura 4.1: La molécula de  $H_3^+$  es un triángulo equilátero de lado  $d$ , que inicialmente vale  $d_0 = 1.89$  a.u.

$a = v/\omega_{p1}$ ; en el límite de grandes longitudes de apantallamiento se obtiene el potencial coulombiano puro.

La configuración geométrica que posee la molécula de  $H_3^+$  es la de un triángulo equilátero cuyo lado vale  $d_0 = 1.89$  a.u. en promedio [Gaillard *et al.* 1978, Carney 1980, Gemmeil 1981], tal como se observa en la figura 4.1. Por lo tanto, la orientación del plano de la molécula en relación con su velocidad añade un nuevo elemento a tener en cuenta a la hora de calcular la pérdida de energía de la molécula.

Usando el algoritmo de Verlet [Allen y Tildesley 1987] descrito en la sección 2.2.1, resolvemos numéricamente las ecuaciones de movimiento para los tres protones sometidos a su repulsión coulombiana mutua. El efecto de estas fuerzas es el de incrementar la distancia  $d$  entre los lados del triángulo que forman los tres protones, sin cambiar su forma.

En la figura 4.2 presentamos la evolución de la distancia  $d$  entre los protones de la molécula de  $H_3^+$ , en función del tiempo que lleva viajando la molécula a través de una lámina de carbono amorfo. Mostramos los

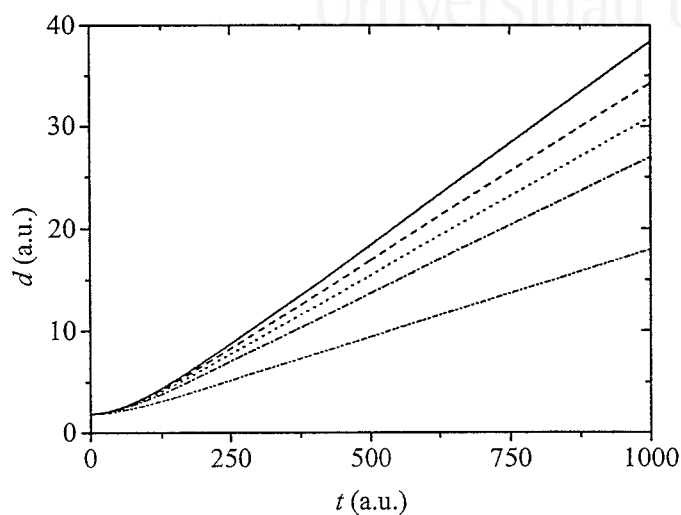


Figura 4.2: Evolución temporal de la distancia internuclear  $d$  para velocidad:  $v = 1$  a.u. ( $- \cdot \cdot -$ ),  $2$  a.u. ( $- \cdot -$ ),  $3$  a.u. ( $\cdot \cdot \cdot$ ),  $5$  a.u. ( $- -$ ) y para el caso de una repulsión coulombiana pura ( $-$ ).

resultados correspondientes para varias velocidades de la molécula ( $v = 1$  a.u. -  $5$  a.u.), tanto para el caso del potencial coulombiano apantallado como para el potencial coulombiano puro, el cual corresponde al límite de alta velocidad del caso apantallado. Las curvas correspondientes al potencial coulombiano apantallado están siempre por debajo de los resultados obtenidos para el potencial coulombiano puro. Podemos observar que cuando la molécula penetra en el material ( $d = d_0$  en  $t = 0$ ) el valor de la distancia  $d$  crece lentamente al principio, alcanzando más tarde un comportamiento asintótico lineal, con una pendiente que aumenta con la velocidad de la molécula. El mayor apantallamiento producido para velocidades pequeñas de la molécula se debe a que los electrones de valencia del carbono son lo suficientemente rápidos como para apantallar la carga de los protones.

### 4.3 Frenado electrónico de la molécula $H_3^+$

El movimiento correlacionado de las partículas que forman una molécula da lugar al llamado efecto de vecindad [Brandt 1974], el cual puede evaluarse satisfactoriamente, hasta primer orden en teoría de perturbaciones, dentro del marco del formalismo dieléctrico del poder de frenado [Arista 1978]. En este marco de referencia, cada constituyente de la molécula se trata como si fuese una carga puntual, y el blanco se modela mediante un gas de electrones isótropo y homogéneo, cuya respuesta a una perturbación externa está caracterizada completamente por su función dieléctrica  $\epsilon(k, \omega)$ .

Cuando una carga penetra en el sólido induce un campo eléctrico en el mismo, el cual frena al proyectil haciendo que pierda energía cinética. Si consideramos una molécula con velocidad  $\vec{v}$ , compuesta por  $N$  partículas de carga  $Z_i$  y con posiciones relativas internucleares  $\vec{r}_{ij}$ , a partir del formalismo dieléctrico podemos obtener una expresión general para el poder de frenado de la molécula [Arista 1978]:

$$S_{\text{mol}} = - \sum_{i=1}^N \vec{F}_j \frac{\vec{v}}{v} = \frac{1}{2\pi^2} \int d^3k \frac{\vec{k}\vec{v}}{k^2} \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon(k, \vec{k}\vec{v})} \right] \times \left[ \sum_{i=1}^N Z_i^2 + \sum_{i \neq j}^N Z_i Z_j \cos(\vec{k}\vec{r}_{ij}) \right] \quad (4.1)$$

donde  $\omega = \vec{k}\vec{v}$ . El primer sumando representa la pérdida de energía de cada ion  $i$  de la molécula por separado, como si se tratara de un conjunto de iones independientes (es decir, no correlacionados). El segundo sumando es el término de interferencia que sufre el ion  $i$  debido a la polarización dinámica del medio inducida por los demás iones que forman la molécula.

Según el formalismo dieléctrico, el poder de frenado de un medio para un único protón viene dado por:

$$S_p = \frac{2}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} d\omega \omega \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon(k, \omega)} \right], \quad (4.2)$$

Teniendo en cuenta las ecuaciones (4.1) y (4.2) podemos escribir el poder de frenado de una forma más compacta:



$$S_{\text{mol}}(r_{ij}, \theta_{ij}) = \left[ \sum_{i=1}^N Z_i^2 + \sum_{i \neq j}^N Z_i Z_j I(r_{ij}, \theta_{ij}) \right] S_p, \quad (4.3)$$

donde  $I(r_{ij}, \theta_{ij})$  es la función de interferencia (también llamada de vecindad), y contiene toda la información acerca de los efectos de interferencia en el poder de frenado de la molécula, debido al movimiento correlacionado de las partículas que la componen:

$$I(r, \theta) = \frac{1}{2\pi^2 v S_p} \int d^3 k \frac{\vec{k} \vec{v}}{k^2} \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon(k, \vec{k} \vec{v})} \right] \cos(\vec{k} \vec{r}) \quad (4.4)$$

La función de interferencia depende tanto de la distancia internuclear  $d = |\vec{r}|$ , como del ángulo  $\theta$  que forma el vector internuclear con la velocidad de la molécula  $\vec{v}$ . Las propiedades de las láminas de carbono amorfo vienen especificadas mediante la parametrización de la función de pérdidas  $\text{Im}[-1/\epsilon(k, \omega)]$  discutida en la sección 1.4.

Particularizando la ecuación (4.3) para el caso de  $H_3^+$ , obtenemos el poder de frenado electrónico de la molécula, que viene dado por:

$$S_{H_3^+}(r_{ij}, \theta_{ij}) = \left[ \sum_{i=1}^3 Z_i^2 + \sum_{i \neq j}^3 Z_i Z_j I(r_{ij}, \theta_{ij}) \right] S_p, \quad (4.5)$$

Dada la simetría cilíndrica que tiene el movimiento de la molécula, la función de interferencia  $I(r, \theta)$  se puede expresar como:

$$I(r, \theta) = \frac{2}{\pi v^2 S_p} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} d\omega \omega \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon(k, \omega)} \right] \cos\left(\frac{z_0 \omega}{v}\right) \times J_0\left(\rho_0 \sqrt{k^2 - \omega^2/v^2}\right). \quad (4.6)$$

donde  $z_0 = d \cos \theta$  y  $\rho_0 = d \sin \theta$  son, respectivamente, las proyecciones de la distancia internuclear en las direcciones paralela y perpendicular al movimiento de la molécula;  $J_0$  es la función de Bessel de orden cero [Abramowitz y Stegun 1972]. A partir de la fórmula (4.5) podemos ver que el frenado que sufre la molécula de  $H_3^+$  depende del valor de  $d$  y de la orientación que forma el plano de la molécula respecto a su velocidad.

Como ahora no estamos interesados en conocer la distribución de pérdidas de energía de los fragmentos, sino en su valor medio, definimos el poder de frenado normalizado,  $R_3$ , de la molécula de  $H_3^+$  como el poder de frenado de la molécula dividido por la suma del poder de frenado de sus constituyentes considerados de forma independiente,

$$R_3 = \frac{S_{H_3^+}}{3S_p}. \quad (4.7)$$

Esta definición es análoga a la ecuación (3.5) y al valor medio de la definición equivalente a la ecuación (3.6).

El valor de  $R_3$  nos da información sobre los efectos de interferencia en la energía perdida por la molécula de  $H_3^+$ . La diferencia entre el poder de frenado de la molécula y el de los protones individuales, la cual da lugar a  $R_3 \neq 1$ , tiene su origen en que las excitaciones electrónicas producidas por protones vecinos interfieren entre sí. Podemos considerar los siguientes casos extremos: en el límite de partículas independientes las distancias internucleares son muy grandes y la función de interferencia tiende a cero ( $R_3 = 1$ ). El otro extremo es el límite de partícula puntual, que tiene lugar cuando las distancias internucleares son muy pequeñas, y, a efectos de excitaciones electrónicas, la molécula se comporta como una sola carga (suma de los tres protones). En este caso, la función de interferencia tiende a uno y  $R_3 = 3$ .

#### 4.4 Dependencia del frenado con la orientación molecular

Seguidamente vamos a discutir los efectos de la orientación molecular en el frenado de la molécula de  $H_3^+$ , que hemos evaluado usando las ecuaciones (4.5) y (4.6). En la figura 4.3 mostramos dos orientaciones particulares de la molécula de  $H_3^+$ , que llamaremos “paralela” y “perpendicular” por ser éstas sus orientaciones relativas a la velocidad  $\vec{v}$ . Como veremos a continuación, estas dos configuraciones dan resultados bien diferentes para el frenado electrónico de la molécula de  $H_3^+$ .

Teniendo en cuenta que, debido a la repulsión coulombiana, la distancia internuclear  $d$  aumenta con el tiempo, expresaremos el valor

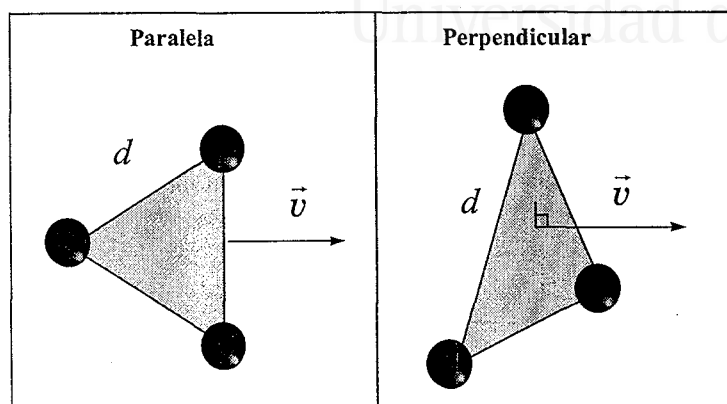


Figura 4.3: Orientaciones perpendicular y paralela, respectivamente, de la molécula de  $H_3^+$  relativa a la dirección de movimiento.

de  $R_3$  en un instante dado en función de la distancia internuclear instantánea  $d$ ,  $R_3(d)$ . Para el caso de la molécula de  $H_3^+$  con orientación perpendicular a su dirección de movimiento, tenemos:

$$R_3^\perp(d) = 1 + 2I(d, \theta = \pi/2), \quad (4.8)$$

mientras que para la orientación paralela tenemos:

$$R_3^\parallel(d) = 1 + \frac{2}{3} [2I(d, \theta = \pi/6) + I(d, \theta = \pi/2)]. \quad (4.9)$$

Según la aproximación que estamos utilizando, la orientación inicial de la molécula no cambia con el tiempo, por tanto la dependencia temporal de las ecuaciones (4.8) y (4.9) aparece solamente a través de la variación de la distancia internuclear con el tiempo,  $d(t)$ . Por cuestiones de simetría se puede deducir que  $R_3^\parallel(d)$  no cambia si la estructura triangular de la molécula apunta hacia o en contra de la dirección de movimiento. Puede verse asimismo que, debido a la simetría cilíndrica

del problema, el valor de  $R_3^{\perp}(d)$  no cambia mientras el plano que forma la molécula se mantenga perpendicular a la velocidad de la misma.

En la mayoría de los experimentos que se realizan para obtener el poder de frenado de moléculas al atravesar láminas delgadas no se suele controlar la orientación inicial de la molécula, por tanto el caso de orientación aleatoria de la molécula sería el más cercano a la mayoría de las condiciones experimentales [Ray *et al.* 1992]. En este caso, cuando consideramos una orientación aleatoria de la molécula  $H_3^+$  obtenemos:

$$R_3^{\text{ran}}(d) = 1 + 2\overline{I(d)}, \quad (4.10)$$

donde  $\overline{I(d)}$  es el promedio angular de la función de interferencia  $I(d, \theta)$  dada por la ecuación (4.6).

En la figura 4.4 hemos representado  $R_3$  en función de la distancia internuclear  $d$ , para las orientaciones paralela, perpendicular y aleatoria, y para dos velocidades diferentes de la molécula de  $H_3^+$ :  $v = 2$  a.u. y 5 a.u. Como podemos observar, el cociente entre el poder de frenado de la molécula y el de tres protones individuales es claramente distinto de la unidad, sobre todo a separaciones internucleares pequeñas. Esto significa que los efectos de interferencia son importantes y la pérdida de energía de la molécula difiere claramente de la pérdida de energía que sufrirían tres protones independientes. En la mayoría de los casos  $R_3(d) > 1$ , lo cual significa que la molécula de  $H_3^+$  se frena más que tres protones individuales, es decir, deposita en el material una densidad de energía mayor. Únicamente aparecen interferencias negativas ( $R_3(d) < 1$ ) para valores intermedios de la distancia intermolecular  $d$ , en el caso de la orientación paralela de la molécula y velocidades bajas.

Si analizamos el valor de  $R_3$  para cada configuración, en función de la velocidad incidente de la molécula, observamos que para velocidades altas ( $v = 5$  a.u.)  $R_3$  es mayor en el caso de configuración paralela que para la perpendicular, mientras que para velocidades más bajas ( $v = 2$  a.u.) se produce el comportamiento opuesto. También se aprecia que, a medida que aumenta la velocidad del proyectil, los efectos de interferencia se extienden a mayores distancias interatómicas  $d$ , y en el límite de partículas muy distantes se obtiene que  $\lim_{d \rightarrow \infty} R_3(d) = 1$ , lo cual corresponde a la situación de tres protones que viajan a través del material de forma no correlacionada. Los resultados que hemos presen-



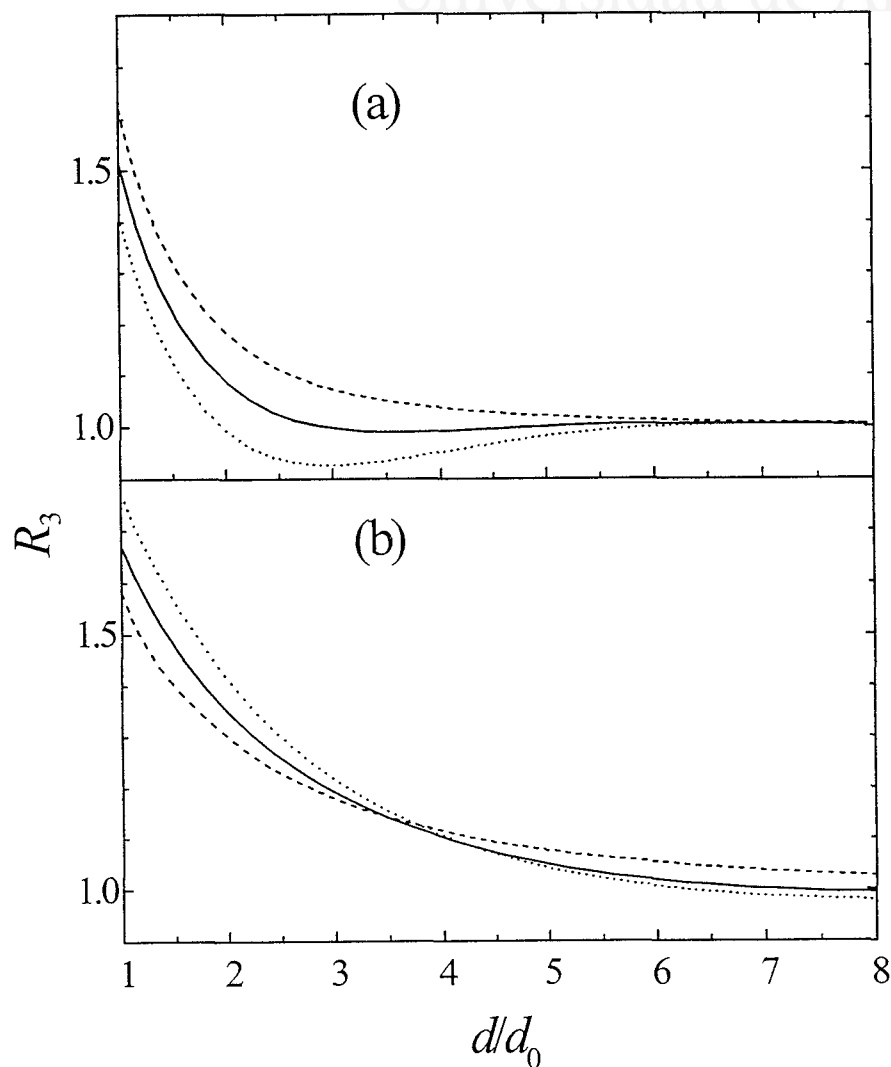


Figura 4.4:  $R_3$  instantáneo en función de la separación internuclear  $d$  para una molécula de  $H_3^+$  con orientación paralela ( $\cdots$ ), perpendicular ( $- -$ ) y aleatoria ( $-$ ). La velocidad de la molécula es: (a)  $v = 2$  a.u. y (b)  $v = 5$  a.u.

tado en la figura 4.4 se pueden entender mediante un análisis espacial de los efectos de apantallamiento dinámico y del potencial inducido en el medio por el protón a diferentes velocidades (ver figuras 3.3 y 3.4). El potencial inducido por el protón tiene un comportamiento oscilatorio en la dirección paralela al movimiento del proyectil,  $\tilde{z}$ , con una longitud de onda dada por  $\lambda \sim 2\pi v/\omega_{pl}$ , y un decaimiento aproximadamente exponencial en la dirección transversal a la velocidad del proyectil,  $\rho$ . Por lo tanto, si la distancia entre los protones es mucho mayor que la longitud de onda  $\lambda$ , cada protón no sentirá el efecto de sus compañeros y, en consecuencia, no habrá efectos de interferencia ( $R_3 \cong 1$ ), resultando como si los protones se movieran de una manera no correlacionada. Esto explica el hecho de que los efectos de interferencia desaparezcan a mayores distancias internucleares cuando la velocidad aumenta, ya que en este caso la longitud de onda del potencial inducido es mayor.

El comportamiento del frenado de la molécula con la orientación, representado por  $R_3$ , también puede explicarse mediante un estudio detallado del potencial inducido. En la figura 4.5 hemos representado las curvas de nivel, en el plano  $YZ$ , del potencial inducido por un protón con velocidad  $v$  en la dirección  $Z$ . Hemos considerado tres casos diferentes: la columna de la izquierda de la figura 4.5 corresponde a un protón aislado, la columna central a un protón que pertenece a una molécula de  $H_3^+$  en su configuración perpendicular, y la tercera columna de la figura se corresponde al protón delantero de la molécula de  $H_3^+$  en la configuración paralela. Las figuras 4.5a-c muestran estos resultados para velocidades de 1 a.u., 2 a.u. y 10 a.u., respectivamente. El gradiente del potencial inducido que mostramos en esta figura nos proporciona información acerca de la fuerza de interferencia que sufre un protón que acompaña al que genera el potencial inducido. Como comentábamos anteriormente, podemos observar en esta figura que la longitud de onda del potencial inducido aumenta con la velocidad del proyectil. Esto significa que a bajas velocidades los efectos de interferencia sólo se van a producir a distancias cortas entre las partículas que forman la molécula.

Cuando comparamos el potencial inducido representado en las columnas central y derecha de la figura 4.5 observamos que a bajas velocidades ( $v = 1$  a.u.) los protones traseros en la configuración paralela de la molécula de  $H_3^+$  experimentan una fuerza acelerante que no está

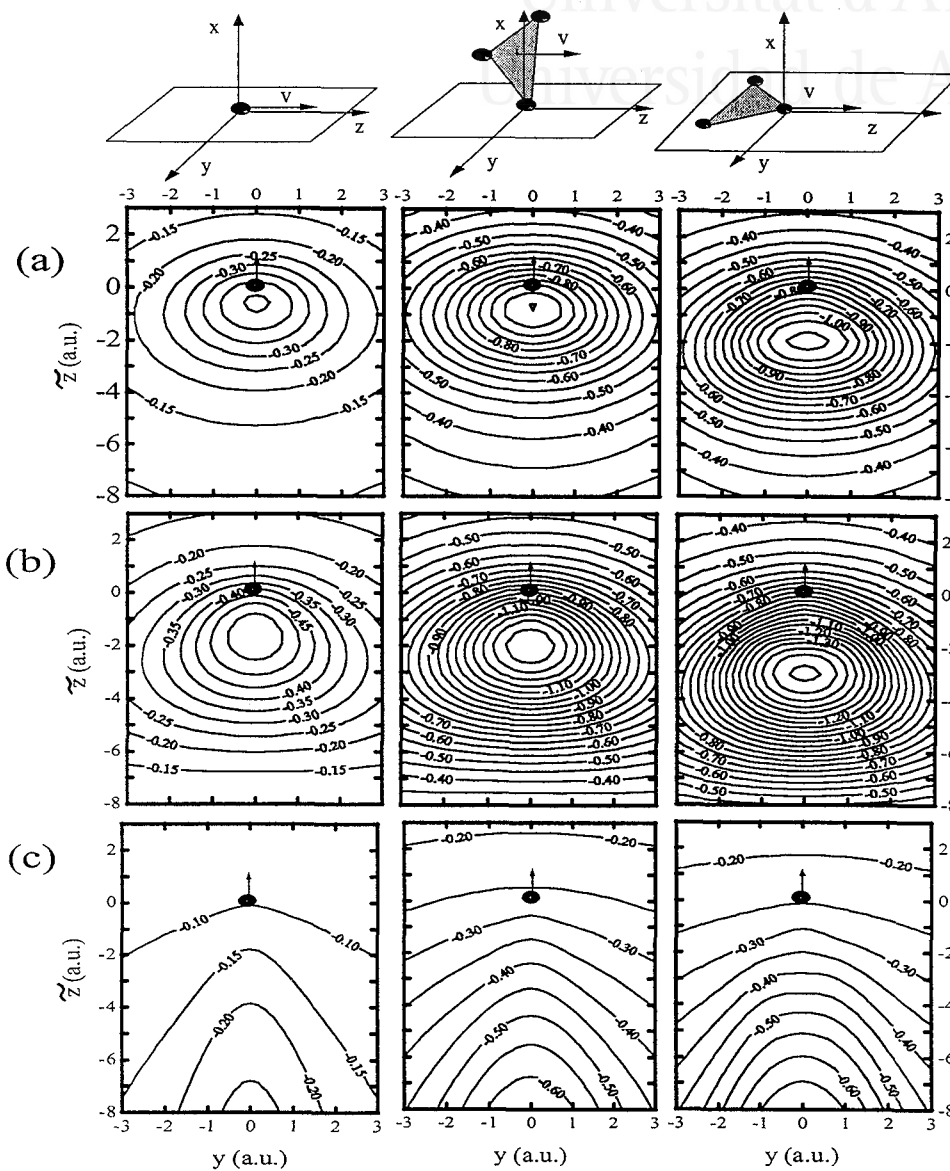


Figura 4.5: Potencial inducido en el plano  $YZ$ , alrededor de un protón en  $(x, y, \tilde{z}) = (0, 0, 0)$  que se mueve en la dirección  $Z$ . La columna izquierda corresponde al caso de un protón aislado, la columna central a un protón perteneciente a una molécula de  $H_3^+$  con su plano orientado perpendicular a su velocidad, y la columna de la derecha corresponde a un protón perteneciente a la molécula de  $H_3^+$  con su plano orientado paralelo a su velocidad. La velocidad de la molécula de  $H_3^+$  es: (a)  $v = 1$  a.u., (b)  $v = 2$  a.u. y (c)  $v = 10$  a.u.

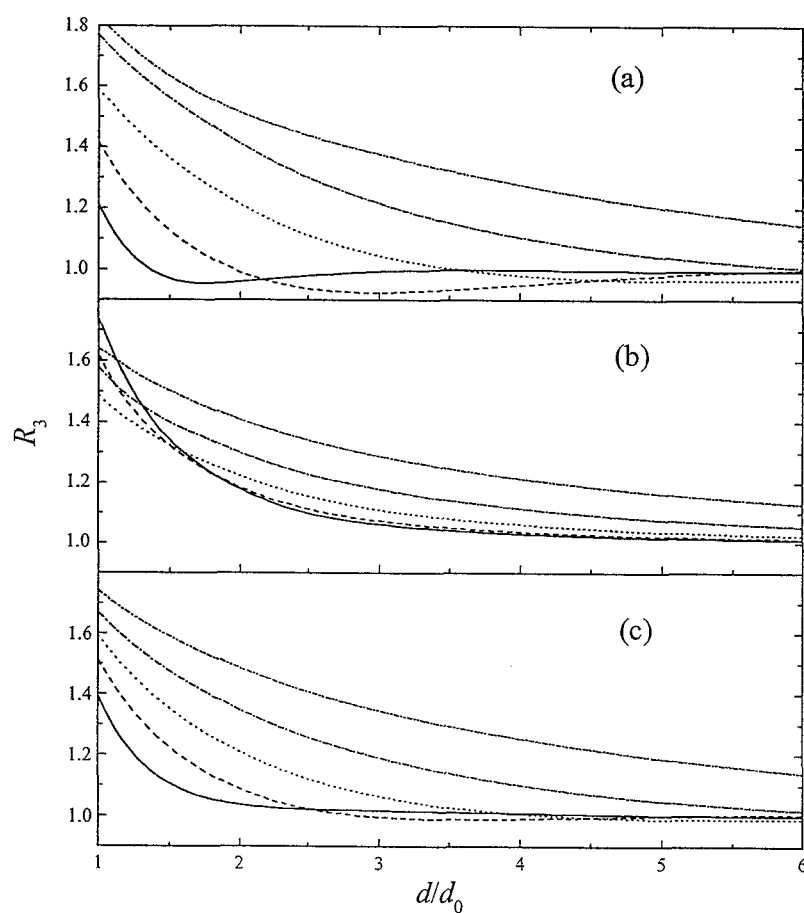


Figura 4.6:  $R_3$  en función de la distancia  $d$  entre los protones, para el caso de una molécula  $H_3^+$  que atraviesa una lámina de carbono amorfo. Las curvas corresponden a velocidades  $v = 1$  a.u. (—), 2 a.u. (— —), 3 a.u. (···), 5 a.u. (— · —) y 10 a.u. (— · · —). La configuración geométrica de la molécula es (a) paralela, (b) perpendicular y (c) aleatoria con respecto a la dirección de movimiento.



presente en el caso de una configuración perpendicular de la molécula de  $H_3^+$ , ya que en este caso los tres protones se encuentran alineados a  $\tilde{z} = 0$ . Para visualizar de una manera clara este efecto mostramos la figura 4.6, en la que hemos representado  $R_3$  en función de la distancia entre los protones para varias velocidades de la molécula:  $v = 1$  a.u., 2 a.u., 3 a.u., 5 a.u. y 10 a.u. Se muestran los casos correspondientes a orientación del plano molecular paralela, perpendicular y aleatoria con respecto a la dirección de movimiento. Tal y como apuntábamos anteriormente, los efectos de interferencia en la pérdida de energía aumentan con la velocidad de la molécula y van desapareciendo a medida que crece la distancia entre los protones. Tenemos que resaltar que, para la orientación paralela de la molécula y a velocidades bajas,  $R_3$  puede ser menor que la unidad, lo cual significa que aparecerían efectos de interferencia negativa.

Si el plano de la molécula de  $H_3^+$  está orientado paralelo a su dirección de movimiento hay al menos un protón detrás de otro, de tal manera que bajo ciertas condiciones particulares la fuerza que actúa sobre el protón de atrás puede ser una fuerza acelerante (pendiente negativa del potencial inducido). Si esta fuerza acelerante se hace mayor que las fuerzas frenantes que actúan sobre el resto de las partículas, entonces puede obtenerse un efecto de interferencia negativa y por lo tanto  $R_3 < 1$ , como se observa en la figura 4.4. Este efecto no ocurre en el caso de orientación perpendicular, y las fuerzas de interferencia son siempre frenantes (así como las fuerzas de autofrenado en todos los casos). En el caso de orientación paralela puede verse que, debido a la dependencia con la velocidad de la longitud de onda del potencial inducido, las interferencias negativas aparecen a mayores distancias internucleares según aumenta la velocidad.

Para conocer la influencia de las diferentes orientaciones paralelas (no sólo del caso simétrico discutido previamente) en el frenado de la molécula de  $H_3^+$ , hemos representado en la figura 4.7 el valor de  $R_3$  para tres orientaciones paralelas no equivalentes (con diferentes ángulos internos de orientación) y dos velocidades ( $v = 2$  a.u. y 5 a.u.). Puede verse que para la velocidad más baja,  $v = 2$  a.u.,  $R_3$  es prácticamente el mismo, independiente de la orientación, en un amplio rango de separaciones internucleares y especialmente para pequeños valores de  $d$ . Sin embargo aparecen diferencias apreciables entre las diferentes con-

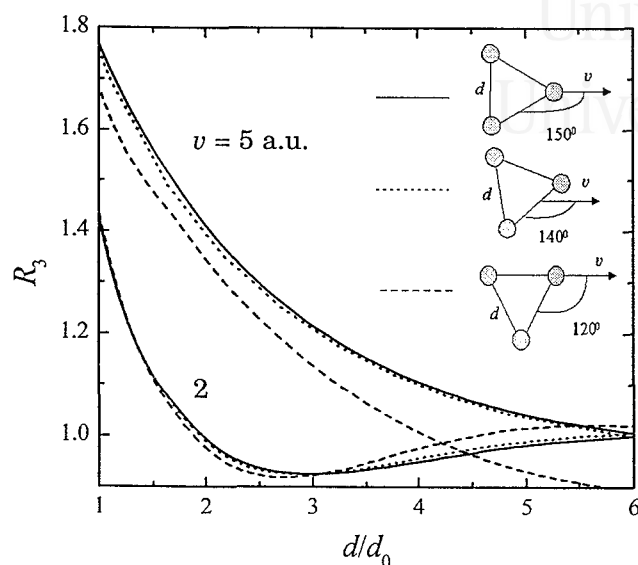


Figura 4.7:  $R_3$  en función de la distancia internuclear  $d$  para tres orientaciones paralelas diferentes y dos velocidades ( $v = 2$  a.u. y  $5$  a.u.)

figuraciones paralelas a velocidades altas ( $v = 5$  a.u.). En ambos casos, las diferencias en el frenado de la molécula debidas a las orientaciones paralelas no equivalentes aumentan conforme crece la distancia internuclear; estas diferencias también se pueden explicar en términos del potencial inducido (ver figuras 3.3 y 3.4). Cálculos realizados (y no mostrados) para moléculas con velocidades  $v < 2$  a.u. han demostrado que el valor de  $R_3$  es prácticamente insensible a las diferentes orientaciones paralelas de la molécula. Estos resultados coinciden con los de Arista y Gras-Martí [1991], donde se demuestra que en el límite de bajas velocidades, el frenado de la molécula de  $H_3^+$  es independiente del ángulo de orientación para las diferentes configuraciones paralelas. Esta propiedad es estrictamente válida en el límite de bajas velocidades ya que en este caso la función de pérdidas de energía es lineal con la energía transferida. La diferencia entre las distintas configuraciones paralelas puede entenderse por argumentos similares a los que explicaron el comportamiento de la figura anterior. Los efectos de interferencia tendrán



un máximo cuando uno de los protones está exactamente detrás del otro (caso de  $120^\circ$  en la figura 4.7) y si nos alejamos de esta condición de alineamiento se reducen fuertemente estos efectos de interferencia.

## 4.5 Pérdida de energía media

El valor final del poder de frenado normalizado que sufre un haz de moléculas de  $H_3^+$  tras atravesar una lámina de espesor  $D$ , puede obtenerse como el promedio de los valores de  $R_3$  instantáneos a lo largo de toda la trayectoria de la molécula dentro del material. Este promedio puede evaluarse a partir de la relación

$$\overline{R_3} = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt R_3(d(t)), \quad (4.11)$$

teniendo en cuenta la relación que hay entre  $d$  y  $t$  debida a la repulsión coulombiana, y que está ilustrada en la figura 4.2.  $\tau = D/v$  es el tiempo de tránsito de la molécula dentro del material. En la ecuación anterior  $R_3(d(t))$  debe de reemplazarse por las expresiones (4.8)-(4.10), que corresponden respectivamente a las orientaciones moleculares perpendicular, paralela y aleatoria con respecto a la dirección de movimiento de la molécula.

En la figura 4.8 presentamos el valor de  $\overline{R_3}$  de la molécula de  $H_3^+$  en función del espesor  $D$  de una lámina de carbono amorfo, en el caso de las configuraciones moleculares paralela, perpendicular y aleatoria antes mencionadas; hemos considerado dos velocidades  $v = 2$  a.u. y  $v = 5$  a.u. El comportamiento de  $\overline{R_3^\perp}$ ,  $\overline{R_3^\parallel}$  y  $\overline{R_3^{\text{ran}}}$  con el espesor del blanco es bastante similar para las tres orientaciones, decreciendo a medida que  $D$  aumenta. Para ambas velocidades el frenado final que sufre la molécula de  $H_3^+$  para la orientación aleatoria está comprendido entre los valores de los casos paralelo y perpendicular. Sin embargo, para velocidades bajas ( $v = 2$  a.u.) obtenemos que el poder de frenado normalizado correspondiente a la configuración perpendicular es mayor que el correspondiente a la configuración paralela,  $\overline{R_3^\perp} > \overline{R_3^\parallel}$ , mientras que se obtiene el resultado contrario para velocidades altas ( $v = 5$  a.u.). Estos resultados se pueden interpretar de forma satisfactoria en función del potencial inducido por el protón en el medio tal y

como comentábamos anteriormente con referencia al poder de frenado instantáneo.

Para evaluar los efectos del apantallamiento dinámico sobre los resultados del frenado final, en la figura 4.8 presentamos los datos obtenidos al utilizar un potencial coulombiano puro (línea de puntos fina) con  $a = \infty$  en la ecuación (3.3), junto con los datos obtenidos para un potencial coulombiano apantallado (línea gruesa). Podemos observar que las diferencias son mínimas, aunque tienden a crecer al disminuir la velocidad del proyectil, como cabe esperar a partir de un análisis de la figura 4.2. También hemos incorporado en la figura 4.8 los resultados experimentales de Ray *et al.* [1992] correspondientes al frenado de una molécula de  $H_3^+$  con orientación inicial aleatoria tras atravesar una lámina delgada de carbono amorfo, como se puede observar el acuerdo entre los resultados teóricos y los datos experimentales es francamente bueno. Como la densidad del carbono amorfo no fue indicada en estos experimentos, hemos incluido una barra horizontal para abarcar los posibles valores de densidad del blanco desde 1.7 a 2  $g/cm^3$ .

En la figura 4.9 se presenta la dependencia del poder de frenado normalizado con la velocidad del proyectil, para distintos espesores de las láminas de carbono amorfo y para las tres configuraciones de la molécula que hemos analizado hasta el momento: paralela, perpendicular y aleatoria. Las curvas corresponden a nuestras predicciones teóricas mientras que los símbolos cerrados corresponden a datos experimentales [Ray *et al.* 1992] y los símbolos abiertos a simulaciones [Ray *et al.* 1992]. Los resultados experimentales para las láminas de 6 y 10.5  $\mu g/cm^2$  de espesor concuerdan de modo satisfactorio (dentro de los posibles errores experimentales) con nuestros cálculos teóricos correspondientes a un haz formado por moléculas  $H_3^+$  que están orientadas de forma aleatoria. Sin embargo, para la lámina más fina (espesor de 3  $\mu g/cm^2$ ) los resultados experimentales están más próximos a los cálculos teóricos correspondientes a la orientación paralela. Como vemos, las principales discrepancias entre nuestras predicciones y los datos experimentales tienen lugar nuevamente (*cf.* figuras 3.26 y 3.27) para las láminas más delgadas. Esto puede deberse a la dificultad experimental para obtener láminas homogéneas, así como para caracterizar su espesor, por ello las fluctuaciones en el espesor afectarán en mayor



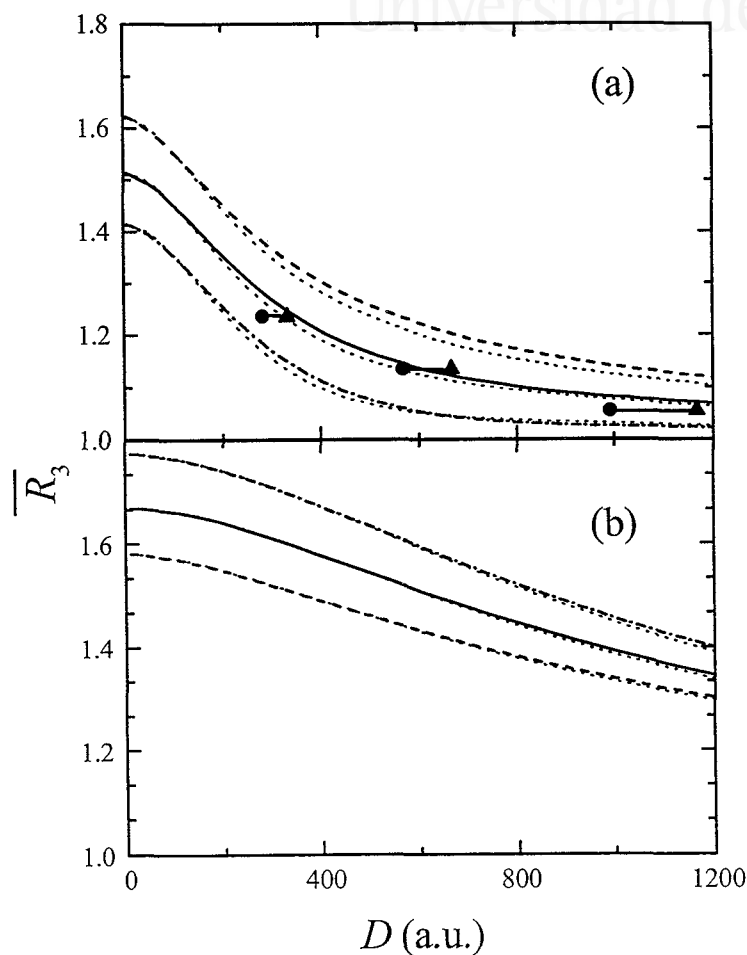


Figura 4.8:  $\overline{R}_3$  en función del espesor  $D$  de una lámina de carbono amorfo para tres orientaciones moleculares: perpendicular(---), paralelo(- · -) y aleatorio(—). También se han representado los casos sin apantallamiento en la explosión coulombiana (···). La velocidad de la molécula de  $H_3^+$  es: (a)  $v = 2$  a.u. o (b)  $v = 5$  a.u. Los puntos corresponden a resultados experimentales [Ray *et al.* 1992] si consideramos una densidad  $\rho = 2$  g/cm<sup>3</sup> (●) y si tomamos  $\rho = 1.7$  g/cm<sup>3</sup> (▲) unidos por una barra horizontal.

medida a los resultados obtenidos con las láminas más finas.

En la mayoría de los casos, los datos experimentales del poder de frenado normalizado están comprendidos entre nuestros cálculos correspondientes a moléculas con orientación aleatoria y paralela. Esto es comprensible porque, a pesar de la orientación aleatoria de las moléculas en el haz incidente, dentro del material éstas tienden a alinearse paralelas a la dirección del movimiento, debido a la componente transversal de la fuerza retardante (*cf.* sección 3.3) que experimentan los protones posteriores de la molécula. También hemos de notar que para los tres espesores analizados, a bajas velocidades se obtiene que  $\overline{R_3^\perp} > \overline{R_3^{\text{ran}}} > \overline{R_3^\parallel}$ , mientras que a altas velocidades se obtiene que  $\overline{R_3^\parallel} > \overline{R_3^{\text{ran}}} > \overline{R_3^\perp}$ , lo cual se explica a partir del razonamiento expuesto en el apartado anterior con respecto al poder de frenado normalizado instantáneo  $R_3(d)$ .

Un análisis detenido de la figura 4.9 nos muestra que hay una velocidad ( $v \simeq 3$  a.u.) para la cual  $\overline{R_3}$  es prácticamente independiente de la orientación molecular. También observamos que las mayores diferencias entre los valores de  $\overline{R_3}$  para las diferentes orientaciones aparecen en el caso de las láminas más delgadas y velocidades bajas.

En la figura 4.10 hemos agrupado los resultados teóricos y experimentales de  $\overline{R_3^{\text{ran}}}$ , en función de la energía del haz, para tres espesores de una lámina de carbono amorfo: 3, 6 y 10.5  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ . Los resultados obtenidos considerando que la densidad del carbono amorfo vale 1.7  $\text{g}/\text{cm}^3$  aparecen en línea punteada, mientras que los resultados obtenidos si consideramos que dicha densidad vale 2  $\text{g}/\text{cm}^3$  aparecen en línea continua. El comportamiento de  $\overline{R_3^{\text{ran}}}$  para los diferentes espesores es básicamente el mismo, dando valores mayores que la unidad que aumentan con la energía del proyectil y decrecen para mayores espesores del blanco. Vemos, en definitiva, que la comparación entre los datos experimentales y los cálculos teóricos es satisfactoria.

En la figura 4.11 observamos básicamente los mismos datos que en la figura 4.10, pero expresados en función del espesor de la lámina  $D$ , para cuatro valores de la energía de la molécula (60, 80, 100 y 120 keV/amu). Aparte de los datos de Ray *et al.* [1992] anteriormente descritos, en esta figura hemos incluido un resultado correspondiente a una simulación de Monte Carlo realizada por Farizon *et al.* [1992], que corresponde a un espesor no contemplado en las gráficas anteriores.

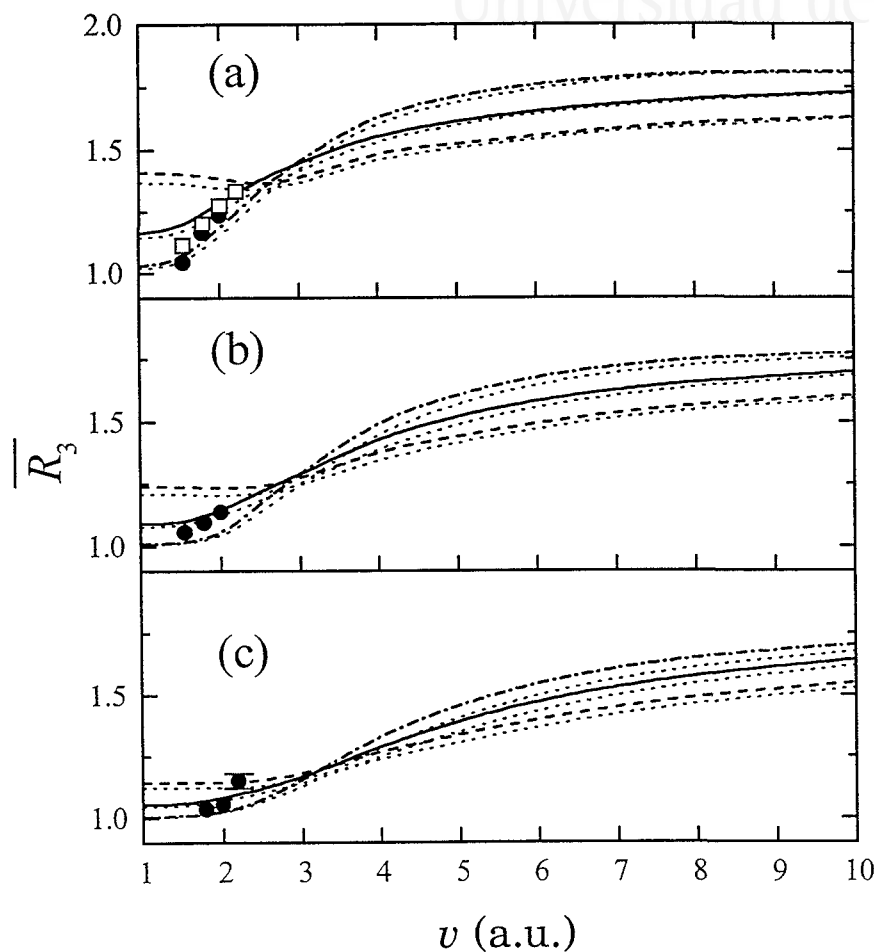


Figura 4.9: Dependencia de  $\overline{R}_3$  con la velocidad de una molécula de  $H_3^+$  que atraviesa láminas de carbono amorfo de diversos espesores: (a)  $D = 3 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ , (b)  $D = 6 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  y (c)  $D = 10.5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ . Las líneas representan nuestros cálculos para tres orientaciones de la molécula: paralela ( $- \cdot -$ ), aleatoria ( $-$ ) y perpendicular ( $- -$ ). Hemos representado los resultados experimentales de Ray *et al.* [1992] ( $\bullet$ ) y una simulación de Ray *et al.* [1992] ( $\square$ ). Las líneas gruesas (finas) corresponden a una densidad del carbono amorfo de  $2 \text{ g}/\text{cm}^3$  ( $1.7 \text{ g}/\text{cm}^3$ ).

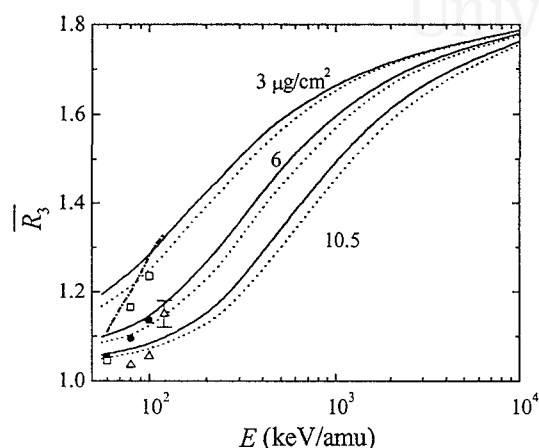


Figura 4.10:  $\overline{R}_3$  en función de la energía del haz de  $H_3^+$  que incide sobre un blanco de carbono amorfo con orientación aleatoria. Hemos considerado tres espesores del blanco:  $D = 3 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ ,  $6 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  y  $10.5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ , y dos densidades del carbono amorfo:  $2 \text{g}/\text{cm}^3$  (—) o  $1.7 \text{g}/\text{cm}^3$  (···). Los símbolos representan datos experimentales de Ray *et al.* [1992]:  $3 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  ( $\square$ ),  $6 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  ( $\bullet$ ) y  $10.5 \mu\text{g}/\text{cm}^2$  ( $\triangle$ ), mientras que la línea (— · —) corresponde a una estimación teórica de Ray *et al.* [1992] para  $3 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ .

Finalizamos este capítulo concluyendo que el tratamiento analítico que hemos presentado, basado en el formalismo dieléctrico y la inclusión de la dinámica de la explosión molecular, es adecuado para calcular el valor medio del poder de frenado de la molécula  $H_3^+$  tras atravesar láminas delgadas, pues nuestras predicciones concuerdan satisfactoriamente bien con los datos experimentales. También cabe destacar que las principales discrepancias se observan para las láminas más delgadas, independientemente de la velocidad de la molécula, lo cual puede deberse a las dificultades experimentales para caracterizar adecuadamente láminas muy delgadas. Lo anteriormente dicho es análogo a lo que se



observa para la molécula  $H_2^+$ , tal como se discutió al final del capítulo 3.

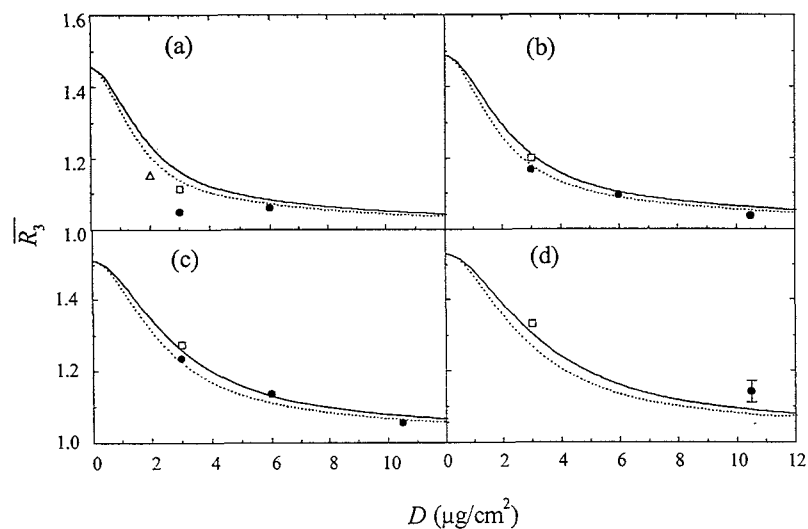


Figura 4.11: Valor de  $\overline{R_3}$  para un haz de moléculas  $H_3^+$  que incide con orientación aleatoria sobre una lámina de carbono amorfo, representado en función de su espesor  $D$ . Los resultados corresponden a cuatro diferentes energías del haz: (a)  $E = 60$  keV/amu, (b)  $E = 80$  keV/amu, (c)  $E = 100$  keV/amu y (d)  $E = 120$  keV/amu. La densidad del carbono amorfo es de  $2$  g/cm<sup>3</sup> (—) o  $1.7$  g/cm<sup>3</sup> (···). Los símbolos corresponden a datos experimentales de Ray *et al.* [1992] (●), cálculos de Ray *et al.* [1992] (□) y una simulación Monte Carlo de Farizon *et al.* [1992] (Δ).



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

## Conclusiones

En este trabajo hemos analizado varios aspectos relacionados con el paso de moléculas de  $H_n^+$  ( $n = 1, 2, 3$ ) a través de diversos materiales, tales como aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre, con propiedades dieléctricas muy diferentes.

Primeramente se describió en el capítulo 1 un método para modelar la respuesta electrónica de los materiales. En este método se construye la función de pérdida de energía (ELF) para cualquier valor de la energía  $\omega$  y del momento  $k$  de las excitaciones, ajustando la ELF experimental a  $k = 0$  por medio de una combinación lineal de ELF tipo Mermin. Usando esta función de respuesta, a través del formalismo dieléctrico hemos calculado el poder de frenado y el straggling electrónico de diversos materiales para protones. El acuerdo con los experimentos es muy satisfactorio para el caso del poder de frenado y razonablemente satisfactorio para el straggling.

En el segundo capítulo hemos propuesto un modelo más realista para describir el paso de protones por medios materiales. Hemos desarrollado un programa que calcula la trayectoria que siguen los protones en el medio frenante. Para ello usamos un código de simulación para tener en cuenta la fuerza de autofrenado del protón (que varía con el tiempo de acuerdo a su velocidad instantánea) así como las fluctuaciones en el frenado (cuantificadas por el straggling electrónico). También hemos incluido en nuestro programa el efecto de las colisiones nucleares mediante un código de Monte Carlo, donde se sorteán las distancias entre colisiones nucleares sucesivas y los ángulos de scattering en cada colisión.

Con este programa hemos calculado las distribuciones de pérdida



de energía que poseen los protones tras atravesar láminas de diferentes materiales (aluminio, silicio, carbono amorfo y cobre) para el caso de distintas energías de incidencia y espesores de las láminas. Dada la versatilidad de nuestro programa hemos discutido la relevancia de incluir o no las colisiones nucleares o de usar una fuerza de autofrenado que se actualice con la velocidad instantánea y hemos encontrado que la pérdida de energía del proyectil sí resulta afectada cuando la velocidad de los protones es pequeña y el espesor de la lámina grande. La comparación entre nuestros cálculos para la distribución y el valor medio de la pérdida de energía y los correspondientes resultados experimentales muestra un acuerdo satisfactorio para una gran variedad de materiales y un amplio rango de velocidades.

También hemos analizado las distribuciones angulares que poseen los protones al salir de las láminas. Hemos encontrado que la dispersión angular que poseen estas distribuciones es mayor a medida que aumenta el espesor. La dispersión angular se debe exclusivamente a las colisiones nucleares, por lo tanto, si aumenta el espesor de la lámina, es más probable que haya colisiones nucleares de mayor ángulo. Por otra parte, también se aprecia que la dispersión angular es menor a mayores velocidades de los protones. Comparando la dispersión angular entre los cuatro materiales analizados, podemos concluir que mientras mayor sea el número atómico del material, mayor será la dispersión angular que experimentarán los protones.

En el capítulo 3 hemos estudiado la evolución de los protones en que se fragmenta una molécula de  $H_2^+$  al viajar por láminas de carbono amorfo y aluminio. Para analizar este caso, al programa desarrollado en el capítulo 2 le hemos añadido la posibilidad de seguir la evolución de cada uno de los protones, así como los efectos de repulsión coulombiana y de interferencia que aparecen en este sistema.

Con este nuevo programa hemos estudiado las distribuciones energéticas de los protones componentes de la molécula de  $H_2^+$ . Encontramos que a medida que aumenta el espesor los protones se comportan de manera no correlacionada, puesto que gran parte del viaje por el interior del material se encuentran separados entre sí. También observamos que a altas velocidades la distribución energética tiene dos picos, mien-



tras que a bajas velocidades consta de un solo pico. Este hecho se debe a que a altas velocidades la explosión coulombiana es más importante y, por lo tanto, el protón delantero de la molécula resulta acelerado por esta fuerza y el posterior decelerado. La comparación con los experimentos, tanto de las distribuciones energéticas como de los valores medios, resulta satisfactoria.

El análisis de la distribución angular que tienen los fragmentos de la molécula  $H_2^+$  a la salida de la lámina, no difiere del realizado en el caso de protones individuales dado que las colisiones nucleares que experimentan cada uno de los protones (responsables de la dispersión angular) fueron incluidas de manera no correlacionada.

El estudio de las distribuciones conjuntas en energía y ángulos, separando las contribuciones de las colisiones nucleares, explosión coulombiana e interacción electrónica, nos ha permitido discriminar el efecto de cada uno de estos procesos por separado. De esta manera podemos concluir que las colisiones nucleares son las responsables de la desviación angular de los fragmentos de la molécula; la explosión coulombiana es la responsable de que las distribuciones energéticas tengan dos picos a altas velocidades (aunque no contribuye al valor medio de la pérdida de energía) y las interacciones electrónicas (fuerza de autofrenado y efectos de interferencia) son las responsables de la energía media perdida por la molécula.

El estudio de la separación entre los protones de la molécula de  $H_2^+$  nos indica que este proceso está dominado por la explosión coulombiana. Por lo tanto, a mayores espesores de la lámina mayor es la distancia de separación entre los protones. Si comparamos el caso de dos velocidades distintas, pero el mismo tiempo de tránsito dentro de la lámina, se observa que cuanto mayor es la velocidad más grande será la separación internuclear, debido a que en este caso la fuerza de repulsión coulombiana está menos apantallada.

Para demostrar la versatilidad de nuestro programa hemos estudiado la detección y la pérdida de energía de pares de protones cuyo eje internuclear es paralelo a la dirección de movimiento. Nuestro cálculo de la fracción de pares de protones alineados muestra un excelente acuerdo con los experimentos. También se observa un acuerdo razonable entre los experimentos y nuestros cálculos correspondientes al valor medio de la energía perdida por los pares alineados.





En el último capítulo hemos analizado el valor medio del poder de frenado de los protones que constituyen la molécula de  $H_3^+$  tras atravesar láminas de carbono amorfo. Para esto hemos usado un modelo analítico donde el frenado se debe a las interacciones electrónicas con el medio frenante y entre los protones, la cual depende de la separación  $d$  entre los protones (que está determinada por la repulsión coulombiana). El modelo analítico que hemos empleado para calcular el poder de frenado de agragados está basado en el formalismo dieléctrico.

Usando este modelo analítico hemos estudiado el valor medio del poder de frenado de la molécula de  $H_3^+$ , analizado su dependencia con la orientación del plano de la molécula. Hemos encontrado que a velocidades bajas el poder de frenado de la molécula es mayor cuando el plano molecular es perpendicular a la velocidad, en comparación a cuando es paralelo. A altas velocidades se encuentra el comportamiento contrario.

Si se analiza el poder de frenado en función de la distancia entre los protones para cada instante, se encuentra que para velocidades pequeñas y determinadas distancias hay interferencia negativa (es decir, el poder de frenado de la molécula es menor que el de tres protones individuales). Sin embargo, al calcular el valor medio del poder de frenado cuando la molécula atraviesa un dado espesor, este efecto de interferencia negativa desaparece. Todos estos fenómenos pueden explicarse mediante un análisis detallado del potencial inducido por cada protón en el medio. Se observa un buen acuerdo entre nuestros cálculos para el poder de frenado y los resultados experimentales.

En conclusión el programa que hemos desarrollado nos ha permitido hacer un estudio detallado de la pérdida de energía de haces formados por moléculas de  $H_n^+$  ( $n = 1, 2, 3$ ) y pretendemos seguir ampliándolo para considerar el caso de moléculas heteronucleares ( $HeH^+$ ), clusters ( $Si_n$ ,  $C_{60}$ ), etc. También pensamos que es posible incorporar procesos de captura y pérdida de electrones por parte de los proyectiles mientras viajan a través del material. Y, por supuesto, abordaríamos estos estudios en diferentes materiales.



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

## Apéndice A

### Unidades atómicas

El sistema de unidades atómicas (a.u.) se introduce por conveniencia para simplificar la escritura de muchas expresiones en las cuales aparecen con frecuencia diversas combinaciones de las mismas constantes, las cuales son:

- masa del electrón,  $m$
- valor absoluto de la carga del electrón,  $e$
- constante de Planck reducida,  $\hbar = h/(2\pi)$ .

Por ello se toman estas magnitudes como las fundamentales en este sistema, de modo que en él se verifica que:

$$m = e = \hbar = 1 \quad (\text{A.1})$$

lo cual simplifica notablemente la escritura de las expresiones y agiliza enormemente todos los cálculos.

En la siguiente tabla se presenta, en la primera columna, la definición de las unidades atómicas de algunas magnitudes que se emplean con frecuencia. En la segunda columna aparece su expresión en términos de las constantes  $m$ ,  $e$  y  $\hbar$ ; en algunos casos también se dan sus valores numéricos en otros sistemas de unidades en los cuales también suelen expresarse habitualmente. Por último, en la tercera columna, se da el correspondiente valor en el Sistema Internacional.



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

Tabla A.1: Definición de las unidades atómicas de algunas magnitudes que se emplean con frecuencia.

1 a.u. de masa (masa del electrón)	$m$	$9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
1 a.u. de carga (carga del electrón)	$e$	$1.60 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
1 a.u. de energía (2 veces la energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno)	hartree = $me^4/\hbar^2$ = 27.21 eV	$4.36 \cdot 10^{-18} \text{ J}$
1 a.u. de distancia (radio de la primera órbita de Bohr del átomo de hidrógeno)	$a_0 = \hbar^2/me^2$ = 0.529 Å	$5.29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
1 a.u. de velocidad (velocidad de la luz en el vacío, $c$ , multiplicada por constante de estructura fina, $\alpha = 1/137.077$ )	$e^2/\hbar = c/137.077$	$2.19 \cdot 10^6 \text{ m/s}$
1 a.u. de tiempo ( $2\pi$ veces el período del electrón en el estado fundamental del átomo de hidrógeno)	$\hbar^3/me^4$	$2.24 \cdot 10^{-17} \text{ s}$



Es habitual en Física tener que manejar velocidades y energías cinéticas, estando, estas últimas, expresadas en electronvoltios o alguno de sus múltiplos. Por ello, a continuación se relacionan dichas magnitudes involucrando unidades atómicas.

Dado un ion de número másico  $M$ , cuya velocidad es  $v$  (expresada en unidades atómicas), su energía cinética (expresada en keV) está dada por:

$$E(\text{keV}) = 25 M v^2(\text{a.u.}) \quad (\text{A.2})$$

Esta relación se deriva de la expresión bien conocida,  $E = m v^2/2$ , y teniendo en cuenta que la masa del ion, en unidades atómicas, está dada por  $1823M$ . Análogamente, para el caso de un electrón, tendríamos:

$$E(\text{eV}) = 13.6 v^2(\text{a.u.}) \quad (\text{A.3})$$



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

## Apéndice B

### Unidades del espesor

Es habitual encontrar que en los trabajos experimentales se exprese el espesor  $D$  de una lámina en unidades de  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ . Esto se debe a que el procedimiento usual para caracterizar las láminas, consiste en pesarlas y, conociendo la superficie de éstas, es posible calcular la masa por unidad de área.

Para obtener el espesor  $D$  en unidades de longitud [ $\text{Å}$  o a.u.] es necesario usar la siguiente relación:

$$D (\text{Å}) = \frac{D [\mu\text{g}/\text{cm}^2]}{\rho [\text{g}/\text{cm}^3]} 10^2 \quad (\text{B.1})$$

$$D (\text{a.u.}) = \frac{D [\mu\text{g}/\text{cm}^2]}{\rho [\text{g}/\text{cm}^3]} \frac{10^2}{0.529} \quad (\text{B.2})$$

donde  $\rho$  es la densidad del material en unidades de  $\text{g}/\text{cm}^3$ .

Conviene notar que para algunos materiales la densidad es un valor bien conocido, pero hay otros materiales, como el carbono amorfo, donde la densidad del material no está bien definida, sino que depende del método de fabricación y varía desde  $\rho = 1.7 \text{ g}/\text{cm}^3$  hasta  $2 \text{ g}/\text{cm}^3$ .



Universitat d'Alacant  
Universidad de Alicante

## Referencias

- ABRAMOWITZ M. E I. STEGUN 1972, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York).
- ABRIL I., M. VICANEK, A. GRAS-MARTÍ Y N. R. ARISTA 1992, *Nucl. Instr. Meth. B* **67**, 56.
- ABRIL I., R. GARCIA-MOLINA Y N. R. ARISTA 1994, *Nucl. Instr. Meth. B* **90**, 72.
- ABRIL I., R. GARCIA-MOLINA, C. D. DENTON, F. J. PÉREZ-PÉREZ Y N. R. ARISTA 1997, *Phys. Rev. A*, aceptado.
- ALLEN M. P. Y D. J. TILDESLEY 1987, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford University Press, Oxford).
- ANDERSEN H. H., J. F. BAK, H. KNUDSEN Y B. R. NIELSEN 1977, *Phys. Rev. A* **16**, 1929.
- ANDERSEN H. H. Y J. F. ZIEGLER 1977, *Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements* (Pergamon, New York).
- ANDERSEN L. H., P. HVELPLUND, H. KNUDSEN, S. P. MOLLER, J. O. P. PEDERSEN, E. UGGERHOJ, K. ELSENER Y E. MORENZONI 1989, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1731.
- ARISTA N. R. Y V. H. PONCE 1975, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **8**, L188.
- ARISTA N. R. 1978, *Phys. Rev. B* **18**, 1.
- ARISTA N. R. Y A. R. PIRIZ 1987, *Phys. Rev. A* **35**, 3450.
- ARISTA N. R. Y A. GRAS-MARTÍ 1991, *J. Phys.: Cond. Matter* **3**, 7931.

- ARISTA N. R. Y E. M. BRINGA 1997, *Phys. Rev. A* **55**, 2873.
- ARKHIPOV E. P. Y YU. V. GOTT 1969, *Sov. Phys. JETP* **29**, 615.
- ARNAU A., P. M. ECHENIQUE Y R. H. RITCHIE 1989, *Nucl. Instr. Meth. B* **40/41**, 329.
- ASHLEY J. C., J. J. COWAN, R. H. RITCHIE, V. E. ANDERSEN Y J. HOELZL 1979, *Thin Solid Films* **60**, 361.
- ASHLEY J. C. 1980, *Nucl. Instr. Meth.* **170**, 197.
- ASHLEY J. C. Y P. M. ECHENIQUE 1987, *Phys. Rev. B* **35**, 8701.
- BALASHOV V. V. 1997, *Interaction of Particles and Radiation with Matter* (Springer, Berlin).
- BASBAS G. Y R. H. RITCHIE 1982, *Phys. Rev. A* **25**, 1943.
- BATSON P. E. Y J. SILCOX 1983, *Phys. Rev. B* **27**, 5224.
- BÄTZNER H. 1936, *Ann. Phys. (Leipzig)* **25**, 233.
- BAUDIN K., A. BRUNELLE, M. CHABET, S. DELLA-NEGRA, J. DEPANNO, D. GARDS, P. HÅKANSSON, Y. LE BEYEC, A. BILLEBAND, M. FALLAVIER, J. REMILLIEUX, J. C. POIZAT Y J. P. THOMAS 1994, *Nucl. Instr. Meth. B* **94**, 341.
- BAUER P., F. AUMAYR, D. SEMRAD Y B. M. U. SCHERZER 1984, *Nucl. Instr. Meth. B* **1**, 1.
- BETHE H. A. 1930, *Ann. Phys. (Leipzig)* **5**, 325.
- BEUHLER R. J., G. FRIEDLANDER Y L. FRIEDMAN 1989, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1292.
- BIERSACK J. Y L. HAGGMARK 1980, *Nucl. Instr. Meth.* **174**, 257.
- BLOCH F. 1933, *Ann. Phys. (Leipzig)* **16**, 287.
- BOHR N. 1913, *Phil. Mag.* **25**, 10.
- BOHR N. 1948, *K. Dans. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.* **18**, No. 8.
- BONDERUP E. 1981, *Penetration of Charged Particles through Matter*, 2nd ed. (University of Aarhus, Aarhus).
- BRANDT W. Y J. REINHEIMER 1970, *Phys. Rev. B* **2**, 3104.

- BRANDT W., A. RATKOWSKI Y R. H. RITCHIE 1974, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 1325.
- BRANDT W. 1975, p.261 en *Atomic Collisions in Solids. Vol. 1* (S. Datz, B. R. Appleton y C. D. Moak, Eds.) (Plenum, New York).
- BRANDT W. Y R. H. RITCHIE 1976, *Nucl. Instr. Meth.* **132**, 43.
- BRET A. 1994, *Nucl. Instr. Meth. B* **88**, 107.
- BRINGA E. M. Y N. R. ARISTA 1995, *Phys. Rev. E* **52**, 3010.
- BRONGERSMA H. H. Y R. A. VAN SANTEN (EDS.) 1991, *Fundamental Aspects of Heterogeneous Catalysis Studied by Particle Beams, NATO ASI Series B: Physics. Vol. 265* (Plenum, New York).
- BURENKOV A. F. Y F. F. KOMAROV 1978, p.62 en *Proceedings of the 9th All-Union Conference on the Physics of Charged-Particle Interactions with Single Crystals* (Moscow State University Publishers, Moscow).
- CARNEY G. D. 1980, *Molec. Phys.* **39**, 923.
- CAZAUX J. Y P. GRAMARI 1977, *J. Physique* **38**, L133.
- CEMBALI F. Y F. ZIGNANI 1977, *Radiat. Eff.* **31**, 169.
- CHU W. K. 1976, *Phys. Rev. A* **13**, 2057.
- CUE N, V. CASTRO-FARIA, M. J. GAILLARD, J. C. POIZAT, J. REMILLIEUX, D. S. GEMMELL Y I. PLESSER 1980, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 613.
- DENTON C. D., F. J. PÉREZ PÉREZ, R. GARCIA-MOLINA, I. ABRIL Y N. R. ARISTA 1997A, *Europhys. Lett.* **35**, 499.
- DENTON C. D., I. ABRIL, F. J. PÉREZ PÉREZ, R. GARCIA-MOLINA Y N. R. ARISTA 1997B, *Rad. Eff. Def. Sol.* **142**, 223.
- DENTON C. D., R. GARCIA-MOLINA, I. ABRIL Y N. R. ARISTA 1998A, *Nucl. Instr. Meth. B*, aceptado.
- DENTON C. D., R. GARCIA-MOLINA, I. ABRIL Y N. R. ARISTA 1998B, *Nucl. Instr. Meth. B*, aceptado.
- DEUTSCH C., G. MAINARD Y H. MINOO 1983, *J. Physique C* **8**, 67.



- DEUTSCH C. Y N. A. TAHIR 1992, *Phys. Fluids B* **4**, 3735.
- DEUTSCH C. Y N. A. TAHIR 1993, *Nuovo Cimento* **106**, 1811.
- ECHENIQUE P. M., F. FLORES Y R. H. RITCHIE 1990, *Sol. State Phys.* **43**, 229.
- ECKARDT J. C., G. LANTSCHNER, N. R. ARISTA Y R. A. BARAGIOLA 1978, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **11**, L851.
- ESCOVITZ W. H., T. R. FOX Y R. LEVI-SETTI 1979, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-26**, 1395.
- FALLAVIER M., J. KEMMLER, R. KIRSCH, J. C. POIZAT, J. REMILLIEUX Y J. P. THOMAS 1990, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 621.
- FARIZON M., N. DE CASTRO FARIA, B. FARIZON-MAZUY Y M. GAILLARD 1992, *Phys. Rev. A* **45**, 179.
- FERMI E. 1940, *Phys. Rev.* **57**, 485.
- FRITZ M., K. KIMURA, Y. SUSUKI Y M. MANNAMI 1994, *Phys. Rev. A* **50**, 2405.
- FRITZ M., Y. SUSUKI, K. KIMURA, M. MANNAMI, I. ABRIL Y R. GARCIA-MOLINA 1997, *Nucl. Instr. Meth. B*, a publicarse.
- GAILLARD M. J., D. S. GEMMELL, G. GOLDRING, I. LEVINE, W. PIETSCH, J. C. POIZAT, A. J. RATKOWSKI, J. REMILLIEUX, Z. VAGER Y B. ZABRANSKY 1978, *Phys. Rev. A* **17**, 3473.
- GEMMELL D. S. 1981, *Nucl. Instr. Meth.* **191**, 425.
- GEMMELL D. S., A. FAIBIS, E. P. KANTER, Z. VAGER Y B. J. ZABRANSKY 1989, *Vacuum* **39**, 355.
- GOLDSTEIN H. 1953, *Mecánica Clásica* (Addison Wesley, New York).
- GOLSER R., CH. EPPACHER Y D. SEMRAD 1992, *Nucl. Instr. Meth. B* **67**, 69.
- GORODETZKY S., A. CHEVALLIER, A. PAPE, J. CL. SENS, A. M. BERGDOLT, M. BRES Y R. ARMBRUSTER 1967, *Nucl. Phys. A* **91**, 133.
- GRAS-MARTÍ A. , V. E. ANDERSON, R. H. RITCHIE Y J. C. ASHLEY 1985, *Phys. Status Solidi (b)* **132**, 509.



- GRAS-MARTÍ A., H. M. URBASSEK, N. R. ARISTA Y F. FLORES (EDS.) 1991, *Interaction of Charged Particles with Solids and Surfaces*, NATO ASI Series B: Physics. Vol. 271 (Plenum, New York).
- HAGEMANN H. J., E. GUDAT Y C. KUNZ 1974, *Optical constants from the far infrared to the X-ray region: Mg, Al, Cu, Ag, Au, Bi, C, and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>* (Deutsches Elektronen-Synchrotron Report DESY SR-74/7, Hamburg).
- HAGEMANN H. J., E. GUDAT Y C. KUNZ 1975, *J. Opt. Soc. Am.* **65**, 742.
- HENKE B. L., P. LEE, T. J. TANAKA, R. L. SHIMABUKURO Y B. K. FUJIKAWA 1982, *At. Data Nucl. Data Tab.* **27**, 1.
- HUBBARD J. 1955, *Proc. Phys. Soc. (London)* **A68**, 976.
- ICRU 1993, *Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles*, ICRU Report 49 (ICRU Publications, Bethesda).
- IKEDA A., K. SUMITOMO, T. NISHIOKA Y Y. KIDO 1996, *Nucl. Instr. Meth. B* **115**, 34.
- IZMAILOV SH. Z., E. I. SIROTININ Y A. F. TULINOV 1980, *Nucl. Instr. Meth.* **168**, 81.
- JANNI J. F. 1982, *Atom. Data Nucl. Data Tabl.* **27**, 147,341.
- JAKAS M. M. Y N. E. CAPUJ 1995A, *Phys. Rev. A* **52**, 439.
- JAKAS M. M. Y N. E. CAPUJ 1995B, *J. Phys.: Cond. Matter* **5**, 4593.
- JENSEN J., H. H. MIKKELSEN Y P. SIGMUND 1994, *Nucl. Instr. Meth. B* **88**, 191.
- JOHANSEN A., S. STEENSTRUP Y T. WOHLBERG 1971, *Radiat. Eff.* **8**, 31.
- KAHN D. 1953, *Phys. Rev.* **90**, 503.
- KALASHNIKOV N. P., V. S. REMIZOVICH Y M. I. RYAMAZOV 1985, *Collisions of Fast Charged Particles in Solids* (Gordon and Breach, New York).
- KANEKO T. 1995, *Phys. Rev. A* **51**, 535.

- KANTER E. P., P. J. COONEY, D. S. GEMMELL, Z. VAGER, W. J. PIETSCH Y R. J. ZABRANSKY 1980, *Nucl. Instr. Meth.* **170**, 87.
- KELLY R. Y M. F. DA SILVA (EDS.) 1989, *Material Modification by High-fluence Ion Beams*, NATO ASI Series E: Applied Sciences. Vol. 155 (Kluwer, Dordrecht).
- KHODYREV V. A., V. N. MIZGULIN, E. I. SIROTININ Y A. F. TULINOV 1984, *Radiat. Eff.* **83**, 21.
- KIDO Y. Y T. HIOKI 1983, *Phys. Rev. B* **27**, 2667.
- KIDO Y. 1987, *Nucl. Instr. Meth. B* **24/25**, 347.
- KIMURA K., M. MANNAMI *et al.* 1997, comunicación privada.
- KRÄTSCHMER W., L. D. LAMB, K. FOSTIROPOULOS Y D. R. HUFFMAN 1990, *Nature* **347**, 354.
- KÜHRT E., K. LENKEIT Y F. TÄUBNER 1981, *Phys. Status Solidi (a)* **66**, K131.
- KUMAKHOV M. A. Y F. F. KOMAROV 1981, *Energy Loss and Ion Ranges in Solids* (Gordon and Breach, New York).
- KUMAKHOV M. A. Y F. F. KOMAROV 1989, *Radiation from Charged Particles in Solids* (American Institute of Physics, New York).
- KWEI C. M., Y. F. CHEN, C. J. TUNG Y J. P. WANG 1993, *Surface Science* **293**, 202.
- LANDAU L. D. Y E. M. LIFSHITZ 1960, *Electrodynamics of Continuous Media* (Pergamon, Oxford).
- LAUBERT R. 1979, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-26**, 1020.
- LE BEYEC Y. (ED.) 1994, *Proc. Conf. on Polyatomic Ion Impact on Solids and Related Phenomena*, *Nucl. Instr. Meth. B* **88**, 1-ss. (Saint Malo).
- LEVI-SETTI R., K. LAM Y T. R. FOX 1982, *Nucl. Instr. Meth.* **194**, 281.
- LIDE D. R. (ED.) 1992, *Handbook of Chemistry and Physics*, 73rd ed. (CRC Press, Boca Raton).



- LINDHARD J. 1954, *K. Dans. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.* **28**, No. 8.
- LINDHARD J., M. SCHARFF Y H. E. SCHIOTT 1963, *K. Dans. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.* **33**, No. 14.
- LINDHARD J. Y A. WINTHER 1964, *K. Dans. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.* **34**, No. 4.
- LUOMAJÄRVI M. 1979, *Radiat. Eff.* **40**, 173.
- MA Z., J. LIU Y P. ZHU 1990, *Phys. Lett. A* **7**, 226.
- MARTÍNEZ-TAMAYO G., J. C. ECKARDT, G. H. LANTSCHNER Y N. R. ARISTA 1996, *Phys. Rev. A* **54**, 3131.
- MAZUG B., A. BELKACEAU, M. CHEVALLIER, M. J. GAILLAND, J. C. POIZAT Y J. REMILLIEUX 1988, *Nucl. Instr. Meth. B* **33**, 105.
- MEHLHORN T. A. 1981, *J. Appl. Phys.* **52**, 6522.
- MERMIN N. D. 1970, *Phys. Rev. B* **1**, 2362.
- MERTENS P. Y TH. KRIST 1982, *Nucl. Instr. Meth.* **194**, 57.
- MERTENS P., P. BAUER Y D. SEMRAD 1986, *Nucl. Instr. Meth. B* **15**, 91.
- MERTENS P. Y P. BAUER 1988, *Nucl. Instr. Meth. B* **33**, 133.
- MEYER L. 1971, *Phys. Status Solidi (b)* **44**, 253.
- MOLLER W., G. POSPIECH Y G. SCHRIEDER 1975, *Nucl. Instr. Meth.* **130**, 265.
- MOLLER S. P. 1990, *Nucl. Instr. Meth. B* **48**, 1.
- MORITA K., H. AKIMUNE Y T. SUITA 1968, *J. Phys. Soc. Japan* **25**, 1525.
- MOTT N. F. Y H. S. W. MASSEY 1950, *The Theory of Atomic Collisions* (Oxford University Press, Oxford).
- NARDI E., E. PELEG Y Z. ZINAMON 1978, *Phys. Fluids* **21**, 574.
- NARDI E., Z. ZINAMON Y D. BEN-HAMU 1992, *Nuovo Cim.* **106**, 1839.

- NIEMANN D., G. KONAC Y S. KALBITZER 1996, *Nucl. Instr. Meth. B* **118**, 11.
- NOMURA A. Y S. KIYONO 1976, *Jap. J. Appl. Phys.* **15**, 1773.
- NOMURA A., F. MATSUBARA Y S. KIYONO 1976, *Jap. J. Appl. Phys.* **15**, 2495.
- NOZIÈRES P. Y D. PINES 1958, *Nuovo Cimento* **9**, 470.
- OGINO K., T. KIYOSAWA Y T. KIUCHI 1988, *Nucl. Instr. Meth. B* **33**, 155.
- OHTSUKI Y. 1983, *Charged Beam Interactions with Matter* (Taylor and Francis, London).
- OLSEN J. N., T. A. MEHLHORN, J. MAENCHEN Y D. J. JOHNSON 1985, *J. Appl. Phys.* **58**, 2958.
- OPHEL T. R. Y G. W. KERR 1975, *Nucl. Instr. Meth.* **128**, 149.
- ORMROD J. H. Y H. E. DUCKWORTH 1963, *Can. J. Phys.* **41**, 1424.
- ORMROD J. H., J. R. MACDONALD Y H. E. DUCKWORTH 1965, *Can. J. Phys.* **43**, 275.
- PALIK E. D. (ED.) 1985 Y 1991, *Handbook of optical constants of solids. Vols. I y II* (Academic, Orlando).
- PENN D. 1962, *Phys. Rev.* **128**, 2093.
- PÉREZ-PÉREZ F. J., I. ABRIL, R. GARCIA-MOLINA Y N. R. ARISTA 1996, *Phys. Rev. A* **54**, 4145.
- PÉREZ-PÉREZ F. J., C. D. DENTON, I. ABRIL, R. GARCIA-MOLINA Y N. R. ARISTA 1997, *Z. Phys. D* **41**, 187.
- PINES D. Y D. BOHM 1952, *Phys. Rev.* **85**, 338.
- PINES D. 1964, *Elementary Excitations in Solids* (Benjamin, New York).
- PLANES D. J., R. GARCIA-MOLINA, I. ABRIL Y N. R. ARISTA 1996, *J. Electr. Spectrosc. Relat. Phenom.* **82**, 23.
- POIZAT J. C. Y J. REMILLIEUX 1972, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **5**, L947.



- PRESS W. H., B. P. FLANNERY, S. A. TEUKOLSKY Y W. T. VETTERLING 1986, *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, Cambridge).
- PRUTTON M. (ED.) 1984, *Electronic Properties of Surfaces* (Adam Hilger, Bristol).
- RAETHER R. 1980, *Excitations of Plasmons and Interband Transitions by Electrons. Springer Tracts Mod. Phys. Vol.88* (Springer, Berlin).
- RAPAPORT D. C. 1995, *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (Cambridge University Press, Cambridge).
- RAY E., R. KIRSCH, H. H. MIKKELSEN, J. C. POIZAT Y J. REMILLIEUX 1992, *Nucl. Instr. Meth. B* **69**, 133.
- REMILLIEUX J. 1980, *Nucl. Instr. Meth.* **170**, 31.
- RITCHIE R. H. 1959, *Phys. Rev.* **114**, 644.
- RITCHIE R. H. Y A. HOWIE 1977, *Phil. Mag.* **36**, 463.
- ROTHARD H., K. KRONEBERGER, E. VEGE, A. CLOUVAS, J. KEMMLER, P. KOSCHAR, N. NELLER, S. LENCINAS, P. LORENZEN, O. HEIL, D. HOFMANN Y K. O. GROENEVELD 1990, *Phys. Rev. B* **41**, 2521.
- ROUSSEAU C. C., W. K. CHU Y D. POWERS 1970, *Phys. Rev. A* **4**, 1066.
- RUBLOFF G. W. (ED.) 1988, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York).
- RUTHERFORD E. 1911, *Phil. Mag.* **21**, 669.
- RYSSEL H. Y H. GLAWISCHNING (EDS.) 1982, *Ion Implantation Techniques* (Springer, Berlin).
- SANTRY S. D. Y R. D. WERNER 1981, *Nucl. Instr. Meth.* **188**, 211.
- SAUTTER C. A. Y E. J. ZIMMERMAN 1965, *Phys. Rev.* **140**, A490.
- SEVIER K. D. 1972, *Low Energy Electron Spectroscopy* (Wiley-Interscience, New York).
- SHCHUCHINSKY J. Y C. PETERSON 1984, *Radiat. Eff.* **81**, 221.

- SIGMUND P. 1975, p.3 en *Radiation Damage Processes in Materials. NATO ASI Series E: Applied Sciences. Vol. 8* (C. H. S. Dupuy, Ed.) (Noordhoff, Leyden).
- SIGMUND P. 1992, *Phys. Rev. A* **46**, 2596.
- SIROTININ E. I., A. F. TULINOV, V. A. KHODYREV Y V. N. MIZGULIN 1984, *Nucl. Instr. Meth. B* **4**, 337.
- SMITH R. (ED.)1997, *Atomic and Ion Collisions in Solids and at Surfaces* (Cambridge University Press, Cambridge).
- SØRENSEN H. Y H. H. ANDERSEN 1973, *Phys. Rev. B* **8**, 1854.
- STEUER M. F., D. S. GEMMELL, E. P. KANTER, E. A. JOHNSON Y B. J. ZABRANSKY 1983, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-30**, 1069.
- STEUER M. F. 1986, *Nucl. Instr. Meth. B* **13**, 137.
- STEUER M. F. Y R. H. RITCHIE 1988, *Nucl. Instr. Meth. B* **33**, 170.
- STEUER M. F. Y R. H. RITCHIE 1989, *Nucl. Instr. Meth. B* **40/41**, 372.
- STONER J. O. 1991, *Nucl. Instr. Meth. A* **303**, 94.
- SUSUKI Y., T. ITO, K. KIMURA Y M. MANNAMI 1992, *Nucl. Instr. Meth. B* **61**, 3535.
- SUSUKI Y., K. KIMURA, M. MANNAMI, N. SAKAMOTO, H. OGAWA, I. KATAYAMA, T. NORO Y H. IKEGAMI 1994, *Phys. Rev. A* **50**, 3533.
- TAFT E. A. Y H. R. PHILIPP 1965, *Phys. Rev.* **138**, A197.
- TAHIR N. A., D. H. H. HOFFMANN, J. A. MARUHURA Y C. DEUTSCH 1994, *Nucl. Instr. Meth. B* **88**, 127.
- TAPE J. W., W. M. GIBSON, J. REMILLIEUX, R. LAUBERT Y H. E. WEGNER 1976, *Nucl. Instr. Meth.* **132**, 75.
- TENNYSON J Y S. MILLER 1994, *Contempor. Phys.* **35**, 105.
- TOMBRELLO T. A. Y J. M. CAYWOOD 1973, *Phys. Rev. B* **8**, 3065.
- TOSSATI E. Y G. P. PARRAVICINI 1971, *J. Phys. Chem. Solids* **32**, 623.



- TUNG C. J., J. C. ASHLEY Y R. H. RITCHIE 1979, *Surf. Sci.* **81**, 427.
- TURNER J. E. 1995, *Atoms, Radiation and Radiation Protection*. 2nd ed. (Wiley, New York).
- VAGER Z. Y D. S. GEMMELL 1976, *Phys. Rev. Lett.* **37**, 1352.
- VAGER Z., R. NAAMAN Y E. P. KANTER 1989, *Science* **244**, 426.
- VALDÉS J. E., J. C. ECKARDT, G. H. LANTSCHNER Y N. R. ARISTA 1994, *Phys. Rev. A* **49**, 1083.
- VALENZUELA A., W. MECKBACH, A. J. KESTELMAN Y J. C. ECKARDT 1972, *Phys. Rev. B* **6**, 95.
- VICANEK M., I. ABRIL, N. R. ARISTA Y A. GRAS-MARTÍ 1992, *Phys. Rev. A* **46**, 5745.
- VIDAL RUSSELL 1996, *Tesina de Licenciatura*. Instituto Balseiro (Bariloche).
- WALTER J. P. Y M. L. COHEN 1972, *Phys. Rev. B* **5**, 3101.
- WANG Y.-N. Y T.-C. MA 1990, *Nucl. Instr. Meth. B* **51**, 216.
- WANG Y.-N. Y T.-C. MA 1993, *Phys. Lett. A* **178**, 209.
- WARSHAW S. D. 1949, *Phys. Rev.* **76**, 1759.
- WHITE W. Y R. M. MUELLER 1967, *J. Appl. Phys.* **38**, 3660.
- WHITE W. Y R. M. MUELLER 1969, *Phys. Rev.* **187**, 499.
- WILSON W. D., L. G. HAGGMARK Y J. P. BIERSACK 1977, *Phys. Rev. A* **15**, 2458.
- WOLKE R. L., W. N. BISHOP, E. EICHLER, N. R. JOHNSON Y G. D. O'KELLEY 1963, *Phys. Rev.* **129**, 2591.
- YANG Q., D. J. O'CONNOR Y Z. WANG 1991, *Nucl. Instr. Meth. B* **61**, 149.
- YARLAGADDA B. S., J. E. ROBINSON Y W. BRANDT 1978, *Phys. Rev. B* **17**, 3473.
- YOUNG F. C., D. MOSHER, S. A. GOLDSTEIN Y T. A. MEHLHORN 1982, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 549.



- ZAFJMAN D., G. BOTH, E. P. KANTER Y Z. VAGER 1990, *Phys. Rev. A* **41**, 2482.
- ZAIKOV V. P., V. N. NOVOZHILOVA, I. S. DIMITRIEV, YA. A. TEPLOVA, V. S. NIKOLAEV Y E. I. SIROTININ 1988, *Nucl. Instr. Meth. B* **33**, 216.
- ZARUTSKII E. M. 1967, *Sov. Phys.-Solid State* **9**, 1172.
- ZIEGLER J. F. (ED.) 1980, *The Stopping and Range of Ions in Matter*. Vol. 1 (Pergamon Press, New York).
- ZIEGLER J. F., J. P. BIRSACK Y U. LITTMARK 1985, *The Stopping and Range of Ions in Solids* (Pergamon, New York).
- ZIEGLER J. F. (ED.) 1988, *Ion Implantation. Science and Technology* (Academic, Boston).
- ZIEGLER J. F. 1994, *TRIM: The TRansport of Ions in Matter*. Version 95.xx (IBM-Research, Yorktown, e-mail release).