

IOI LASTERREN PANTAILATZE
DINAMIKOA MATERIA KONDENTSATUAN

JESUS M. UGALDE

1.— SARRERA

Materiaren egitura elektronikoa determinatzen dituen oinarri-oinarrizko bi legeak, Coulomb-en legea eta Pauli-ren antisimetria hastapena dira. Lehengoak partikulen arteko interakzioaren izakera finkatzen du. Bigarrenak berriz, partikulen edozein bi egoera estazionarioak berdinak ezin izatea inposatzen du. Bi lege hauetan oinarrituta eta mekanika kuantikoaren kalkulu prozedurak erabiliz, materiaren egitura elektronikoa ezagutu eta ulertu egin daiteke.

Gauza jakina da, bi partikula kargaturen arteko interakzio potentziala, beraien arteko distantziaren inbertsoaren proportzionala dela. Honela hidrogeno atomoaren egitura elektronikoa

$$\mathbf{H} = -\Delta/2 - Z/r \quad (1.1)$$

operadore hamiltondarraren egoera estazionarietiek osatuko dute, non $-D/2$ elektroiaren energia zinetikoa operadorea den, eta elektroiak Z karga duen nukleoaren eremuan ikusten duen potentziala, $-Z/r$, Coulomb-en legearen arauera idatzi dugu. Baina gu lotu nahi gatzazkion arazoari bestelako ezagugarriak ikus dakizkioke. Alegia, hidrogeno atomoa elektroi-gas baten barruan badugu, hutsunetan eduki beharrean, nukleoaren presentziak berak elektroi-gasa perturbatuko du, beraren egoera lehen zeukan egoera estazionariotik aldentuz. Aldentzea ez bada nahiko handia elektroi-gasak berak perturbazioa irentsi, deuseztatu nahi izango du, berriro egoera estazionarioa berreskuratze nahian. Honela perturbatzaileak, nukleoak berak elektroi-gasaren erantzuna sentituko du. Efektu honi pantailatze efektua deritzo, eta ikusten denez, perturbatua izateagatik, pertubatuak perturbatzaileari ematen dion erantzuna da

Pantailatze-efektuaren ondorioz nukleoak berak hedatzen duen potentziala modifikatu egingo da. Beraz, lehen hidrogeno atomoa hutsunetan geneukanean elektroiak nukleoaren, $-Z/r$, potentziala ikusten bazuen, orain ez du hori ikusiko. Ondorioz operadore hamiltondarra aldatu egingo da ere, beraz elektroi-gasaren barruan dagoen hidrogeno atomoaren egoera estazionarioak ez dira hutsunetan daudenen berdinak izango. Hots, egitura elektronikoa atomoa non dagoenaren menpekoa da.

1.a) Pantailatze estatikoa.-

Demagun Z_1 karga duen nukleo bat elektroi-gasetan dagoela. Bedi elektroi-gasaren dentsitatea n_0 , eta koka dezagun nukleoa koordinatu-jatorrian, beraz sistemak jasaten duen kanpo karga $r^{\text{ext}} = Z_1 d(r)$ funtzioak ematen du; d

Dirac-en δ funtzioa izanik. Jakina denez elektroi-gasaren densitatea Fermi-energiaren (E_f) funtzioan eman daiteke/1/

$$n_0 = \frac{1}{3\pi^2} (2E_f)^{\frac{3}{2}} \quad (1.2)$$

E_f elektroi-gasaren edozein elektroi- eduki dezakeen energia handiena izanik. Orain elektroi-gas honetan Z_1 karga daukagu, eta baldin kargaren presentziagatik dentsitate elektronikoaren aldaketa lokala bada, dentsitate berria honela idatz dezakegu

$$n(\vec{r}) = \frac{1}{3\pi^2} [2E_f + \Phi(\vec{r})]^{\frac{3}{2}} \quad (1.3)$$

non $\phi(r)$ -a Z_1 kargak hedatzen duen potentziala den. Bi ekuazio hauen arabera elektroi-gasaren karga induzitua zer hau da

$$\delta_n^{\text{ind}} = n(\vec{r}) - n_0 = \frac{3}{2} \frac{\Phi(\vec{r})}{E_f} n_0 \quad (1.4)$$

Beraz orain sistema osoaren (elektroi-gasa gehi Z_1 karga) Poisson-en ekuazioa, hots:

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi\rho^{\text{ext}} + 4\pi\delta_n^{\text{ind}} \quad (1.5)$$

honela geratzen da

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi Z_1 \delta(\vec{r}) + \frac{6\pi n_0}{E_f} \Phi \quad (1.6)$$

Ekuazio hau Fourier-en espazioan samurrago ebats daiteke; hots, honako transformazioaz baliatuz

$$f(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int F(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} d\vec{k} \quad (1.7)$$

erraza da (7)-a erabiliz (6)-a honela geratzen dela frogatzea:

$$\Phi(\vec{k}) = \frac{4\pi Z_1}{k^2 + \lambda^2} \quad (1.8)$$

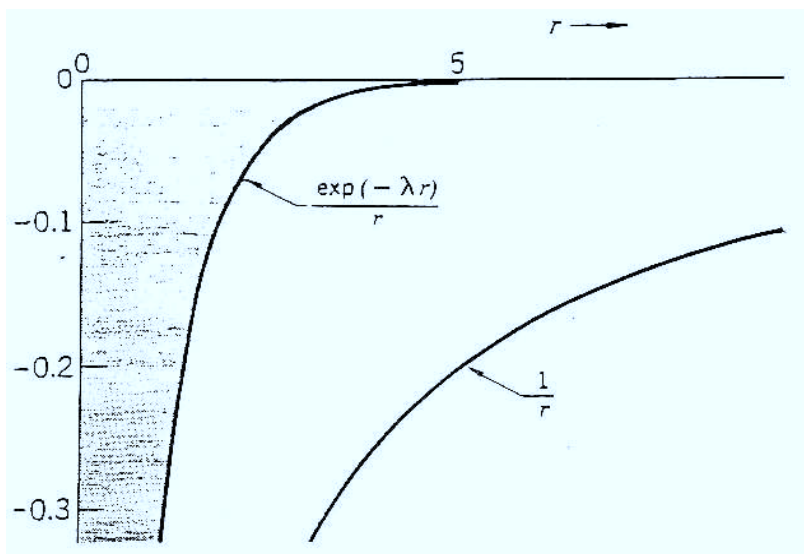
eta

$$\lambda^2 = \left(\frac{6\pi n_0}{E_F} \right) \quad (1.9)$$

Thomas-Fermi-ren uhin-bektorea izanik. Orain Z_1 kargak hedatzen duen potentziala $\phi(k)$, koordinatuen espazioan ipintzeko (7) ekuazioa erabili behar dugu, hots :

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{4\pi Z_1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{k^2 + \lambda^2} = Z_1 \frac{e^{-\lambda r}}{r} \quad (1.10)$$

Hemen dago auresandakoa: Z_1 kargak hedatzen duen potentziala ezberdina da hutsunetan edo elektroigasaren barruan badago. Hutsunetan dagoenean potentziala $1/r$ delakoaren proportzionala da; elektroigasaren barruan dagoenean, beniz, $\exp(-\lambda r)/r$ delakoarena. 1.irudian potentzial biak azaltzen dira r -aren funtzioan. Bertan, potentzial pantailatuaren irispidea ez-pantailatuarena baino txikiagoa dela ikus daiteke.



1.Irudia.- Coulomb-en potentziala, $(1/r)$, eta potentzial pantailatua, $\exp(-\lambda r/r)$.

1.b) Pantailatze estatikoa hidrogeno Ioi-molekularrean: fusio hotza

Paladioaren barruan dauden deuterio molekulek beraien oreka-distantzia hutsunetan daudenen baino txikiagoa eduki dezakete; paladioaren elektroigasak eragiten duen pantailatze estatikoaren eraginaz. Honela deuterio nukleoek errazago jasan dezakete tunel efektua eta indar nuklear bortitzaren eramuan jausi. Honen amaiera fusio nuklearra izango litzateke, fusio hotza alegia/2/. Ideia hau duela gutxi Sun eta Tomanek-ek kritikatu dute/3/. Izan ere, dentsitate lokalaren aproximazioa erabiliz *ab initio* kalkuloek D-D lotura distantzia 0.20 \AA luzeagoa izan behar duela paladioaren barruan hutsunetan baino frogatu dute. Lotura-distantzia handiago honek efektu hau Fleischmann eta Pons-ek aldarrikatu zuten fusio hotzaren mekanismoa izatea, oso zaila egiten du. Pantailatze estatikoaz dakigunaz guk geuk ere fusio hotza oso inprobablea dela froga dezakegu; gutxienez pantailatze estatikoaren eraginaz.

Energia nukleoen masarekiko independente denez gero D_2^+ -aren ordeztu H_2^+ -a erabiliko dugu. Horrela H_2^+ ioi-molekularrearen energia nukleoen arteko distantziarekiko, elektroigasaren barruan, kalkulatu dugu. Honela pantailatze estatikoak D-D-aren orekazko lotura-distantzia handitu egiten duela ikusiko dugularik. Ebats dezagun bada, H_2^+ molekularen Schrödinger-en ekuazioa. Operadore hamiltondarra zer hau da

$$H = -\Delta/2 - V(r_a) - V(r_b) + V(R) \quad (1.11)$$

eta uhin-funtzioa LCAO (Orbital-Atomikoen-Konbinaketa -Lineala) erara idatziko dugu, hots/4/

$$\Psi = c_a \phi_a + c_b \phi_b \quad (1.12)$$

c_a eta c_b , kalkulatu behar diren koefizienteak dira, eta ϕ_a eta ϕ_b orbital atomiko hidrogenoideak a eta b nukleoetan zentratuak. Energia, orduan, beheko ekuazioak emango ditu

$$E_{\pm} = \frac{\alpha \pm \beta}{1 \pm S} \quad (1.13)$$

S overlap integrala izanik eta α Coulomb integrala eta β erresonantzia integrala

$$\alpha = E_H - j + V(R) \quad (1.14)$$

$$\beta = [E_H + V(R)] S \quad (1.15)$$

dira, non E_H orbital hidrogenoideari dagokion energia den, eta j eta k beste era honetara idazten diren

$$j = \int \phi_a^* V(r_b) \phi_a d\tau \quad (1.16)$$

$$k = \int \phi_a^* V(r_a) \phi_b d\tau \quad (1.17)$$

Orain pantailatze estatikoaren eragina potentzial pantailatuaren bitartez sartuko dugu, hots

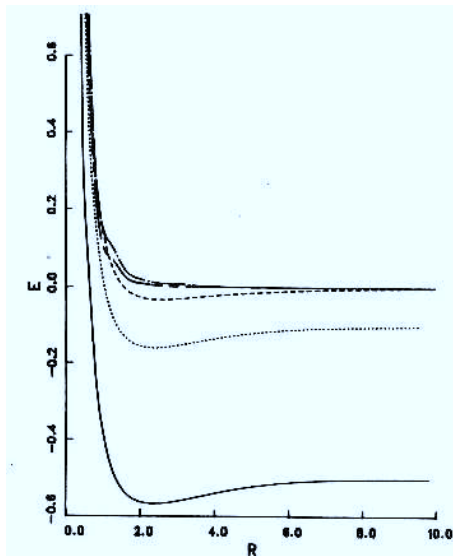
$$V(x) = \frac{e^{-\lambda x}}{x} \quad (1.18)$$

non (1.10) ekuazioa erabili dugun $Z_1 = 1$ eginik. Orain E_H , j eta k behean ematen diren erara idatziko dira;

$$E_H = \frac{\xi^2}{2} - \frac{4\xi^3}{(2\xi + \lambda)^2} \quad (1.19)$$

$$j = \frac{\xi^3}{R} \left\{ \frac{\xi e^{-\lambda R} - e^{-2\xi R} (\xi + R [\xi^2 - (\lambda/2)^2])}{(\xi + \lambda/2)^2 (\xi - \lambda/2)^2} \right\} \quad (1.20)$$

$$k = \xi^3 R^2 \frac{e^{-R(\xi + \lambda/2)}}{R(\xi + \lambda/2)} \left\{ \left[1 + \frac{1}{R(\xi + \lambda/2)} - \frac{1}{\lambda R/2} \right] \frac{\sinh(\lambda R/2)}{\lambda R/2} + \frac{\cosh(\lambda R/2)}{\lambda R/2} \right\} \quad (1.21)$$



2.Irudia.- H_2 -aren energia distantzia internuklearraren funtzioan. Kurba beta: $\lambda=0$.
 Puntuduna: $\lambda=0.6$ Marratxoduna: $\lambda=1.0$.
 Marra eta puntuduna: $\lambda=1.3$ eta marra eta marratxoduna: $\lambda=2.0$.

ξ 1 s orbital hidrogenoideen berretzailea delarik. Erraz froga daiteke (1.19) (1.20) eta (1.21) ekuazioek Coulomb potentzialarekin lortzen diren ekuazioak ematen dituztela $\lambda=0$ baliorako/5/. Oinarritzko energia-maila distantzia internuklearekiko 2.irudian erkusten da, λ -ren zenbait balioerentzat.

Honek energia totalaren balio absolutoa λ handitzerakoan murriztu egiten dela erakusten digu. Honekin batera H_2^+ ioi-molekularraren disoziazio-energia murriztu egiten dela ere ikusten dugu. Gehiago zehazteko efektu hau, energia totala R eta ξ parametroekiko optimizatu dugu λ -ren zenbait baliotan. Kalkulu honen emaitzek nukleoen arteko oreka-distantzia R_c monotonoki handitzen dela erakusten dute. Hots, $\lambda=0$ baliorako $R_c=2.34$ u.a.-tik $\lambda=1.22$ baliorako $R_c=2.91$ u.a. balioraino. Hemendik aurrera pantailatze-efektua hain da haundia ioi-molekularrak ezin duen existitu; hau da, energiak ez du R -arekiko minimorik agertzen, eta oinarritzko egoera ez da molekularra, $H^+ + H$ sistemari dagokiona baizik.

Beraz gure kalkuloak R_c -a handitu egiten dela elektroigasetan pantailatze estatikoaren eraginaz erakusten du. Orduan askoz inprobablea izango da uhin-funtzioak, $R=0$ -an, fusio hotza egia bihurtzeko balorea nahiko handia har dezan, pantailatze efektuak indarrean badaude. Emaitza hau erabat dator bat Sun eta Tomanek-ek argitaratutakoarekin/3/, eta fusio hotzari ez dio itxaropen handirik ematen.

1.c) Pantailatze dinamikoa

Orain elektroigasetan dagoen Z_1 karga, v abiaduraz mugitzen ari da. Orduan askoz egokiagoa da elektroigasetan formulazio dielektrikoa erabiltzea. Alegia, elektroigasetan erantzun-funtzioa $\epsilon(q, \omega)$ funtzio dielektrikoa izango da. Honela, $\rho^o(r-t) = Z_1 \delta(r-vt)$ karga dentsitatea eta berak hedatzen duen potentziala $\phi(r-t)$, Poisson-en ekuazioaz erlazionatzen dira:

$$\epsilon \Delta \phi = -4\pi \rho^o(\mathbf{r}, t) \quad (1.22)$$

Fourier-en espazioan ekuazio hau honela geratzen da:

$$\Phi(\bar{q}, \omega) = \frac{4\pi \rho^o(\bar{q}, \omega)}{q^2 \epsilon(\bar{q}, \omega)} \quad (1.23)$$

Dakigunez $p^{\circ}(q,w) = 2 \pi$; $Z_1 \delta(\bar{\omega} - \rho \cdot v)$ da, orduan potentzial induzitua

$$\Phi^{\text{ind}}(\bar{q}, \omega) = \frac{8\pi^2 Z_1}{q^2} \delta(\omega - \bar{q} \cdot \bar{v}) \left(\frac{1}{\epsilon(\bar{q}, \omega)} - 1 \right) \quad (1.24)$$

edota koordinatuen espazioan

$$\Phi^{\text{ind}}(\bar{r}, t) = \frac{Z_1}{2\pi^2} \int \frac{d\bar{q}}{q^2} e^{i\bar{q} \cdot (\bar{r} - \bar{v} t)} \left(\frac{1}{\epsilon(\bar{q}, \omega)} - 1 \right) \quad (1.25)$$

Ekuazio honen ebaspena gehienetan numerikoa izaten da, funtzio dielektrikoa oso konplikatua delako/6-11/. Hala ere, interesgarria da, frekuentziaren dependentzia soila duen $\epsilon(\bar{\omega}) = \bar{\omega}_p^2 / \bar{\omega}(\bar{\omega} + i\gamma)$ funtzio dielektriko klasikoa-rako (1.25)-aren soluzioa ikustea.

Hots, kasu honetan, $z = z - vt$ ipiniz eta koordinatu zilindrikoak (b, z, ϕ) erabiliz/7/

$$\Phi(b, \bar{z}) = Z_1 h_0(b, \bar{z}) + \Phi_1(\bar{r}, t) = \frac{Z_1}{R} + \Phi_{\omega}(\bar{r}, t) \quad (1.26)$$

Lehenengo h_0 , osagaiak z-rekiko Coulomb potentzial pantailatua ematen digu, $y=0$ -rentzat:

$$h_0(b_1, \bar{z}) = \frac{1}{R} - \frac{\omega_p}{V} S_0 \left(\frac{\omega_p b}{V}, \frac{\omega_p \bar{z}}{V} \right) \quad (1.27)$$

non lehenengo terminoa Coulomb-en potentzial hutsa den. Bigarreanean

$$S_0(a, b) = \int_0^{\infty} \frac{J_0(at) e^{-|b|t}}{1+t^2} dt \quad (1.28)$$

faktorea agertzen da, eta pantailatze estazionarioaren eraginaz azaltzen da. (1.26)-ko bigarren osagaiak potentzialaren alde oszilantea ematen du, eta honako forma du

$$\Phi_1(b,t) = \frac{2Z_1 \omega_p}{v} \sin\left(\frac{\omega_p \bar{z}}{v}\right) K_0\left(\frac{\omega_p b}{v}\right) e^{\frac{\gamma \bar{z}}{2v}} \Theta(\bar{z}) \quad (1.29)$$

$$\Theta(x) = (1+x/|x|)/2$$

Aipagarria da potentzial induzituak $r \rightarrow 0$ doanean hartzen duen balorea, hots/8/

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(\Phi - \frac{Z_1}{R} \right) = - \frac{Z_1 \pi \omega_p}{2v} \quad (1.30)$$

elektroi-gasak Z_1 karga dagoen tokian induzitzen duen potentziala da. Honi, edota guk orain arte potentzial induzitua deitu diogunari wake-potentziala deritzo, eta beraren existentzia zenbait experimentutan baieztatua izan da. Hala nola, ioi-cluster-en geratze-ahalmen experimentuetan /9/, edota ioi-cluster-en espazio-denbora korrelazioetan /10, 11/, edota solidioen egoera exzitatuen energia-lerrakuntzetan /12/. Azkenik aipagarria da, elektroia erori eta egoera ligatu batean gera daitekeela wake-potentzialak sortarazten dituen potentzial zuloetan/13/.

2.- PANTAILATZE DINAMIKOA IOI-HIDROGENOIDEETAN

2.a Teoria

Ikusi dugunez partikula laster batek elektroigazaren barruan mugitzera-koan, hura polarizatu egiten du, eta ondorioz potentzial bat induzitzen du/6-8/. Potentzial induzitu honek partikularen egitura elektronikoaren gain duen

eragina izango da atal honen gaia. Hasteko partikula lasterra ioi-hidrogenoidea izango da. Hots, Z_1 karga duen nukleo bat zeinek elektroi bakar bat egoera ligatuan duen. Elektroi honen egoera ligatuak $|n\rangle$ -az ikurratuko ditugu. Eta honek potentzial induzituaren pantailatze-dinamikoaren eraginaz jasaten dituen energia lerrakuntzak, ioiaren abiadurarekiko eta elektroi-gasaren dentsitatearekiko menpekotasunak ikertuko ditugu.

Elektroi-gasarekin interakzionatzen duen elektroi-hidrogenoide baten self-energiaren parte erreala, funtzio dielektrikoa $\epsilon(q, \omega)$ erabiliz honela emago da [14,15]

$$\sum_{k_n, E_{k_n}} = \sum_{n'} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} |Z_1 \delta_{nn'} - \rho_{nn}(q)|^2 \frac{4\pi}{q} R_e \left(\frac{1}{\epsilon(q, \omega_n - \omega_n)} - 1 \right) \quad (2.1)$$

non k , k elektroiaren momentua, eta n elektroiaren ω_n , energiako egoeraren indize kuantikoa diren. Ioiaren abiadura $v=k/(M+1)$ da, eta E_{k_n} , elektroi-nukleo bikotearen energia.

$$E_{k_n} = \frac{k^2}{2(M+1)} + \omega_n \quad (2.2)$$

Azkenik

$$\rho_{nn}(q) = \langle n' | e^{-iqr} | n \rangle \quad (2.3)$$

$|n\rangle$ eta $|n'\rangle$ egoerei dagokien forma-faktore atomikoa da. (2.1) ekuazioaren ekuaziotatik ϵ -aren hiru osagai bereiz daitezke. Lehenengo Z_1^2 -aren proportzionala den osagaia, ioiak berak elektroi-gasetan induzitutako polarizazioaren bitartez berarekiko interakziotik sortzen da, eta honako hau da

$$\sum_1 = \int dx \frac{8\pi^2 Z_1^2}{2} \delta(\omega - q \cdot v) R_e \left(\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} - 1 \right) \quad (2.4)$$

non

$$\int dx = \int \frac{dq}{(2\pi)^3} \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi}$$

Bigarren terminoa Z_1 -aren proportzionala da, hots

$$\sum_2 = 2 \int dx \frac{8\pi^2 Z_1}{q^2} \langle n | e^{iqr} | n \rangle \delta(\omega - qv) R_e \left(\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} - 1 \right)$$

eta funtsean wake-potentzial semiklasikoa elektroi-hidrogenoidearen kargaden-tsitateaz biderkatu eta espazio osoan integratzearen baliokidea da. Hau da,

$$\sum_2 = - \langle n | \Phi_\omega (b, z) | n \rangle \quad (2.6)$$

$\phi(b, z)$ Z_1 karga duen ioiak hedatzen duen wake-potentzial eskalarra izanik. Koordinatu zilindroak erabiltzen ditugu: $b^2 = (x^2 + y^2)$ eta $Z = z - vt$. Azken hau q uhin-bektorea duen Z_1 kargaren $(0, 0, vt)$ posizioari erreferitua. q -aren osagaia b -direkzioan Q da, beraz $|q| = q = (Q^2 + w^2/v^2)^{1/2}$. Abiadura konstantetzat hartua izan da. Wake-potentzial eskalarra beste era honetara ere idatz daiteke.

$$\Phi_\omega = \frac{Z_1}{\pi v} \int_0^\infty Q J_0(Qb) dQ \int_{-\infty}^\infty d\omega R_e \left(\frac{\exp(i\omega Z)}{k^2} \left(\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} - 1 \right) \right) \quad (2.7)$$

Hemen J_0 zero-ordenako Bessel-en funtzioa da. Self-energiaren hirugarren eta azkenengo osagaiak, $p_{n, n}(q)$ faktorea du; eta elektroiaren wake-potentzial elektrikoa berarenganako interakziotik sortua da.

$$\sum_3 = \sum_n \int dx \frac{8\pi^2 |\rho_{n,n}(q)|^2}{q} \delta(\omega - qv - \omega_n + \omega_n) R_e \left(\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} - 1 \right) \quad (2.8)$$

Ekuazio honen soluzio zehatza ezin daiteke lor, < rln > uhin-funtzio multzoa, zeinek p_{n,n} matrize-elementoak finkatzen dituen, iteratiboki ebatsi behar delako. Hala ere, bi hurbilketa baliotsu lor daitezke ; lehenengoa, n'-aren gaineko batuketan closure-hurbilketa erabiliz, honela:

$$\sum_3^C = \int dx \frac{8\pi^2}{q} \delta(\omega - qv + \Delta) R_e \left(\frac{1}{\epsilon} - 1 \right) \quad (2.9)$$

eta bigarrena, zerora berdindu batuketaren osagai denak n=n' ezezik, hots:

$$\sum_3^0 = \int dx \frac{8\pi^2 |\rho_{n,n}(q)|^2}{q} \delta(\omega - qv) R_e \left(\frac{1}{\epsilon} - 1 \right) \quad (2.10)$$

A-a konstantea izanik. (2.9) eta (2.10) ekuazioek (2.4) ekuazioa ematen dute Z₁²-a, lrl²-az eta 1-az, kasuan-kasu, ordezkutzen denean. Azkenengoa Δ=0 ere ipini behar da. Kargaren karratuaren eta forma-faktorearen karratuaren proportzionalak diren terminoak higidura erlatiboarekiko independientek dira eta ez dute pantailatze dinamikoaren arazoan garrantzirik, beraz hemen Z₁-aren proportzionala den terminoa aztertuko dugu. Kalkuluetarako (2.5) ekuazioa askoz egokiago den beste era honetara idatz daiteke:

$$\sum_2 = \sum_{l'm'} -Z_1 \int \frac{dq}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{q^2} R_e \left(\frac{1}{\epsilon(q, qv)} - 1 \right) .$$

$$. i^{l'} (2l'+1) \alpha(1, 1, 0, 0, 0) \alpha(1, 1, m', m', m')$$

$$. \int |R_{1m}(r)|^2 r^2 j_l(qr) dr \quad (2.11)$$

non $R_m(r)$, $\ln >$ uhin-funtzioaren parte erradiala den, eta C-ak Clebsch-Gordon-en koefizienteak/16/. Oraindik hau baino espresio samurragoa simetria esferikoko uhin-funtzioak eta konstante dielektrikoren plasmon-pole /17/ delako hurbilketa erabiliz gero lor daiteke, hau da:

$$\Sigma_2 = \frac{-Z_1 \omega_p^2}{2\pi v} \int_0^\infty \frac{dq}{q} |\rho_{nn}(q)|^2 \ln \left| \frac{\omega - qv}{\omega + qv} \right| \quad (2.12)$$

$\omega^2 = \omega_p^2 + \beta^2 q^2 + q^4$, ω plasmoien frekuentzia, $\beta^2 = (3/5) v_F^2$, eta v_F Fermi-ren abiadura direlarik. Ohar gaitezen, q eta q^3 -aren proportzionalak diren terminoak ez ditugula kontutan hartzen, beraz abiadura handien limitean Σ_2 -ak ($\pi \omega_p Z_1 / 2v$) balorea hartzen du.

2.b) Emaitzak

I.Taula: Energia-lerrakuntza ($Z_1 \omega_p \pi / 2 v$) unitatetan, bi dentsitatetarako, ioiaren abiaduraren funtzioan

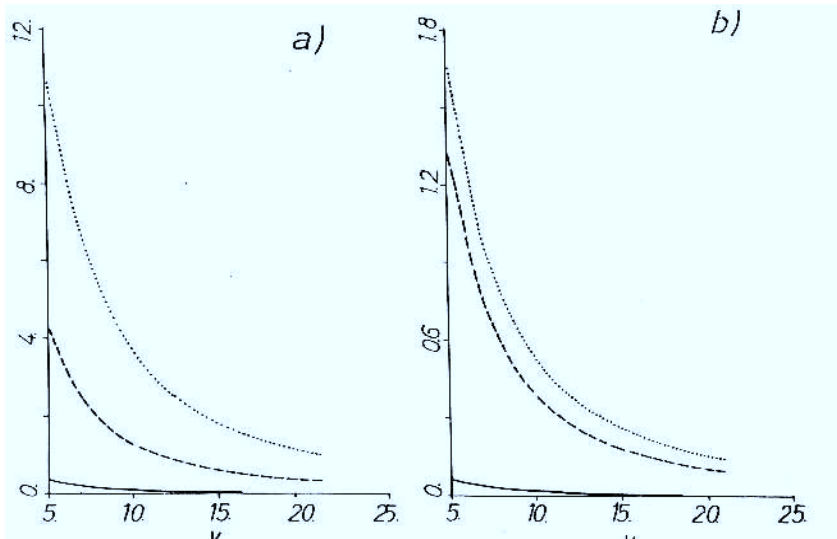
$r_s = 2$				
	EGOERA: 1s Z_1		EGOERA: 2s Z_1	
	5	16	5	16
v				
5.0	0.9858	0.9981	0.8589	0.9817
7.0	0.9591	0.9983	0.8900	0.9861
9.0	0.9912	0.9985	0.9091	0.9889
11.0	0.9926	0.9986	0.9271	0.9907
13.0	0.9936	0.9988	0.9316	0.9921
15.0	0.9944	0.9989	0.9399	0.9931
17.0	0.9950	0.9989	0.9447	0.9938
19.0	0.9954	0.9990	0.9494	0.9944
21.0	0.9959	0.9991	0.9533	0.9949
	EGOERA: 2p ₀ Z_1		EGOERA: 2p _{±1} Z_1	
	5	16	5	16
v				
5.0	0.8538	0.9911	0.9911	0.9838
7.0	0.8841	0.9939	0.9275	0.9878
9.0	0.9030	0.9955	0.94111	0.9900
11.0	0.9162	0.9963	0.9502	0.9916
13.0	0.9259	0.9968	0.95670	0.9929
15.0	0.9334	0.9972	0.96165	0.9938
17.0	0.9394	0.9976	0.9655	0.9945
19.0	0.9444	0.9977	0.9686	0.9950
21.0	0.9485	0.9979	0.9712	0.9955

$r_s=4$	EGOERA: 1s Z_1		EGOERA: 2s Z_1	
	5	16	5	16
v				
5.0	0.9598	0.9941	0.9361	0.9930
7.0	0.9694	0.9956	0.9511	0.9947
9.0	0.9756	0.9963	0.9600	0.9958
11.0	0.9794	0.9970	0.9660	0.9965
13.0	0.9822	0.9975	0.9704	0.9970
15.0	0.9842	0.9978	0.9737	0.9974
17.0	0.9859	0.9980	0.9763	0.9976
19.0	0.9872	0.9982	0.9784	0.9979
21.0	0.9883	0.9984	0.9801	0.9981

v	EGOERA: 2p ₀ Z_1		EGOERA: 2p ₁₁ Z_1	
	5	16	5	16
5.0	0.8538	0.9911	0.9048	0.9838
7.0	0.8841	0.9939	0.9275	0.9878
9.0	0.9030	0.9955	0.94111	0.9900
11.0	0.9162	0.9963	0.9502	0.9916
13.0	0.9259	0.9968	0.95670	0.9929
15.0	0.9334	0.9972	0.96165	0.9938
17.0	0.9394	0.9976	0.9655	0.9945
19.0	0.9444	0.9977	0.9686	0.9950
21.0	0.9485	0.9979	0.9712	0.9955

1s,2s eta 2p₀₊₁, energia-maila hidrogenoideen lerrakuntzak 1 .taulan, $AE^0=Z_1\pi\omega_p/2v$ unitatetan, erakusten dira. Taulako datuei arretaz begiratu gero energia-lerrakuntzek biek, nukleoaren karga eta abiadura handitzerakoan, AE^0 balorera jotzen dutela ikusten da/18/. Beraz $\Delta E0-$ a karga handien eta abiadura handien limitea da. Joera honetara gutxien bilakatzen diren egoerak 2s eta 2p₀ egoerak dira. Honek zera erakusten du: egoera bakoitzak duen estruktura espazial ezberdinagatik pantailatze dinamikoaren efektuak ere ezberdin sentitzen direla egoera bakoitzean. Orduan, karga nuklear eta abiadura txikietarako, wake-potentzial konstantearen hurbilketa erabat desegokia gerta liteke, wake-potentzialaren hedaera espazial osoa kontutan hartzea derrigor-derrigorrezkoa izango delarik. Efektu honen isladapen garrantzitsuak 2s eta 2p₀ egoeren arteko energia-bereizketa da. Wake-potentzialak 2s eta 2p, energia-mailen degenerazioa hausten du eta bi egoera ezberdin berriak sortarazten ditu. Honen energia-diferentzia lehenengo ordenako perturbazio-teoria erabiliz $21 < 2001 \phi \omega 121 > 1$ dela lortzen dugu. Wake-potentzialak eragindako energia-bereizketa hau, nukleoan indizitutako eremu elektroni-

koaz ere kalkula daiteke. Azken aproximazio honi Stark-bereizketa esango diogu. Izan ere, hurbilketa honek energia-bereizketa, nukleoan induzitutako eremu elektrikoaren proportzionala eta nukleoaren kargarekiko independentea dela emango digu[7]. Bi hurbilketak erabiliz lortutako emaitzak, elektroigasaren bi dentsitateetarako ($r_s=2$ eta $r_s=4$), 3.irudian erakusten dira. Berehala



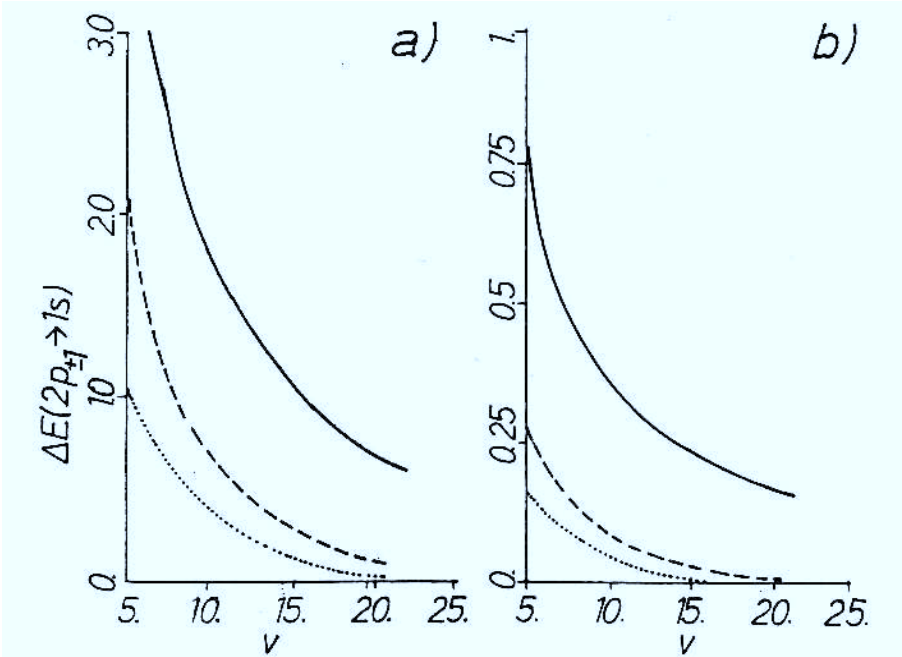
3.Irudia.- Energia-bereizketa a) $r_s=2$. eta b) $r_s=4$. Kurba beteak: Stark-bereizketa.
Marratxoduna: $21 < 2001 \Phi_w | 210 > 1$ eta $Z_1=5$. Puntuduna: $21 < 2001 \Phi_w | 210 > 1$ eta $Z_1=16$.

ikusten dugu energia-bereizketak bai ioiaren karga eta baita ioiaren abiadurarekiko menpekotasun nabarmena ere agertzen duela. Beraz, Stark-bereizketak, bakarrik abiadura handietarako balio du; bestelakoetan wake-potentzialaren hedaera osoa hartu behar dugu kontutan, emaitza egokiak lortzeko. Izan ere, 2.taulak $^{35}K^+$ kasurako $v=35$ u.a.-tan lortutako emaitzak erakusten ditu. Hemen ere, elektroigasaren bi dentsitate ezberdin erabili ditugu. Bi hurbilketak, horrelako abiadura (eta baita ere karga nuklearra, kasu honetan) handia daukagunean ia bat datozela ikus daiteke.

2.Taula: 2p, eta 2s egoeren arteko energia-bereizketa $Z_1=35$ and $v=35$ erako eta bi dentsitate ezberdinetarako.

r_s	$2 < 2001 \Phi_w 210 > eV/$	Stark-bereizketa/eV/
2.0	.325455	.414712
4.0	.052791	.057145

$2p_{\pm}$ egoeretik $1s$ egoerarainoko trantsizio-energiak ere kalkulatu ditugu. Aurretik egindako beste kalkuluek (ikus Jakubassa/19/) abiadura handietan, hots $v \gg v_f$ denean, trantsizioaren energia-lerrakuntzak v^{-1} tankerako dependentsia agertzen duela eta nukloaren kargarekiko independentea dela aurreratu dute. Trantsioaren energia-lerrakuntza ioiaren abiadurarekiko eta elektroigasaren bi dentsitatetarako 4.irudian erakusten da. Bertako makurrei



4.Irudia.- Energia-lerrakuntza $2p_{\pm 1} \rightarrow 1s$ trantsiziorako a) $r_s=2$, b) $r_s=4$. Kurba betea: Jakubassa-ren hurbilketa. Marratxoduna: gure kalkulua $Z_1=5$ -erako. Puntuduna: gure kalkulua $Z_1=16$ -rako.

begiratu gero, Jakubassa-ren hurbilketak, trantsizioaren energia-lerrakuntza, abiadura tarte osoan, handiagoa ematen duela ikus daiteke. Izan ere, ioiaren karga eta abiadura txikietarako Jakubassa-ren hurbilketak emaitza eskasak ematen ditu. Bestalde, aurreran zitezkeen lez, abiadura handietan emaitza onargarriak lortzen dira.

3.- PANTAILATZE DINAMIKOA IOI-HELIOIDEETAN

3.a) Teoria

Ioi-helioideek Z_1 karga duen nukleo bat eta bi elektroigoera ligatuetan dituzte. Beraz, orain, lehen ioi-hidrogenoideetan ez zegoen elektroigasaren

interakzioa azaltzen zaigu. Interakzio honen tratamendu zehatza oso da zaila. Hala ere, guri era aproximatuan tratatzea komeni zaigu, orain arte elektroi bakarreko ioien pantailatze efektu dinamikoaren teoria garatu dugulako, eta teoria hori berori erabili nahi dugulako kasu honetarako ere. Horretarako Slater-en /4/ karga nuklear efektiboaren teoria oso aproposa dugu. Teoria honetan bigarren elektroiaren presentziak, elektroi bakoitzak nukleoaren karga osoa ez sentitu izana da. Haren orde, orain elektroi bakoitzak karga nuklearraren zati bat sentitzen du, karga nuklear efektiboa, alegia. Hurbilketa honek dituen abantailetatik bat ioi polielektronikoak, monoelektronikoak izango balira bezala tratatzen dituela da, non elektroi bakoitzari dagokion karga nuklear efektiboa Slater-en arauak ematen dituen. Ideia hau oso garrantzitsua da: karga nuklear efektiboak egoera ligatuaren dependentzia badu, orduan pantailatze dinamikoaren efektuak elektroiaren egoera ligatuaren dependentzia edukiko du. Hau pantailatze estatikoan gertatzen ez zen fenomeno berria da, eta pantailatze dinamiko eta estatikoaren arteko ezberdintza markatzen du. Egin dezagun, goian esandakoa argitzeko, kalkulu txiki bat. Demagun elektroi biak $1s$ orbitalean daudela; beraz ioiaren egoera elektronikoa 1S_0 izango da eta nukleoaren karga Z_1 . Orduan, Slater-en arauen arauera elektroi bakoitzaren karga nuklear efektiboa $Z^*_1 = (Z_1 - 5/16)$ izango da. Erabil dezagun orain (2.6) ekuazioa elektroi bakoitzaren energia-lerrakuntza kalkulatzeko. Bion energiak berdinak direnez gero energia lerrakuntza totala zer hau izango da:

$$\Delta E_1 = -2 \langle n | \Phi_w | n \rangle \quad (3.1)$$

In>, $1s$ orbitalaren uhin-funtzioa izanik. Demagun wake-potentziala konstantetzak har daitekeela, eta bedi $\phi(0,0) = Z^*_1 \pi \omega_p / 2v$ balore konstante hori. Baina orain Z^*_1 elektroiaren karga nuklear efektiboa da. Hots, (3.1) ekuazioa erabiliz

$$\Delta E (^0S_1) = -2(Z_1 - 5/16) \pi \omega_p / 2v \quad (3.2)$$

Demagun orain, berriz, elektroiak orbital ezberdinetan daudela, $1s$ orbitalean bat, eta $2p$ orbitalean bestea, egoera elektroniko totala $3P_1$ edo 1P_1 da, elektroiok spinak parekatuak edota desparekatuen ba ditu; kasu honetarako Slater-en karga nuklear efektiboaren arauak zera esaten digute: $1s$ orbitalean dagoen elektroiaren karga efektiboa $Z^*_1 = Z_1$ karga dela, eta $2p$ orbitalean dagoenarendako $Z^*_1 = (Z_1 - 1)$.

Beraz orain egoera bielektroniko honek jasaten duen energia-lerrakuntza zer hau da:

$$\Delta E (^3,^1P_1) = -(Z_1 + Z_1 - 1) \pi \omega_p / 2v \quad (3.3)$$

Azkenik esan, bi egoera horien arteko trantsizioa posible balitz, trantsizioaren energia-lerrakuntza, pantailatze dinamikoaren efektuarengatik

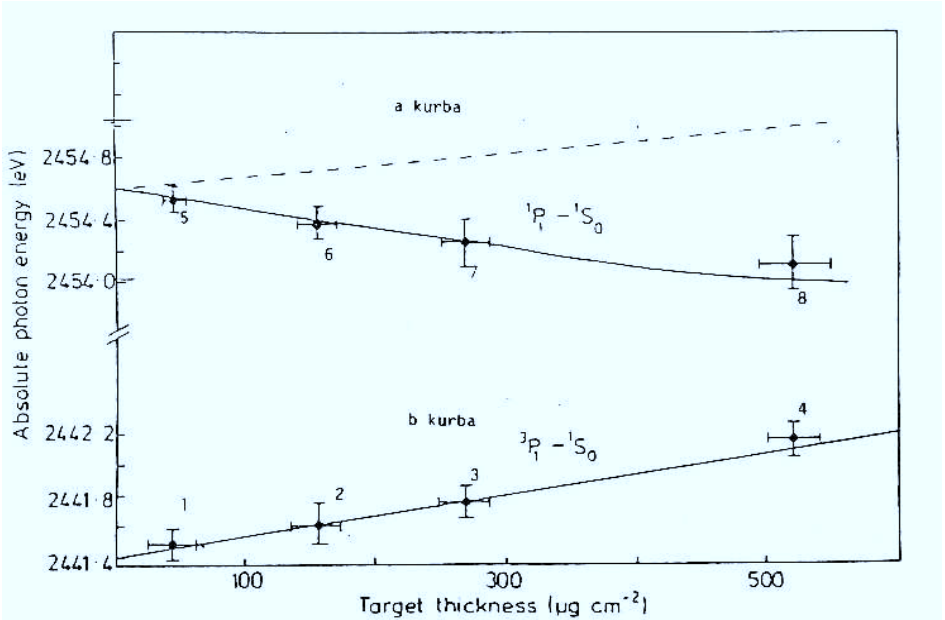
$$\Delta E_0 = \Delta E(^3P_1) - \Delta E(^1S_1) = -(3/8) \pi \omega_p / 2\nu \quad (3.4)$$

izango litzatekeela. Ohar gaitezen kalkulu samur honek ΔE_0 -a karga nuklearrarekiko independetea dela auresaten digula.

3.b) Bell-en esperimentua

Pantailatze dinamikoaren efektua ioi-helioideetako bi egoeren arteko trantsizio-energian ikus daiteke. Trantsizio hori elektroigasaren barruan gertatzen bada, trantsizioaren energia-lerrakuntzan nabaritu beharko litzateke, trantsizio hori hutsunetan ematen denean lortzen denarekin konparatuz gero. Trantsizioaren energia-lerrakuntza hori neurtu ahal izango bagenu, orain arte garatutako teoria baieztatu ahal izango genuke. Hauxe da, hain zuzen Bell eta beraren lankideek 1976.ean egin zutena/20,21/; pantailatze dinamikoa trantsizio-energiarengan duen eragina neurtu. Horretarako 95 MeV-etako sufre-ioiak aluminio xafla mehe (40 pg/cm^2 -etatik 100 pg/cm^2 -etarainoko lodierako xaflak erabili zituzten) batetik pasa arazi zituzten, eta txokeak eragindako K X-izpien energia neurtu zuten. Ioien abiadura handiagatik sufrearen 1s elektroiak ez ezik beste guztiak galdu egiten dira, aluminioaren lehen geruzekin izandako txokeez. Beraz, solido barrutik pasatzen dena helio-tankerazko ioiak, karga nuklear 16 u.a-koak direla eta eratzen diren egoeren kopurua ez zela oso handia izango esan genezake. Saiakuntza honetarako, egoeren arteko trantsizioetatik bakarrik bi suertatu ziren interesgarri: $(1s2p) ^1P_1 \rightarrow (1s1s) ^1S_0$ eta $(1s2p) ^3P_1 \rightarrow (1s1s) ^1S_0$ trantsizioak, alegia. Hauek, eta ez besterik, aukeratzearen arrazoia zer honetan datza: $^1P_1 \rightarrow ^1S_0$ -aren erdibizitza 1.5×10^{-14} segundutakoa da, baina bestalde, $^3P_1 \rightarrow ^1S_1$ -arena 10^{-12} segundu baino handiagoa, 3P_1 egoera metaegonkorra delako. Honela 95 MeV-etako sufre-ioiendako 1P_1 egoeraren erdibizitza, ioiek solidoa zeharkatzeko behar duten denbora ordena berekoa da eta, beraz, solidoaren lodieraren aldaketak solido barruan eta solido kanpoan gertatzen diren trantsizioen erlazioa finkatuko du. Baina 3P_1 -aren erdibizitza nahiko handia denez gero trantsizio gehienak solido kanpoan gertatuko dira, haren lodieraren influentziarik gabe. Hona hemen arazoaren gakoa: solidoaren lodieraren aldaketek $^1P_1 \rightarrow ^1S_0$ trantsizioarengan inolako eraginik ez dutela agertu behar.

Emaitza esperimentalek bestelakoa esaten dute (ikus 5.irudia), $^3P_1 \rightarrow ^1S_0$ nahiz $^1P_1 \rightarrow ^1S_0$ trantsizioak solidoaren lodieraren dependentsia dutela, hain zuzen. Hala ere, $^3P_1 \rightarrow ^1S_0$ -aren trantsizioa-energiak Doppler-lerrakuntza eta energia-galerei dagozkien zuzenketak egin ondoren erabat uler ditzakegu; hots, teoria (5.irudiko a kurba) eta saiakuntzaren emaitzak (5.irudiko 1, 2,



5.Irudia.- Bell-en esperimetuaren emaitzak.

3 eta 4 puntuak) bat datozela. Baldin zuzenketa horiek $^1P_1 \rightarrow ^1S_0$ -ari egiten bazaizkio, 5.irudiko 5, 6, 7 eta 8 puntuei, gutxi-gora-behera 1 eV-etako energia-murrizketa geratzen zaigu pantailatze dinamikoari atxekitzeko.

Konpara dezagun bada (3.4) ekuazioak ematen diguna experimental-ki lortutako trantsizio-energia lerrakuntzarekin. Aluminioaren plasmofrekuentzia $\omega_p = (3/r_s^3)^{1/2}$ da, non $r_s = 2$ u.a. den, beraz $\omega_p = 0.61237$ u.a. da. Bell-en esperimentuan ioiren abiadura $v = 10.69$ da, beraz

$$\Delta E_0 = 0.03377 \text{ u.a.} = 0.918 \text{ eV} \quad (3.5)$$

Zein oso balore ona den, kontutan izanik (3.4) ekuaziora iristeko egin ditugun aproximazioak kontutan hartzen baditugu. Izan ere, (2.6) ekuazioan wake-potentzialaren (2.7) forma erabiliz, bi funtzio dielektriko ezberdinekin trantsizioaren energia-lerrakuntzarendako lortutako emaitzak 3.taulan daude. Erabilitako bi funtzio dielektrikoak hauek dira: lehenengoa funtzio dielektriko klasikoa; hots: $\epsilon(\omega) = 1 - \omega_p^2 / \omega^2$, eta bigarrena plasmon-pole-a:

3.Taula: Ioi-helioddeen $^1P_1 \rightarrow ^1S_0$ transizioaren energia-lerrakuntza $\Delta E_0 = -(3/8) \pi \omega_p^2 / 2v$ unitatetan, $r_s=2$ dentsitaterako.

$Z_1=16, v=10.69$		
ΔE	ω_p	ω_q
(210)	0.912	1.16
(211)	1.27	1.33
$Z_1=16, v=5$		
ΔE	ω_p	ω_q
(210)	0.87	1.38
(211)	1.63	1.61
$Z_1=3, v=2$		
ΔE	ω_p	ω_q
(210)	2.84	3.09
(211)	2.58	2.70

$$\epsilon(q, \omega) = 1 - [\omega_p^2 / \omega(\omega + i\gamma)] \Theta(q_c - q) \quad (3.6)$$

non $\theta(x) = (1 + x/|x|)/2$ den eta γ konstante enpirikoak damping-a deskribatzen duen. Funtzio dielektriko honek plasmioen dispertsioa eta efektu mono-partikularrak hartzen ditu kontutan, hala ere, emaitzak oso antzerakoak dira funtzio dielektriko klasikoa erabiliz lortzen direnekiko. Bien arteko ezberdintzarik nabarmenenak abiadura eta karga txikietan azaltzen dira. Baina Bell-en esperimentuaren baldintzetarako gure teoriak datu esperimentalak ederki berrematen ditu.

ERREFERENTZIAK

1. J.M. Ziman; "Principles of the Theory of Solids", 2nd. Ed. (C.U.P., 1986)
2. M. Fleischmann, S. Pons; J. Electro. Anal. Chem. 261, 301 (1989); S.E. Jones, E.P. Palmer, J.B. Czirr, D.L. Decker, G.L. Jensen, J.M. Thorne and J. Rafelski, Nature (London), 338, 737 (1989)
3. Z. Sun and D. Tománek; Phys. Rev. Lett. 63, 58 (1989)
4. Ikus adibidez: L. Pauling and E.B. Wilson, "Introduction to Quantum Mechanics", (McGraw-Hill, New York, 1935)
5. P.W. Atkins "Molecular Quantum Mechanics", 2nd. Ed. (O.U.P., Oxford, 1983), p.254.
6. Neufeld J. and Ritchie R. H., 1955, Phys. Rev. 98, 1632.
7. Echenique P. M., Ritchie R. H. and Brandt W. 1979, Phys. Rev. B 20, 2567.
8. Echenique P. M., Flores F. and Ritchie R. H. 1988, Solid State Physics Series. nº 53 ; argitaratxeko.
9. W. Brandt, A. Ratkowski and R. H Ritchie , Phys. Rev. Lett. 33, 1329 (1974); 35, 130E (1975).
10. D. S. Gemmell, J. Remillieux, M. J. Gaillard, R. E. Holland and Z. Vager, Phys. Rev. Letters 34, 1420 (1975).
11. R. Laubert and F. K. Chen , Phys. Rev. Lett 40, 174 (1978).
12. S. Datz, C. D. Moak, O. H. Crawford, H. F. Krause, P. F. Dittner, J. Gomez del Campo, J. A. Biggerstaff, P. D. Miller, P. Hvelplund and H. Knudsen, Phys. Rev. Lett. 40, 843 (1978).
13. V. N. Neelavathi, R. H. Ritchie and W. Brandt, Phys. Rev. Lett. 33, 370, 640E (1974), 34, 560E (1975); P. M. Echenique and R. H. Ritchie Phys. Rev. B. 21, 5854 (1980).
14. P.M. Echenique and R.H. Ritchie, Elhuyar 7, 1 (1979).
15. R.H. Ritchie and P.M. Echenique, Israely Phys. Soc. 4,245 (1981), Phil. Mag. 45, 347 (1982).

16. A. Galindo and P.Pascual; "Mecánica Cuántica", Eudema Universidad, 1989, Madrid
17. B.I. Lundqvist, Phys. Status Solidi 32, 273 (1969).
18. J. M. Ugalde, C. Sarasola and P. M. Echenique, J. Phys. B 21, L 415 (1988).
19. D.H. Jakubassa, J. Phys. C, 10, 4491 (1977)
20. Bell F., Betz H. D., Panke H. and Stehling W., 1976, J. Phys. B 9, L 443.
21. F. Bell, H.D. Betz, H. Panke, W. Stehling; J.Phys.B9,L443 (1976)

ESKERTZA

Egileak Donostiako Informatika Kalkulu-Zentroko pertsonala eskertzea nahi luke, lan hau burutzeko behar izan diren kalkuloak egiteko eskeini dioten laguntza eta asistentziagatik. Baita ere, Pedro M. Etxenike Profesorearen laguntza oso da eskertzekoa; eta egileak hala ager bedi nahi du. Azkenik esan, lan hau ezin izango zela egin Eusko Ikaskuntzak emandako laguntza barik.

ERASKINA

Laguntza honi esker artikulua hauek argitaratu dira:

- 1.- "Dynamic Screening of He-like ions"
J.M. Ugalde, C.Sarasola and P.M. Echenique
Journal of Physics B:Atom.Mol.Opt.Phys.,21,(1989),L415
- 2.- "Dynamic screening of swift hydrogen-like ions moving in condensed matter"
J.L. Minchola, J.M. Ugalde and P.M. Etxenike
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B48,(1990) 21-24
- 3.- "Can electronic screening effect enhance nuclear fusion rates?"
J.M. Ugalde and P.M. Echenique
Journal of Physics B:Atom.Mol.Opt.Phys.,00,(1990),L000