



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

Pérdida de energía por ionización de blancos metálicos

Tesis presentada para optar al título de Doctora de la Universidad de Buenos Aires en el área de Ciencias Físicas

Licenciada Jesica Paola Peralta

Directora de Tesis: Dra. Claudia Montanari

Consejera de Estudios: Dra. Laura Estrada

Lugar de trabajo: Instituto de Astronomía y Física del Espacio, UBA-CONICET

Buenos Aires, 24 de junio de 2025

Índice general

Resumen	IV
Abstract	V
Agradecimientos	VI
1. Introducción	1
1.1. La pérdida de energía de iones en materiales	1
1.2. Propuesta y organización de esta tesis	6
2. Modelos previos	9
2.1. Modelos de poder de frenado en el gas de electrones libres	10
2.1.1. Formalismo dieléctrico de Lindhard y Mermin	11
2.1.2. Modelo no perturbativo SPCC	13
2.2. Modelo SLPA para el poder de frenado de los electrones internos. . .	14
2.3. Modelos relativistas de estructura atómica	16
3. La función dieléctrica de Levine-Mermin para las capas ligadas	21
3.1. Introducción	21
3.1.1. Propuesta del modelo SLPA-LM	23
3.2. Secciones eficaces de poder de frenado total	26
3.3. Resultados y discusión	27
3.3.1. Poder de frenado de los elementos pertenecientes al período 6	29
3.3.2. Poder de frenado de los elementos pertenecientes al grupo VI .	31

3.4. Conclusiones	33
4. Pérdida de energía de protones en lantánidos, la importancia de la capa 4f	39
4.1. Cálculos del poder de frenado	42
4.1.1. Estructura Atómica y electrones de valencia	42
4.1.2. Pérdida de energía	50
4.1.2.a. El poder de frenado del FEG	50
4.1.2.b. El poder de frenado de los electrones ligados	51
4.2. Resultados y discusión	51
4.2.1. Lantano	52
4.2.2. Cerio	53
4.2.3. Praseodimio	55
4.2.4. Neodimio	58
4.2.5. Prometio	60
4.2.6. Samario	62
4.2.7. Europio	64
4.2.8. Gadolinio	66
4.2.9. Terbio	68
4.2.10. Disprosio	70
4.2.11. Holmio	72
4.2.12. Erbio	74
4.2.13. Iterbio	76
4.2.14. Lutecio	78
4.2.15. Reglas de escala	81
4.3. Conclusiones	82
5. La contribución de los electrones de la capa d al poder de frenado de los metales de transición	85
5.1. Modelo no perturbativo para los electrones d débilmente ligados	88
5.2. Características de los metales de transición estudiados en este capítulo	90
5.3. Resultados de pérdida de energía en metales de transición	92

5.3.1.	Metales de los grupos 10 y 11	92
5.3.1.a.	Poder de frenado en la región de bajas energías . . .	94
5.3.1.b.	Poder de frenado en un rango de energía extendido .	101
5.3.2.	Metales de transición del grupo 8, el caso del hierro	109
5.4.	Conclusiones	113
Publicaciones		117
Apéndices		118
Bibliografía		132

Pérdida de energía por ionización de blancos metálicos

El objetivo de esta tesis consiste en desarrollar nuevos modelos teóricos que permitan mejorar los cálculos de la pérdida de energía de iones en sólidos, en un amplio rango de energías. Trabajamos con blancos metálicos multielectrónicos (metales de transición, lantánidos, entre otros) debido a su complejidad atómica, las contradicciones entre resultados teóricos y experimentales, y su aplicación tecnológica. Entre los modelos formulados se incluye un modelo perturbativo desarrollado para mejorar el formalismo de la *Shellwise Local Plasma Approximation* (SLPA), incorporando en él un tiempo finito de decaimiento a través del formalismo de Levine-Mermin. Este modelo también nos permitió estudiar los lantánidos, para los cuales realizamos un análisis minucioso del aporte de la capa $4f$ en el poder de frenado. Finalmente, calculamos la pérdida de energía en metales de transición con los electrones de la capa d compartidos entre la banda de conducción y la primera capa ligada. En este caso, se desarrolló un modelo no perturbativo tipo cuasi-gas de electrones con un perfil de velocidades inhomogéneo (atómico). Estos avances permitieron una descripción más precisa de la pérdida de energía por ionización en sistemas complejos

Palabras claves: Pérdida de energía, Potencia de frenado, Ionización de átomos, Electrones

Energy loss due to ionization of metallic targets

The objective of this thesis is to develop new theoretical models to improve the calculations of the energy loss of ions in solids over a wide range of energies. We worked with multi-electronic metallic targets (transition metals, lanthanides, among others) due to their atomic complexity, the contradictions between theoretical and experimental results, and technological applications. Among the formulated models, we include a perturbative model developed to improve the formalism of the *Shellwise Local Plasma Approximation* (SLPA), incorporating a finite decay time through the Levine-Mermin formalism. This model also allowed us to study the lanthanides, for which we performed a detailed analysis of the contribution of the $4f$ shell to the stopping power. Finally, we calculated the energy loss in transition metals with the d electrons shared between the conduction band and the first bound shell. In this case, a non-perturbative model was developed, resembling a quasi-electron gas with an inhomogeneous (atomic) velocity profile. These advances allowed a more accurate description of energy loss by ionization in complex systems.

Key words: Energy loss, Stopping power, Ionization of atoms, Electrons.

Agradecimientos

Pienso que esta sección debería ser la más larga de la tesis, porque hay muchas personas a las que debo agradecer. Sin embargo, cuando pienso en los cuatro años del doctorado, hay una persona que inevitablemente ocupa el primer lugar en mi recuerdo, alguien con quien compartí y recorrí todo ese camino. No solo fue mi directora o tutora, sino que también fue como una segunda mamá, amiga y colega. Por ser todo eso y más, quiero darle las gracias a la directora de esta tesis, Claudia. Gracias por todo su tiempo y esmero en este trabajo, gracias por haber estado siempre a mi lado, trabajando de par a par y creyendo en mí. Aún recuerdo cuando la vi por primera vez y le dije: “Quiero hacer un doctorado, pero tengo un hijo y una vida un tanto complicada”, y ella lo ignoró totalmente y me dijo: “Cuando te recibas, comenzamos el doctorado”. Gracias por hacerme sentir que, aun estando en una ciudad tan grande, donde no conocía a nadie, lo tenía todo, porque nunca me sentí sola. Siempre supe que, si me pasaba algo, al otro día llegaba a la oficina y tenía a alguien con quien desahogarme. Me sentí muy orgullosa de que, cuando me preguntaban quién era mi directora, me respondieran: “¡Qué bueno, es la mejor!”. Y sí, definitivamente es la mejor.

También, quiero agradecer a quién yo llamo “la jefecita” pero no precisamente porque me dé órdenes, sino más bien porque me encantaría seguir sus pasos. Le tengo profunda admiración y, en estos años, no solo fue mi compañera, sino también mi amiga. Gracias, Ale, porque mucho de lo que aprendí fue gracias a vos. Agradezco profundamente a Jorge Miraglia y a Darío Mitnik por los trabajos compartidos y por su predisposición a ayudarme siempre. A todo el grupo de Dinámica Cuántica, al cual espero volver a pertenecer muy pronto.

Me gustaría darle las gracias a mi consejera de estudios, Laura Estrada, por todo

su acompañamiento.

Quiero agradecer a todas las personas que forman parte del hermoso instituto que es el IAFE (incluyendo a Laura y Daniel, que ya no están, pero a quienes recordaré con mucho cariño), por que siempre me hicieron sentir a gusto, y en especial al grupo de mis chicas: gracias por las charlas, asados y tortas compartidas.

Este trabajo no hubiera sido posible sin el derecho a la educación pública, por lo que doy gracias a la Educación Pública de Argentina y a la Universidad de Buenos Aires por haberme permitido completar mis estudios de posgrado y por los amigos ganados. También agradezco a la Agencia Nacional de Promoción de la Investigación, el Desarrollo Tecnológico y la Innovación, y al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), quienes apoyaron financieramente este trabajo.

Con todo mi amor, agradezco a mi hijo, que ha sido mi compañero constante, acompañándome con su ternura y fortaleza, y dándome siempre el aliento para no bajar los brazos. Gracias a mi mamá y a mi papá, que desde donde esté me da las fuerzas para lograr todo lo que me propongo. Gracias a mi hija del corazón, a mis cuatro hermanos y a mis sobrinos por su compañía de siempre.

A mis amigos y amigas, que después de algo tan duro como el doctorado, sobrevivieron pocos, pero los mejores. Porque, aunque no lo crean, muchas veces me salvaron con tan solo un mensaje. Gracias a una personita muy especial, el Dr. M.M., quien, a pesar de la distancia, me acompañó a lo largo de todo el doctorado con mucho cariño y optimismo.

Gracias a Fiori, por haber elegido el mejor camino para mí cuando me dijo: “Te voy a decir con quién tenés que hacer el doctorado”.

En fin, gracias a quienes me he olvidado nombrar y a todos los que contribuyeron en esta trayectoria tan especial para mí.

A Thiago y Mía

Capítulo 1

Introducción

1.1. La pérdida de energía de iones en materiales

El poder de frenado es la cantidad de energía perdida por unidad de trayectoria que sufre una partícula cargada al atravesar un material. Existen dos mecanismos principales de pérdida de energía: el *frenado nuclear*, que se debe a colisiones elásticas del proyectil con núcleos atómicos, y el *frenado electrónico* (*electronic stopping power*), resultado de interacciones inelásticas con los electrones del material. Estos dos procesos ocurren simultáneamente durante la desaceleración del proyectil dentro y sobre la superficie del material [1]. En el presente trabajo nos centramos solo en el poder de frenado electrónico, el cual predomina a altas velocidades del proyectil, cómo se muestra en el ejemplo de la Fig. 1.1.

El conocimiento de las secciones eficaces de pérdida de energía es fundamental para el estudio de la física básica (potenciales de interacción, estructura atómica y molecular, estado de carga del proyectil) pero principalmente por sus diversas aplicaciones prácticas: análisis de materiales por iones [3], rangos de penetración en implantación iónica, modificación de materiales, daño por radiación [4] tanto cuando quieren evitarse daños en la pared de un Tokamak [5] o de equipos en un satélite [6], como cuando se aprovecha el daño por la energía que depositan los iones en

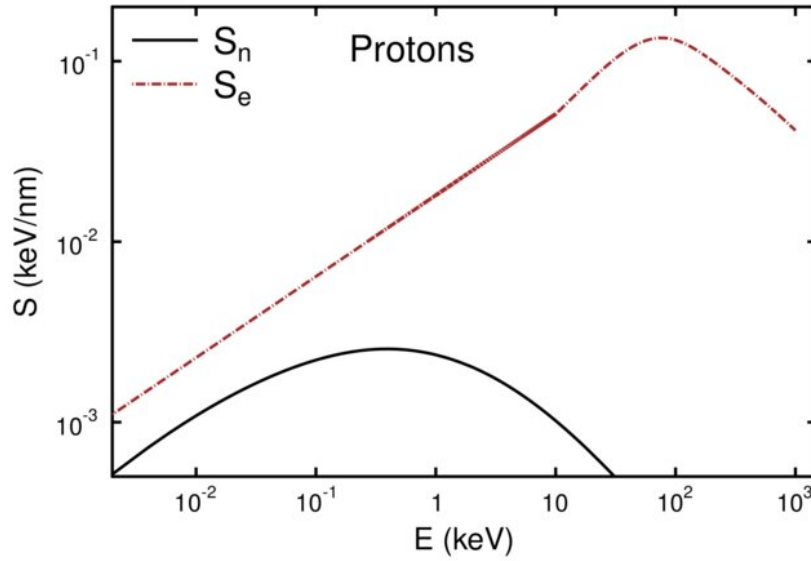


Figura 1.1: Comparación del poder de frenado nuclear y electrónico (S_n y S_e) de protones en silicio [2], según lo obtenido a partir del modelo estándar ZBL implementado en el código SRIM.

un tumor en el tratamiento de cáncer por iones a través de protonterapia [7][8]. Los datos de cómo va perdiendo energía un ión en un medio son incluidos en códigos Monte Carlo (MC) multipropósito [9–13] utilizados desde física nuclear, a aplicaciones médicas, o evaluación de ensayos no destructivos. Su cálculo implica la determinación de probabilidades de transición de los electrones del blanco a cualquier estado distinto del inicial como resultado de la transferencia de energía del ión.

En el poder de frenado electrónico tienen lugar diferentes procesos inelásticos de los electrones del blanco, tales como excitación o ionización. En estos procesos, el ion proyectil transfiere parte de su energía a los electrones, es decir, pierde energía por colisión. Las probabilidades de estos eventos y la energía media que pierde el ion proyectil en las colisiones múltiples que se dan al atravesar el medio, se encuadran en el estudio del poder de frenado o *stopping power*.

Como se mencionó, el poder de frenado (*stopping power*) se define como la pérdida media de energía dE por unidad de longitud dx que experimenta un ion de carga Z_P y velocidad v al propagarse a través de un medio, por lo cual lo denotamos como

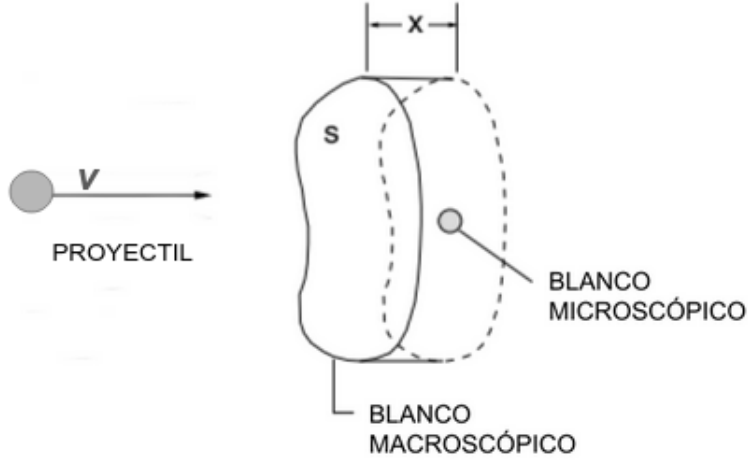


Figura 1.2: Definición estadística de una sección eficaz [1].

dE/dx , podemos verlo graficamente en la Fig. 1.2. Por otro lado, la sección eficaz de frenado (*stopping cross section*), es la sección eficaz de pérdida de energía, S . La relación entre ambos conceptos está dada por

$$dE/dx(v) = n_a S(v) \quad (1.1)$$

siendo n_a la densidad atómica del blanco. A lo largo de esta tesis vamos a usar como sinónimos *poder de frenado*, *fuerza de frenado* y *valor medio de pérdida de energía*, especificando si es por unidad de camino o como sección eficaz. Por motivos históricos dentro del desarrollo de este tema, estos nombres se han utilizado casi indistintamente [1].

La sección eficaz de pérdida de energía se calcula como

$$S(v) = \int d\mathbf{q} \int \omega P(\mathbf{q}, \omega) d\omega \quad (1.2)$$

donde de $P(\mathbf{q}, \omega)$ es la probabilidad de que el ion transfiera momento $\mathbf{q}$ y energía ω a los electrones del medio.

Distintas aproximaciones se han desarrollado para describir la pérdida de energía

de iones en medios sólidos o gaseosos, desde los trabajos pioneros de Bethe [14, 15] y Bohr [16] hasta la actualidad. Las teorías abarcan desde los modelos de gas de electrones libres [17–22], a modelos colisionales, de gran precisión como la teoría funcional de la densidad (DFT) [23] y la teoría funcional de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT), por ejemplo para los blancos considerados en esta investigación [24–31]). Los cálculos TDDFT de pérdida de energía son quizás los cálculos más completos, pero muy exigentes en lo computacional, y con limitaciones en el número de electrones activos que pueden incluirse, por lo cual cubre la región de bajas energías y algunos llegan hasta el máximo de *stopping*.

Por otro lado se encuentran los modelos colisionales binarios (el ión y un electrón activo en un potencial que representa el apantallamiento del resto de los electrones), tales como los modelos de onda distorsionada [32, 33], la teoría binaria de Sigmund y Schinner [34, 35], la *Unitary Convolution Approximation* (UCA) de Grande y Schiwietz [36, 37], entre otros. Cabe mencionar que los dos últimos modelos tienen sus resultados en códigos de uso libre online (Casp6.0 [38] y DPASS21.06 [39], respectivamente).

Desde un enfoque completamente distinto se encuentra el formalismo dieléctrico cuántico, que es un modelo de muchos cuerpos que describe la respuesta del conjunto de electrones al paso del proyectil a partir de su densidad. Este formalismo incluye no solo los procesos colisionales binarios (procesos inelásticos de un electrón) sino también procesos colectivos de los electrones del medio (apantallamiento entre electrones, excitaciones colectivas o plasmones, apantallamiento dinámico del ion). Distintos modelos se han desarrollado dentro del formalismo dieléctrico a partir de los trabajos pioneros de Lindhard [19, 40, 41] y Ritchie [17], las evoluciones y mejoras posteriores [20, 42–44], hasta algunos desarrollos más recientes [45–48] que prueban la vigencia y alcance de los mismos. Algunas reseñas sobre los modelos de *stopping power* en general pueden encontrarse en [1, 21, 49].

Como mencionamos, a lo largo de la tesis trabajamos con modelos perturbativos y no perturbativos. Los modelos perturbativos suponen que el proyectil (ión incidente, carga Z_P) interactúa débilmente con el conjunto Z_T de electrones del medio. Por eso, se puede tratar la interacción como una pequeña perturbación sobre el sistema

cuando $Z_P \ll Z_T$ y cuando la velocidad del proyectil es alta. Una característica de los modelos perturbativos es que se asume que el sistema responde linealmente (proporcionalmente al campo aplicado por el proyectil) por lo cual las probabilidades dependen del cuadrado de la carga del proyectil, Z_P^2 . En cambio los modelos no perturbativos, al no asumir una respuesta lineal incluyen todos los órdenes en la dependencia con la carga del proyectil Z_P , e incluso pueden distinguir las colisiones con cargas negativas, por ejemplo protones y antiprotones. Estos modelos son válidos aún cuando la perturbación introducida por el proyectil sea fuerte $Z_P \geq Z_T$ y las velocidades sean bajas.

Todas las aproximaciones mencionadas tienen diferentes rangos de energía donde son válidas, o limitaciones en el número de electrones activos a considerarse, siendo el rango de bajas energías y la zona del máximo de *stopping power* regiones muy sensibles y complejas de describir. Persisten discrepancias entre las descripciones teóricas y los datos experimentales [50–52], principalmente debido a la complejidad inherente al estudio de pérdida de energía en materiales, pues es un problema de muchos cuerpos, multicolisional y con amplitud de estados finales a considerar.

Además de los desarrollos teóricos mencionados, existen códigos empíricos y semiempíricos, de acceso libre, para predecir la sección eficaz de pérdida de energía de iones en blancos [53–59]. Entre ellos, SRIM [53, 54] es el más utilizado, con un promedio de 78000 bajadas al año (últimos 10 años), y 270 entradas diarias en 2024. Los valores de SRIM están incluidos en la mayoría de códigos MC que describen el paso de iones en materiales, ya que permite predecir la pérdida de energía para cualquier combinación ion y blanco, aún moléculas complejas, utilizando la regla estequiométrica de Bragg [60]. Sin embargo, han surgido evidencias de sus limitaciones en comparación con nuevos datos experimentales [52], en particular para lantánidos y metales de transición [61–66], óxidos [67, 68], carburos y nitruros [69–71].

La compilación de datos experimentales de stopping de la International Atomic Energy Agency (IAEA) [72] es la principal fuente a nivel mundial de datos experimentales de frenado electrónico de iones en materiales, incluyendo desde los primeros datos de partículas alfa en materiales de Roseblum en 1928 [73]. Los datos experimentales para los distintos iones y blancos, tanto atómicos como moleculares,

gaseosos, sólidos o líquidos, son comparados en todos los casos con los resultados de SRIM. La modernización reciente de la base de datos de IAEA corrió el velo de la gran necesidad de nuevos datos experimentales y descripciones teóricas, así como de los acuerdos y discrepancias entre ambos [52]. Los nuevos materiales y sus aplicaciones, así como la hadronterapia para cáncer basada en los principios del *stopping power* exigen precisión y conocimiento detallado de este tema, y son un desafío para su estudio.

1.2. Propuesta y organización de esta tesis

Como se ha mencionado, a pesar de todos los desarrollos teóricos para calcular la pérdida de energía de iones en sólidos ya mencionados, todavía muchos temas siguen abiertos. Las aplicaciones mencionadas requieren de valores confiables de secciones eficaces de poder de frenado, tanto en blancos atómicos como moleculares, lo cual moviliza la investigación continua en este tema. Esta tesis tiene por objetivo la descripción de la pérdida de energía en procesos inelásticos de blancos metálicos multielectrónicos, como los metales de transición más pesados o como las tierras raras, utilizando protones como proyectiles e involucrando blancos policristalinos, donde no se observan efectos de channelling debido a la desorientación de los granos cristalinos. Las tierras raras son de importancia estratégica por su aplicación en alta tecnología, medicina y en la transición energética [74–77], lo que las convierte en un recurso clave a nivel global. En Argentina se han identificado yacimientos de diversas tierras raras, incluyendo lantano, cerio, praseodimio, neodimio, samario, escandio e itrio [74].

Para poder avanzar en la descripción de estos blancos más complejos se dieron pasos previos, que consistieron en el estudio de los modelos existentes, sus alcances y también sus limitaciones (Capítulo 2). Se trabajó a partir del formalismo dieléctrico cuántico para las capas internas de electrones a través de la aproximación de plasma local por capas (SLPA, *shellwise local plasma approximation*) [45, 78], ya que permite incluir todas las capas y abarcar hasta las energías más altas, incluyendo

apantallamiento entre electrones y respuesta colectiva más allá de la aproximación de electrón independiente. Sin embargo, el modelo SLPA [45, 78] produce una sobreestimación clara en la región de alta energía al utilizarse en blancos con muchas capas ligadas [79, 80]. Esto representaba un problema para el cálculo de *stopping power* de los metales de transición pesados como Ta, W, Pt o Au, y los lantánidos. El primer paso fue revisar los fundamentos del modelo SLPA [45] y del formalismo dieléctrico de Lindhard [40] y Mermin [20] buscando mejorar la SLPA para describir la contribución de los electrones ligados. El análisis y la mejora obtenida se describen en el Capítulo 3. Se testó la nueva propuesta en metales del grupo 6 y período 6 de la tabla periódica de elementos. Este trabajo dio lugar a la publicación [81]. El estudio sistemático de la pérdida de energía en los 15 lantánidos fue uno de los objetivos de esta Tesis por el desafío teórico que representan los blancos cuya estructura atómica es relativista con la capa $4f$ de electrones como subvalencia, y por sus aplicaciones ya mencionadas. El estudio de los mismos y los resultados obtenidos se presentan en el Capítulo 4 y en la publicación [82] y contribuyeron también en [52]. Finalmente, en el Capítulo 5 se detalla el desarrollo de un modelo no perturbativo para calcular la pérdida de energía por la capa "d" (subvalencia) de electrones de metales de transición y se analiza la controversia acerca del "quiebre" de la dependencia lineal del *stopping power* con la velocidad a bajas energías de impacto. A primer-orden, el modelo de FEG predice una dependencia lineal del stopping power con la velocidad de impacto, asociándola con la fricción de un cuerpo moviéndose en un fluido [83]. Modelos más detallados [24, 28, 29, 84] muestran pequeñas fluctuaciones en la esperada pendiente. Se exploraron los metales de transición de los últimos grupos, 10 y 11, de la tabla periódica. Se sumó el testeo del modelo en el caso de hierro por su importancia propia y su interés como componente principal del acero. Estos resultados son parte de dos publicaciones recientes [85, 86].

TABLA PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

GRUPO
1 **IA** 2 **IIA** 3 **IIIB** 4 **IVB** 5 **VB** 6 **VIB** 7 **VIIIB** 8 **VIIIB** 9 **VIIIB** 10 **IB** 11 **IB** 12 **IIB** 13 **IIIA** 14 **IVA** 15 **VA** 16 **VIA** 17 **VIIA** 18 **VIIIA**

PERIODO
1 2 3 4 5 6 7

MASA ATÓMICA RELATIVA (1)
NÚMERO ATÓMICO
SÍMBOLO
NOMBRE DEL ELEMENTO

ESTADO DE AGREGACIÓN (25 °C)
Ne - gaseoso Fe - sólido
Hg - líquido Tc - sintético

GRUPO IUPAC
GRUPO CAS

Metales **Semimetales** **No metales**
Metales alcalinos Metales alcalinotérreos Elementos de transición Lantánidos Actinidos
Anfígenos Halógenos Gases nobles

CAPÍTULO 3 (Group 6)
CAPÍTULO 4 (Lanthanides)
CAPÍTULO 5 (Iron)

LANTANÍDOS
57 La 58 Ce 59 Pr 60 Nd 61 Pm 62 Sm 63 Eu 64 Gd 65 Tb 66 Dy 67 Ho 68 Er 69 Tm 70 Yb 71 Lu

ACTINÍDOS
89 Ac 90 Th 91 Pa 92 U 93 Np 94 Pu 95 Am 96 Cm 97 Bk 98 Cf 99 Es 100 Fm 101 Md 102 No 103 Lr

(1) Atomic weights of the elements 2013, Pure Appl. Chem., 88, 265-291 (2016)

Copyright © 2017 Eni Generalis

Figura 1.3: Blancos metálicos estudiados en cada capítulo de esta Tesis señalados sobre la Tabla Periódica de elementos. En rojo se indican los del grupo 6 y período 6 (Capítulo 3), en naranja los lantánidos (Capítulo 4) y en amarillo los metales de transición con la capa *d* casi llena y el Fe (Capítulo 5).

El esquema de los blancos estudiados en los Capítulos 3 a 5 se representa en la Figura 1.3. En cada capítulo se puso a prueba el desarrollo del capítulo anterior y se incorporaron los nuevos desarrollos. Finalmente, en el Capítulo 5.4 se presentan las conclusiones generales y los posibles caminos de continuidad.

A lo largo de esta Tesis utilizaremos unidades atómicas (ver el Apéndice A para detalles) en todas las ecuaciones, desarrollos teóricos y tablas. Por motivos de uso en la publicaciones del tema, las figuras de secciones eficaces de pérdida de energía se presentarán en $\text{eV cm}^2/\text{atom}$ y la energía en keV.

Capítulo 2

Modelos previos

En este capítulo se resumen los modelos ya existentes que contribuyeron al desarrollo de esta Tesis. Como se estudió la pérdida de energía de iones en sólidos metálicos, nos enfocamos en las aproximaciones que tratan a los electrones de conducción como un gas de electrones libres (FEG por sus siglas en inglés, *free electron gas*), y en modelos para describir la ionización de los electrones internos, es decir, las capas ligadas. Estos modelos fueron:

i) el formalismo dieléctrico de Mermin-Lindhard [20], que describe la interacción del ion con el FEG dentro de la aproximación de respuesta lineal, incluyendo excitaciones binarias y colectivas (Sección 2.1.1).

ii) el modelo de potencial apantallado con condición de cúspide [84] (SPCC por sus siglas en inglés, *screened potential with cusp condition*), que es un modelo colisional binario no-lineal para describir el frenado de un proyectil moviéndose en un FEG utilizando un potencial cuyo apantallamiento depende de la velocidad del ion (Sección 2.1.2)

iii) la SLPA [45] que utiliza el formalismo dieléctrico para describir la ionización de los electrones ligados del metal a partir de su densidad local centrada en el núcleo blanco. Como toda aproximación dentro del formalismo dieléctrico, la SLPA incluye procesos binarios y colectivos si los hay, y apantallamiento entre electrones de la misma energía de ligadura. Pero es una aproximación lineal, es decir, que es

válida dentro del límite perturbativo. Una síntesis de este modelo se presenta en la sección 2.2.

En todo este trabajo consideramos que el hidrógeno en metales pierde su único electrón en pocas colisiones debido al apantallamiento de los electrones de conducción. Este apantallamiento del núcleo de hidrógeno por el gas de electrones libres hace que el estado ligado de un electrón a un protón sea muy improbable [18, 87, 88]. Es decir, estamos considerando al hidrógeno en los metales, directamente como protón.

2.1. Modelos de poder de frenado en el gas de electrones libres

La pérdida de energía de iones que se desplazan a través de un gas de electrones libres es un tema fundamental en física de la materia condensada y en la física de plasmas. En metales es razonable considerar que los electrones de conducción del metal como un gas de electrones libres, no interactuantes entre sí, sometidos a un potencial constante a lo largo de todo el metal [89, 90]. Este modelo fue propuesto por Sommerfeld en 1928 incorporando el modelo estadístico cuántico de Fermi de 1927 que considera a los electrones en un gas de Fermi de cierta densidad n_e , donde ocupan estados hasta una energía característica o energía de Fermi, $E_F = 1/2 (3\pi^2 n_e)^{2/3}$ de manera que se verifique el principio de exclusión de Pauli (cada estado con energía $E < E_F$ es ocupado por 2 electrones, uno con cada spin). La función distribución en momento k de los electrones a temperatura 0 propuesta por el modelo de Fermi es una donde $\Theta(k_F - k)$ representa la función escalón de Heaviside, definida como 1 si $k < k_F$ y 0 en caso contrario. El número de electrones por átomo que forman parte de la banda de conducción, N_e , es un dato importante del metal ya que $n_e = N_e n_a$. Tanto N_e , como n_a son datos externos al modelo de FEG. Otro parámetro característico muy utilizado para describir el FEG es su radio de Seitz r_S o radio medio por electrón, donde $n_e = 1/(\frac{4}{3}\pi r_S^3)$.

Como ya se mencionó, son muchos los modelos posibles para describir la pérdida de energía en colisiones inelásticas del ion con el FEG. Una revisión muy detallada

se encuentra en el trabajo de Echenique y colaboradores [21]. En esta investigación hemos elegido trabajar a partir del formalismo dieléctrico cuántico dentro de la aproximación de Lindhard y Mermin [19, 20] por su capacidad para incluir la respuesta colectiva de los electrones, que resulta fundamental a energías intermedias (alrededor del máximo de *stopping power*). Pero este modelo es perturbativo, de respuesta lineal, y por lo tanto exacto en el límite de altas velocidades. En cambio, a bajas energías de impacto, donde no hay posibilidad de excitar plasmones, utilizamos el modelo colisional-binario no-perturbativo SPCC que ha demostrado describir muy bien resultados de stopping no solo en protones sino también en antiprotones [84].

2.1.1. Formalismo dieléctrico de Lindhard y Mermin

En la década de 1950 Lindhard y colaboradores [19, 40, 41] ampliaron la descripción de la respuesta del gas de electrones libres a la perturbación externa introduciendo el formalismo dieléctrico cuántico. Matemáticamente, la función de respuesta de Lindhard, $\chi(\mathbf{q}, \omega)$, considera la interacción entre el ion y una densidad homogénea de electrones cuyo estado es descripto por ondas planas. La función dielectrica propuesta por Lindhard depende del vector de momento transferido $\mathbf{q}$ y de la energía transferida o su equivalente, la frecuencia ω ($E = \omega$ en unidades atómicas). Esta función describe cómo la densidad de electrones en el gas responde a la perturbación generada por el ion. La relación entre la perturbación externa y la densidad inducida n_{ind} se expresa como

$$n_{\text{ind}}(\mathbf{q}, \omega) = \chi(\mathbf{q}, \omega) V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega) \quad (2.1)$$

donde V_{ext} es el potencial externo generado por el ion. La propuesta del formalismo dieléctrico consiste en definir la función dieléctrica, $\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)$, que relaciona el potencial externo con el potencial total en el sistema de tal manera que

$$V_{\text{total}}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{V_{\text{ext}}(\mathbf{q}, \omega)}{\varepsilon(\mathbf{q}, \omega)}. \quad (2.2)$$

A partir de la relación entre el potencial total y la densidad inducida se puede demostrar que

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi}{q^2} \chi(\mathbf{q}, \omega). \quad (2.3)$$

Lindhard derivó la expresión de la función dieléctrica cuántica, $\varepsilon_L(\mathbf{q}, \omega)$ en un gas de electrones libres a temperatura cero dentro de la aproximación de respuesta lineal, dada por

$$\varepsilon_L(\mathbf{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi}{q^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{f(\mathbf{k}) - f(\mathbf{k} + \mathbf{q})}{\omega + E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k} + \mathbf{q}) + i\eta} d\mathbf{k}, \quad (2.4)$$

donde $f(\mathbf{k})$ es la función de distribución de Fermi (una función escalón $f(\mathbf{k}) = 1$ si $E(\mathbf{k}) \leq E_F$, y 0 en caso contrario), $E(\mathbf{k}) = \frac{k^2}{2}$ es la energía de un electrón con momento $\mathbf{k}$, y η es un pequeño parámetro positivo que asegura la correcta interpretación de la función en el plano complejo (técnicamente, un límite que tiende a cero).

A partir del potencial apantallado de la ecuación (2.2) con la $\varepsilon_L(\mathbf{q}, \omega)$ de la ecuación (2.4) se obtienen dentro de este formalismo las probabilidades $P(\mathbf{q}, \omega)$ de que el ion de carga Z_P y velocidad $\mathbf{v}$ transfiera energía ω y momento $\mathbf{q}$ al FEG, y la pérdida de energía (ecuaciones (1.1)-(1.2)). La expresión para la pérdida de energía por unidad de longitud dentro del formalismo dieléctrico [19] es

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{2Z_P^2}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dq}{q} \int_0^{qv} \omega d\omega \operatorname{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon(q, \omega)} \right] \quad (2.5)$$

La ecuación 2.5 evalúa cómo las excitaciones colectivas (plasmones) e individuales de electrones del medio (a través de $\operatorname{Im}[-1/\varepsilon(q, \omega)]$ o *energy loss function* (ELF)) contribuyen a la pérdida de energía del ion. Por otro lado, a partir de la ELF se puede describir la forma ondulatoria de la densidad de electrones inducida alrededor del ion [43], con una frecuencia de oscilación característica $\omega_p = \sqrt{4\pi n_e}$ o frecuencia de plasmón. La respuesta colectiva del FEG, o excitación de plasmones es un fenómeno de energías intermedias y altas. A partir del formalismo dieléctrico se puede demostrar [88] que la velocidad mínima para excitar plasmones es

$$v_p = v_F \left(1 + \frac{1}{\sqrt{3\pi} v_F} \right), \quad (2.6)$$

con $v_F = (3\pi^2 n_e)^{1/3}$ la velocidad de Fermi del FEG.

En la deducción de la ecuación (2.4) Lindhard postula que el gas de electrones es un sistema en equilibrio perfecto donde la fracción de electrones que colisionan por unidad de tiempo es infinitesimal y no hay efectos disipativos, es decir, en el modelo de Lindhard las excitaciones colectivas de electrones o plasmones se comportan como osciladores perfectos con tiempo de vida infinito. Mermin [20] propuso refinamiento a la respuesta dieléctrica de Lindhard que incluye una probabilidad de colisión por unidad de tiempo Γ *no infinitesimal*, también conocido en la literatura como *damping*. La respuesta de Mermin suaviza y amplía la parte imaginaria de la función dieléctrica, da lugar a una densidad de electrones inducida menos ligada al ion [91], y describe muy bien las ELF experimentales [92, 93], de donde se puede obtener el valor de Γ experimental que mejor describe cada blanco. Todas estas características confluyen en una mejor la predicción del *stopping power* en comparación con los datos experimentales, especialmente en la región del máximo. Más detalles sobre la función dieléctrica de Mermin se incluye en el desarrollo del Capítulo 3.

2.1.2. Modelo no perturbativo SPCC

El modelo no-perturbativo propuesto en [84] considera un ion de carga Z_P y velocidad v moviéndose en un FEG caracterizado por una densidad n_e y un radio de Seitz r_S . La interacción proyectil-electrón está representada por un potencial central apantallado dependiente de v y de r_S , dado por

$$V(r) = -\frac{Z_P}{r} (V_1 e^{-\mu_1 r} + V_2 e^{-\mu_2 r}), \quad (2.7)$$

donde los parámetros $V_{1,2}$, $\mu_{1,2}$ son funciones de v , r_S [84] y un parámetro libre $\alpha(v)$ que se ajusta velocidad a velocidad de tal manera que se verifique la condición de cúspide para la densidad inducida de electrones $n_i(r)$ cerca del ion,

$$-2Z = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\frac{d}{dr} n_i(r)}{n_i(r) + n_e}. \quad (2.8)$$

La sección-eficaz de pérdida de energía debido al FEG dentro del formalismo colisional binario se expresa en términos de la sección eficaz de transporte [94],

$$S_{FEG}(v) = \frac{2}{(2\pi)^3 n_a} \int d\vec{p} \theta(p - p_F) v_r \frac{\vec{v}_r \cdot \vec{v}}{v} \sigma_{tr}(v_r), \quad (2.9)$$

donde $\vec{v}_r = \vec{v} - \vec{p}$ es la velocidad relativa, $\vec{p}$ es el momento de los electrones del FEG, $\theta(p - p_F)$ es la función escalón de Heaviside, la cual representa la distribución de Fermi en el modelo de FEG homogéneo, $p_F = v_F$ es el momento de Fermi, y $\sigma_{tr}(v_r)$ es la sección eficaz de transporte.

Este modelo es colisional binario, no incluye excitaciones colectivas, plasmones, del FEG. Como ya se mencionó, las excitaciones de plasmones son posibles a partir de cierta velocidad mínima v_p dada por la ecuación (2.6). A bajas velocidades de impacto la energía transferida no es suficiente para estas excitaciones colectivas de los electrones [88], y los modelos colisionales binarios describen bien la respuesta del FEG.

2.2. Modelo SLPA para el poder de frenado de los electrones internos.

La aproximación SLPA [45, 79, 80] describe la respuesta de los electrones de las capas ligadas del blanco debida a la interacción con un ion proyectil. Este modelo se apoya en el formalismo dieléctrico cuántico, en el cual el potencial apantallado del ion y la respuesta inelástica (que incluye cualquier estado final distinto del inicial) se expresa en términos de una función dieléctrica que depende del momento y la energía transferidos a los electrones del blanco. El formalismo dieléctrico considera una densidad de electrones que se apantallan entre sí y responden al paso del ion tanto en forma binaria (electrón-hueco) como colectiva (apantallamiento dinámico, excitación de plasmones). Dentro de este formalismo, la SLPA considera capas independientes, es decir, supone que los electrones de una misma energía de ligadura E_j responden como una sola densidad de electrones $\rho_j(r)$, siendo $\rho_j(r) = |\phi_j(r)|^2$, $\phi_j(\vec{r})$ la función

de onda radial de los electrones del orbital j .

La SLPA tiene una expresión general para los diferentes momentos de orden t de la pérdida de energía de un ion desnudo de carga Z_P que se mueve a velocidad v en la nube atómica de electrones de subcapa j :

$$S_j^{(t)} = \frac{2}{\pi v^2} \int_0^\infty Z_P^2 \frac{dk}{k} \int_0^{kv} \omega^t \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon_j(k, \omega)} \right] d\omega, \quad (2.10)$$

donde $t = 0$ corresponde a la sección eficaz de ionización, $t = 1$ a la sección de pérdida de energía, y $t = 2$ a la dispersión cuadrática media de la pérdida de energía. En los tres casos el modelo SLPA ha dado buenos resultados [95–98] dentro del limite perturbativo.

La propuesta distinta de la SLPA incluye tomar en cuenta la energía de ligadura de los electrones E_j además de la dependencia local de la densidad e integrar en todo el espacio. Esto lo hace considerando la variante de Levine [99] a la función dieléctrica de Lindhard [19]. Así, la parte imaginaria de la inversa de la función dieléctrica en la ecuación (2.10) se expresa como:

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon_j(k, \omega)} \right] = \int \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon^{\text{LL}}(k, \omega; \rho_j(r), E_j)} \right] d\mathbf{r}, \quad (2.11)$$

con ε^{LL} la función dieléctrica de Levine–Lindhard (LL) introducida en la Ref. [100] por primera vez en la SLPA. Los únicos datos de entrada acerca del blanco para este modelo son las energías de ligadura de los electrones E_j , y su densidad alrededor del núcleo blanco ρ_j . Levine incluyó explícitamente el gap de energía dentro de la función dieléctrica de Lindhard de manera de respetar la regla de suma,

$$\text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon^{\text{LL}}(k, \omega; \rho_j(r), E_j)} \right] = \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon_L(k, \omega_g)} \right] \Theta(\omega - |E_j|), \quad (2.12)$$

donde $\varepsilon_L(q, \omega)$ es la función dieléctrica de Lindhard, $\Theta(x)$ es la función escalón de Heaviside, y $\omega_g = \sqrt{\omega^2 + E_j^2}$.

En cuanto a los límites de alta energía, una densidad local implica una frecuencia

de plasmon local $\omega_p(r) = \sqrt{4\pi \rho_j(r)}$, como fué introducida por Lindhard y Scharff [19]. Es notable que proporcionar la densidad local de electrones $\rho_j(r)$, que verifica el número de ocupación correspondiente $N_j = \int \rho_j(r) dr$, permite que la SLPA cumpla con los límites de alta energía de la función dieléctrica utilizada, y tienda correctamente al límite de Bethe [15, 80]. Además, la SLPA verifica capa a capa las reglas fundamentales como la regla de suma,

$$\int_0^\infty \omega \operatorname{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon_j(k, \omega)} \right] d\omega = 2\pi^2 n_a N_j. \quad (2.13)$$

La descripción de capas independientes permitió al modelo SLPA extender la descripción del poder de frenado a energías intermedias, abarcando el máximo de *stopping power*.

Sin embargo cuando se empleó la SLPA en blancos con muchas capas de electrones ligados como W, Au, Bi [79, 80], se encontró una sobreestimación en la zona de energías de impacto 1–5 MeV, que se repitió en distintos blancos. Mediciones recientes en tungsteno [62] confirman estas diferencias. Este problema limitaba el cálculo de stopping en blancos como los metales de transición más pesados (período 6 en la Figura 1.3) y en los lantánidos, que son blancos que incluyen la capa 4*f* abierta. Por otro lado, los metales de transición de los últimos grupos, 8–11 (ver Figura 1.3), se caracterizan por una banda de conducción *s–d* y electrones remanentes *d* débilmente ligados. Esto es indicio de electrones ligados *d* contribuyendo a la pérdida de energía a velocidades de impacto chicas, fuera del límite perturbativo en el cual es válida la SLPA. Es decir, se requiere el desarrollo de un modelo no-perturbativo alternativo a la SLPA para la contribución de las capas ligadas. Estos temas abiertos fueron tomados como motivadores de esta Tesis y desarrollados en los Capítulos 3 a 5.

2.3. Modelos relativistas de estructura atómica

Esta sección sintetiza brevemente los trabajos sobre el cálculo relativista de estructura atómica [80, 101, 102] del grupo en el cual desarrollé la Tesis. Los resultados de estos cálculos fueron empleados en este trabajo para el cálculo de la mayoría de

los blancos considerados, desde Pd y Ag en adelante.

Las funciones de onda Hartree-Fock (HF) de Clementi-Roetti [103] o Bunge [104] abarcan átomos con carga $Z \leq 54$. Este límite se debe a que los efectos relativistas en las funciones de onda son importantes para átomos con mayor carga nuclear. Incluso para átomos con $Z \sim 40$ (Pd, Ag) las funciones de onda y las energías de ligadura mejoran (comparadas con los valores experimentales de energías) si se utilizan soluciones de estructura atómica completamente relativistas.

La descripción de los estados atómicos relativistas se obtiene resolviendo el Hamiltoniano de Dirac para muchos electrones,

$$H = H' + H_{\text{Breit}}(i, l) + H_{\text{QED}}, \quad (2.14)$$

donde $H_{\text{Breit}}(i, j)$ es el término de Breit y H_{QED} considera efectos de electrodinámica cuántica, y

$$H' = \sum_i \left[h_i^{\text{D}} - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{i < l} \frac{1}{r_{il}}, \quad (2.15)$$

con h_i^{D} es el hamiltoniano de una partícula de Dirac, y los otros términos en (2.15) corresponden a las interacciones nucleo-electrón y electrón-electrón.

El código HULLAC [105] es un paquete de programas diseñados para calcular estructura atómica resolviendo numéricamente la ecuación de Dirac. Dentro de este paquete, el código RELAC calcula energías y funciones de onda a primer orden perturbativo a través del método de potencial paramétrico relativista central, $U(r_i)$. El Hamiltoniano H' puede escribirse como un término no perturbado

$$H_0 = \sum_i h_i^{\text{D}} + U(r_i), \quad (2.16)$$

más un término de primer orden perturbativo

$$H_1 = \sum_{i < l} \frac{1}{r_{il}} - \sum_i \left[\frac{Z}{r_i} + U(r_i) \right], \quad (2.17)$$

donde los índices i, l indican los electrones atómicos. En la ecuación (2.17) el término de Breit y de QED son agregados a las energías como un segundo orden perturbativo.

El potencial paramétrico $U(r_i)$ describe en forma simple el apantallamiento de la distribución de carga y se obtiene minimizando la configuración de energías a primer orden. Se minimizan distintas configuraciones reunidas por energías similares y la misma paridad (*mixed configurations*) permitiendo de esa forma tomar en cuenta efectos de correlación. El valor medio de cualquier operador $\hat{A}$ es dado por

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_0^\infty [P^*(r) \hat{A} P(r) + Q^*(r) \hat{A} Q(r)] dr \quad (2.18)$$

donde $P(r)$ y $Q(r)$ son las componentes de las funciones débiles y fuertes de la función de onda, respectivamente. Para los orbitales relativistas, usamos la notación $nl\pm$, donde $\pm$ hace referencia a $l \pm 1/2$.

Los efectos de la configuración de interacción varían según el átomo descripto. Por ejemplo, en los metales de transición la capa nd se está llenando. La configuración del estado fundamental de estos elementos es del tipo $nd^a (n+1)s^b$, donde a y b es el número de electrones en cada orbital. Los electrones nd y $(n+1)s$ tienen energías de ligadura parecidas. Por lo cual configuraciones $nd^a (n+1)s^2$, $nd^{a+1} (n+1)s^1$, and nd^{a+2} tendrán energías comparables. Como estas configuraciones tiene la misma paridad, deben estar incluidas en los cálculos de *mixed configurations*.

En las Figuras 2.1 y 2.2 se muestra un ejemplo de los resultados relativistas y no relativistas para la plata. Este caso con $Z = 47$ está en el límite de validez del cálculo no-relativista. Es interesante en la Figura 2.1 la comparación de las funciones $4d$ donde casi no hay diferencia entre los distintos cálculos. Notemos también que el resultado relativista incluye la función fuerte y la débil, así como la separación por el acoplamiento del spin $\pm 1/2$. Por otro lado, en la Figura 2.2 vemos que las energías son más sensibles al cálculo relativista que las funciones de onda. Puede notarse que hasta la capa M, las energías de ligadura relativista y no relativistas acuerdan muy bien (difieren menos de 5 %) entre sí y con los valores experimentales. Para $4s$ y $4p$ ya pasa de 10 % a 25 %, con los resultados relativistas en claro mejor acuerdo con los experimentos. En cambio, para la misma subcapa $4d$ que las funciones de onda son tan parecidas, las energías de ligadura de Bunge y Hullac difieren casi en 100 %. Como los valores experimentales de Williams [106] son para Ag sólida, no hay datos para la capa $4d$. Esto es común para todos los metales de transición, pues todos o

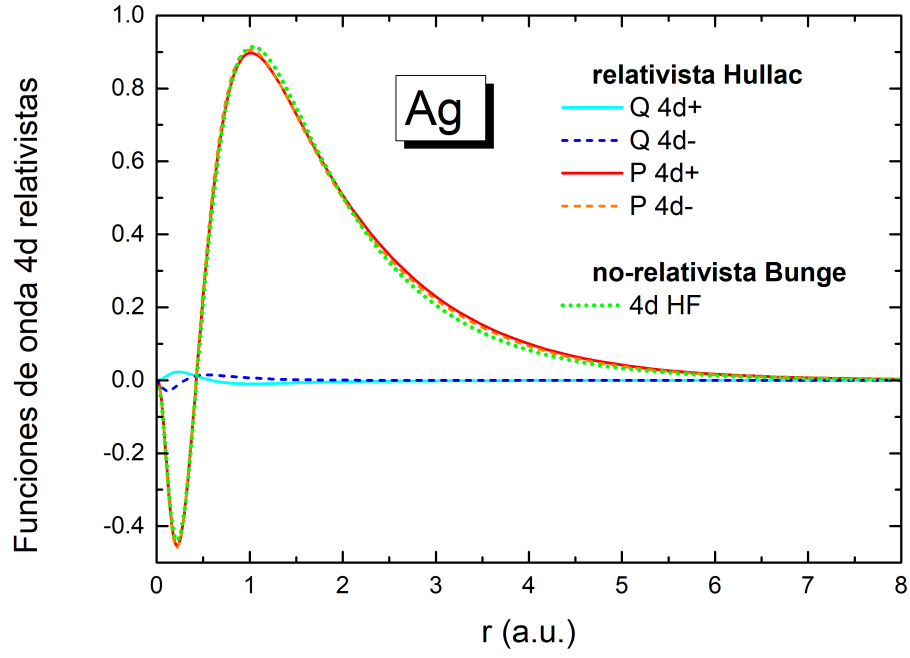


Figura 2.1: Funciones de onda de la capa $4d$ de Ag en función de r . Comparación entre los resultados relativista de Hullac (onda fuerte P y débil Q para $4d+$ y $4d-$) y resultados HF no-relativista de Bunge [104]. En la notación se uso $4d\pm$ para los orbitales con spin $\pm 1/2$.

algunos de los electrones d son parte del FEG.

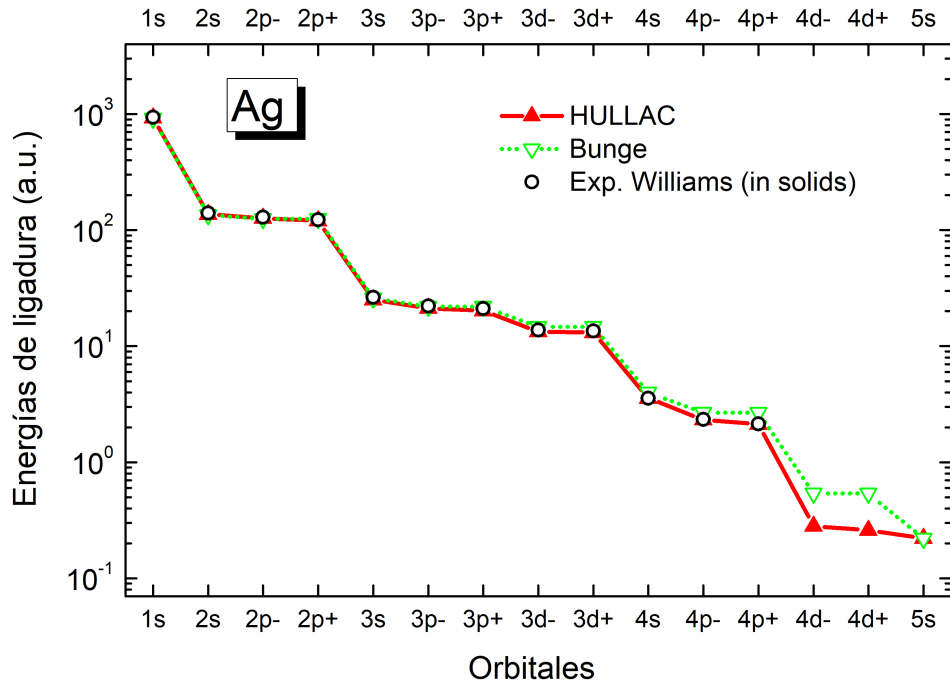


Figura 2.2: Energías de ligadura de las capas de Ag. Resultados relativistas HULLAC y HF no-relativista de Bunge [104]. En la notación se uso $nl\pm$ para los orbitales con spin $\pm 1/2$. Se incluyen las energías experimentales de Ag en la compilación de Williams [106].

Capítulo 3

La función dieléctrica de Levine-Mermin para las capas ligadas

3.1. Introducción

Como se explicó en la sección 2.2, el modelo SLPA describe la contribución de las capas internas de electrones a la pérdida de energía, incluyendo todas las capas, aún la capa K. Sin embargo, se encontró un problema intrínseco del modelo SLPA original [79, 80, 100] que sobreestimaba la contribución de las capas internas. Esto no se observaba en blancos con pocos electrones, pero sí en los casos de blancos multielectrónicos como W, Hf o Ta que incluyen la capa $4f$.

La SLPA es un modelo que toma como punto de partida la propuesta de Lindhard [19] considerando una respuesta dieléctrica local (en función de la distancia al núcleo blanco). Como se explica en la sección 2.1.1, la función dieléctrica de Lindhard describe al medio como un gas ideal que oscila colectivamente en respuesta al potencial del ion, y estas oscilaciones tienen un tiempo de vida media infinito, sin amortiguación o *damping*, $\Gamma = 0$. Esta aproximación es válida, por ejemplo, para conductores como el aluminio con un pico de plasmon muy localizado y de ancho pequeño, tal como lo de-

TABLA PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

GRUPO 6

PERIODO 6

LANTANÓIDOS

ACTINÓIDOS

(1) Atomic weights of the elements 2013, Pure Appl. Chem., 88, 265-291 (2016)

Copyright © 2017 Eni Generali

Figura 3.1: En rojo se indican los Blancos metálicos del grupo 6 y período 6 estudiados en este capítulo

muestra su ELF experimental [93]. Pero no es buena aproximación para la respuesta del FEG de la mayoría de los metales. Nos preguntamos entonces sobre la SLPA y el uso de la respuesta dieléctrica de Lindhard para las capas de electrones ligados. Es razonable pensar que la respuesta de estos electrones incluya amortiguación, y que esta sea mayor cuanto mayor sea la densidad de electrones $\rho(r)$. Sin embargo, el modelo SLPA había probado su efectividad para blancos hasta Mo ($Z = 42$) [78]. La nueva propuesta no podía ser sólo para los blancos más pesados sino repensar la Física de la respuesta electrónica general del modelo SLPA. Así que el cambio en el modelo implicaba una revisión de los resultados previos también.

En lo que sigue mostraremos la propuesta de incluir un tiempo de vida medio finito en la SLPA a través de la función dieléctrica de Mermin (SLPA-LM) y un *damping* local, $\Gamma(r)$ relacionado con la densidad local $\rho(r)$. Se verá que la incorporación de un mecanismo de amortiguamiento local para la respuesta colectiva de los electrones ligados en el material mejora significativamente los resultados de *stopping power* para elementos multielectrónicos ($Z > 50$). Sin embargo, estas correcciones son despreciables para materiales con pocas capas de electrones ligados. Esto se analizó considerando metales pesados como Hf, Ta y W que son elementos del período 6 de la tabla periódica (señalados en la Figura 3.1). Por otro lado, se reevaluaron metales del grupo 6 (Figura 3.1) como Cr y Mo, sobre los cuales se habían obtenido buenos resultados con la SLPA original [78].

Este avance de la SLPA-LM, junto con el análisis de diversos materiales y números atómicos, fue un primer paso crucial para avanzar en el estudio sistemático del poder de frenado de los lantánidos y postlantánidos de esta Tesis.

3.1.1. Propuesta del modelo SLPA-LM

Como se mencionó en la sección 2.2, la función dieléctrica local utilizada en la SLPA es la función de Levine-Lindhard dada por la ecuación 2.12. La SLPA cumple las reglas de suma, lo cual asegura el límite a grandes velocidades. Sin embargo en la zona donde las capas internas dominan la pérdida de energía, este modelo sobreestima los datos experimentales.

La SLPA describe a los electrones de las capas ligadas como un gas de electrones libres con una densidad local y una energía de ionización. Se propuso incorporar un amortiguamiento o tiempo de relajación finito considerando una descripción más real de la respuesta electrónica. Se revisó la función dieléctrica de Mermin [20], quien a través de un desarrollo cuántico de primer orden incluye electrones que evolucionan en el tiempo como partículas libres en presencia de un potencial electrostático, pero con una probabilidad de colisión por unidad de tiempo Γ . Esta propuesta representa un refinamiento de la función dieléctrica de Lindhard al considerar el tiempo promedio entre colisiones dt , dado por $dt/\tau = \Gamma dt$. La expresión obtenida por Mermin para el FEG [20] es:

$$\varepsilon_M(q, \omega) = 1 + \frac{(1 + i/\omega\tau)(\varepsilon_L(q, \omega + i/\tau) - 1)}{1 + (i/\omega\tau)(\varepsilon_L(q, \omega + i/\tau) - 1)/(\varepsilon_L(q, 0) - 1)}, \quad (3.1)$$

donde $\varepsilon_M(q, \omega)$ y $\varepsilon_L(q, \omega)$ son las funciones dieléctricas de Mermin y Lindhard, respectivamente. La función dieléctrica dada por la ecuación (3.1) verifica las siguientes propiedades:

- $\varepsilon_M(q, \omega = 0) = \varepsilon_L(q, \omega = 0)$, describiendo bien las oscilaciones de Friedel y el apantallamiento.
- Cuando $\tau \rightarrow \infty$ ($\Gamma \rightarrow 0$), entonces $\varepsilon_M(q, \omega) \rightarrow \varepsilon_L(q, \omega)$.
- Cuando $q \rightarrow 0$ (límite óptico), $\varepsilon_M(q, \omega)$ se aproxima a una función lorentziana centrada en $\omega = \omega_p$, con un ancho a mitad de altura Γ . Estos valores son observados experimentalmente en las ELF de los metales [93, 107].

Consideramos que incluir la función dieléctrica de Mermin en la SLPA mejora la descripción física de la respuesta de los electrones ligados. Ajustes de los valores empíricos de la ELF que involucran las capas internas de electrones (con valores finitos para Γ), han sido utilizados con éxito por Abril y colaboradores en el modelo MELF [77, 92], y más recientemente por Grande y colaboradores [108, 109]. Sin embargo, la expresión de una amortiguación teórica para cada subcapa j de electrones ligados requiere análisis y decisiones físicas.

Nos propusimos mantener la característica de la SLPA de ser un modelo completamente teórico, con expresiones generales para cualquier ion-blanco y sin parámetros externos. Siguiendo los supuestos de la SLPA, consideramos una densidad local de electrones $\rho_j(r)$ y una frecuencia de plasmón local $\omega_p(r)$. Es razonable considerar una amortiguación local $\Gamma_j(r)$, que aumenta donde la densidad de electrones es mayor. Equivalentemente, el tiempo local entre colisiones es mayor donde la densidad de electrones está más diluida. Basados en esto se propuso $\Gamma_j(r)$ como una fracción de $\omega_p(r)$,

$$\Gamma_j(r) = \frac{\omega_p(r)}{2} = \sqrt{\pi\rho_j(r)}. \quad (3.2)$$

La expresión general de $\Gamma_j(r)$ dependiente solo de la densidad de electrones de la capa permite mantener la característica de la SLPA, cuyas únicas entradas para caracterizar el blanco son las funciones de onda y las energías de ligadura en el estado fundamental.

A partir de esta propuesta, la parte imaginaria de la inversa de la función dieléctrica en la ecuación (2.10) se expresa como

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon_j(k, \omega)} \right] = \int \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon^{\text{LM}}(k, \omega; \rho_j(r), E_j, \Gamma_j(r))} \right] d\mathbf{r}, \quad (3.3)$$

con ε^{LM} la función dieléctrica de Levine-Mermin dada por

$$\text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon^{\text{LM}}(k, \omega; \rho_j(r), E_j, \Gamma_j(r))} \right] = \text{Im} \left[-\frac{1}{\varepsilon_{\text{M}}(k, \omega_g)} \right] \Theta(\omega - |E_j|), \quad (3.4)$$

donde $\varepsilon_{\text{M}}(q, \omega)$ es la función dieléctrica de Mermin de la ecuación (3.1). La función dieléctrica de Mermin verifica las reglas de suma y por lo tanto también la función de Levine-Mermin, como se explicó en la sección 2.2. Llamamos a este enfoque SLPA-LM y renombramos el que se empleó en publicaciones anteriores como SLPA-LL.

3.2. Secciones eficaces de poder de frenado total

Se testeó el modelo SLPA-LM, obteniendo los valores totales de poder de frenado y comparando con los datos experimentales. Para ésto se sumaron las contribuciones de cada subcapa de electrones ligados utilizando la SLPA-LM y la contribución del FEG. Para los electrones del FEG utilizamos los dos modelos diferentes explicados en el Capítulo 2: el formalismo dieléctrico de Lindhard y Mermin (sección 2.1.1) y el modelo colisional binario no-perturbativo SPCC (sección 2.1.2). Siguiendo [84], combinamos los dos modelos dependiendo de sus rangos de validez (no-perturbativo/perturbativo, binario/plasmones). Utilizamos el cálculo SPCC para velocidades de impacto $v \lesssim v_p$, con v_p dada por la ecuación (2.6), y el formalismo dieléctrico para velocidades mayores. Se revisó en cada casola convergencia de la curva SPCC a la de Mermin alrededor del máximo por debajo.

La sección eficaz total de frenado también puede expresarse en términos de un número adimensional de frenado L definido como

$$S(v) = \frac{4\pi Z_P^2 Z_T}{v^2} L(v), \quad (3.5)$$

donde Z_P y Z_T son las cargas del proyectil y del blanco, respectivamente, y v es la velocidad del proyectil. El número de frenado es una cantidad interesante para magnificar la región de altas energías, está relacionado con el conocido límite asintótico de Bethe en términos de la energía media de excitación I ,

$$\lim_{v \rightarrow \infty} L(v) = L_{\text{Bethe}}(v) = \ln\left(\frac{2v^2}{I}\right). \quad (3.6)$$

Consideramos que el número de frenado será útil para observar en detalle la región de alta energía, donde la contribución de las capas internas domina y el modelo SLPA-LM debería marcar una diferencia respecto de los cálculos SLPA-LL.

3.3. Resultados y discusión

Calculamos secciones eficaces totales de frenado de protones en diferentes blancos siguiendo dos direcciones de la tabla periódica de elementos: el periodo 6 (Hf, Ta, W) y el grupo VI (Cr, Mo, W), señalados en la figura 3.1. La elección de estos blancos tiene doble objetivo: i) Mostrar que el modelo SLPA-LM mejora sistemáticamente los valores de poder de frenado para metales de transición post-lantánidos al inspeccionar elementos del mismo periodo. ii) Probar que, para átomos más ligeros, los resultados obtenidos con el presente modelo no difieren significativamente de los resultados previos de la SLPA-LL, los cuales ya han demostrado ser efectivos [78], y que la importancia de considerar SLPA-LM en elementos de un mismo grupo aumenta con la cantidad de capas electrónicas de ese elemento.

Tabla 3.1: Parámetros del gas de electrones libres para Hf, Ta, W, Mo y Cr expresados en unidades atómicas: Z , número atómico; N_e , número de electrones por átomo en el FEG; r_S , radio de Wigner-Seitz; ω_p , frecuencia de plasmones; ω_p^{exp} y Γ^{exp} , frecuencia y ancho del pico de plasmones obtenidos de las Refs. [93, 107, 110]; y E_p , energía mínima de impacto para excitar plasmones en el FEG. Se emplean unidades atómicas, excepto E_p que está en keV.

Elemento	N_e	Z	r_s [a.u.]	ω_p [a.u.]	ω_p^{exp} [a.u.]	Γ_{exp} [a.u.]	E_p [eV]
Hf	4	72	2.07	0.578	0.58	0.17	38
Ta	5	73	1.80	0.718	0.72	0.12	49
W	6	74	1.62	0.842	0.89	0.25	59
Mo	6	42	1.61	0.846	0.90	0.15	60
Cr	6	24	1.48	0.965	0.94	0.04	70

La contribución del gas de electrones libres (FEG) depende de la cantidad de electrones en el FEG, N_e . Para los metales de transición Hf, Ta, W, Cr, Mo consideramos que todos los electrones de las últimas subcapas d y s son electrones de conducción [101]. Los valores N_e utilizados en los cálculos actuales se muestran en la Tabla 3.1, junto con otros valores obtenidos a partir de ellos tales como r_S , ω_p y E_p , la energía mínima de impacto para excitar plasmones. En la Tabla 3.1 también se incluyen valores experimentales para la frecuencia de plasmones ω_p^{exp} y el amortiguamiento Γ^{exp} ,

derivados de las propiedades ópticas de estos metales [93, 107, 110]. Se puede notar que ω_p^{exp} difiere, como máximo, un 6 % de la ω_p teórica, indicando que los valores de N_e considerados son correctos y que todos los electrones d de estos metales son parte del FEG. No tenemos un valor de Γ teórico para comparar con Γ^{exp} . La SPCC para el FEG a bajas energías de impacto y la SLPA-LM para los electrones ligados son cálculos completamente teóricos. Pero el cálculo de la contribución del FEG con la función dieléctrica de Mermin requiere del dato de Γ del blanco. Utilizamos los Γ^{exp} de la Tabla 3.1 en ese caso.

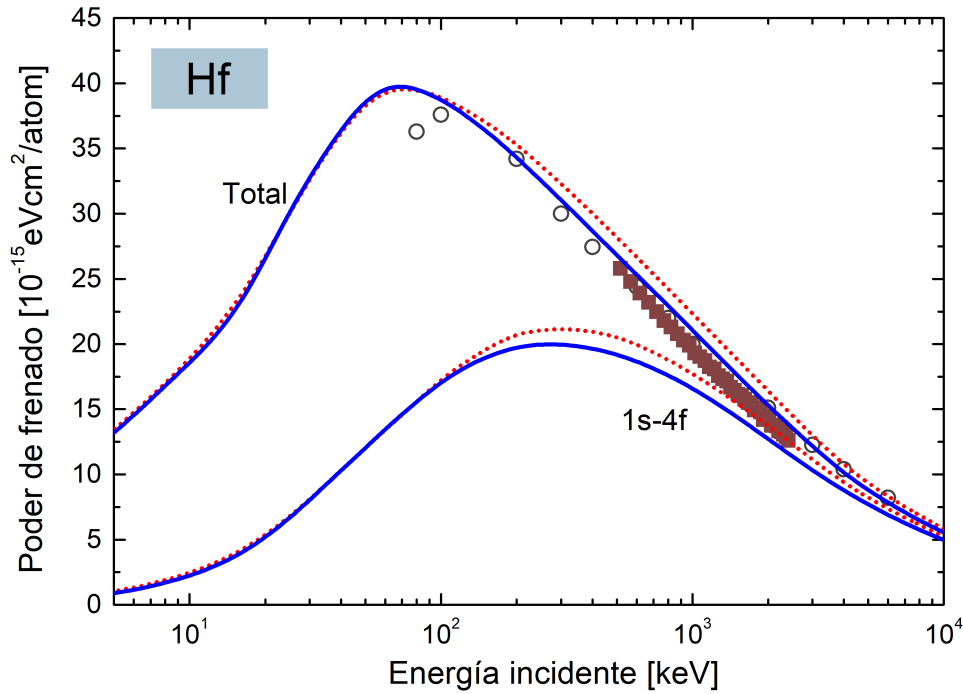


Figura 3.2: Sección eficaz de frenado de Hf para H. Curvas: línea sólida, resultados presentes utilizando SLPA-LM para los electrones ligados; línea punteada, resultados utilizando la SLPA-LL para los electrones ligados. Se indican los valores totales sumando FEG y capas ligadas (curvas más altas), y las contribuciones de las capas internas 1s-4f (curvas más bajas). Simbolos: datos experimentales $\circ$ [111], $\blacksquare$ [112].

3.3.1. Poder de frenado de los elementos pertenecientes al período 6

En esta sección, presentamos los resultados para las secciones eficaces de poder de frenado totales de Hf, Ta, W. Mostramos los resultados obtenidos, en las Figuras 3.2, 3.3 y 3.4. En estas figuras se incluyen las curvas totales y las contribuciones de los electrones ligados calculadas con el modelo SLPA-LM. Dentro de cada conjunto de curvas, incluimos además resultados previos obtenidos con la SLPA-LL. Se compara en cada caso con los valores experimentales compilados en la base de *stopping power* de IAEA [72], destacando las mediciones posteriores a 1990 con símbolos llenos y de colores, dejando los datos de más de 35 años en símbolos vacíos en gris.

En la Figura 3.2 se muestran los resultados obtenidos para Hf. La mejora que introduce la nueva propuesta SLPA-LM se observa claramente. Los nuevos resultados concuerdan muy bien con los experimentos de [111], mostrando una leve sobreestimación de los datos más recientes [112]. En las curvas SLPA-LM y SLPA-LL de las capas 1s-4f se puede observar la diferencia clara entre el modelo actual y el previo a partir de 100 keV.

La Figura 3.3 muestra los resultados para Ta. Los valores obtenidos con SLPA-LM muestran un muy buen acuerdo con los datos experimentales, en el rango medio y de alto de energía, destacando la descripción de datos recientes [63] alrededor del máximo que difieren bastante de los datos más antiguos. Para bajas energías se observa una diferencia entre las curvas obtenidas y los valores experimentales [61, 66]. En ese rango de energías, la contribución 1s-4f es muy pequeña, así que los resultados involucran exclusivamente al modelo SPCC.

En la Figura 3.4 se presentan los resultados de poder de frenado para W. Podemos notar que a bajas energías se describen muy bien los experimentos, aún con los publicados en [128] que son posteriores a nuestros cálculos [81]. Un trabajo de TDDFT publicado muy recientemente [31] concuerda sorprendentemente bien con nuestros resultados para energías $E \leq 30$ keV, describiendo los datos de [127] mejor que los de [62]. Estos resultados de TDDFT solo incluyen 26 electrones de W por lo cual quedan bajos alrededor del máximo de stopping. En el rango de altas energías,

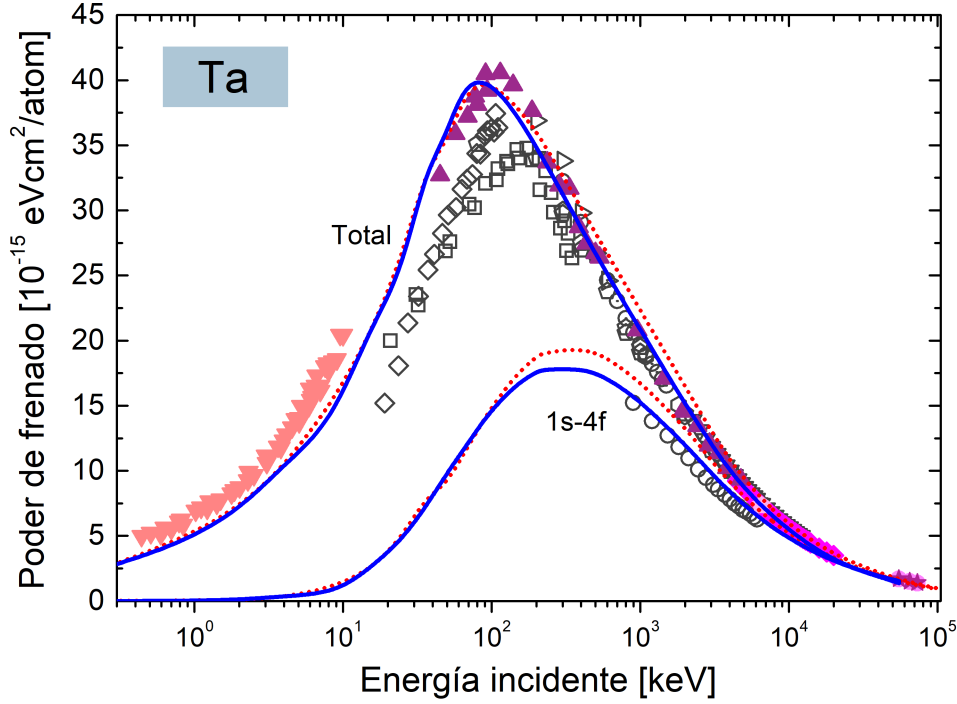


Figura 3.3: Sección eficaz de frenado de Ta para H. Curvas: como en la Figura 3.2. Símbolos: datos experimentales ◀ [66], ★ [113], ▼ [61], ▲ [63], ► [114], ◆ [115], ● [116], ● [117], ▷ [114], ○ [118], □ [119, 120], ◇ [121], ⊖ [122], ▽ [123], ⬠ [111], ⊙ [124], ⬡ [125], ◻ [126].

los resultados utilizando SLPA-LM concuerdan muy bien con los datos experimentales, mejorando los resultados SLPA-LL en [80]. Por otro lado, puede observarse que alrededor del máximo de stopping nuestros valores describen mejor los datos en [111] que mediciones más recientes en [62].

Para ampliar el análisis en la región de alta energía, se presentan los números de frenado de protones en Hf, Ta y W en las Figuras 3.5, 3.6 y 3.7, respectivamente, para energías 0,1 – 10 MeV. Como puede notarse en la ecuación (3.5), el número de frenado es proporcional al *stopping* por la energía de impacto, por lo cual estas figuras amplifican los resultados de altas energías, donde queremos ver en detalle la comparación entre los resultados con SLPA-LM y los experimentos. Las mejoras son

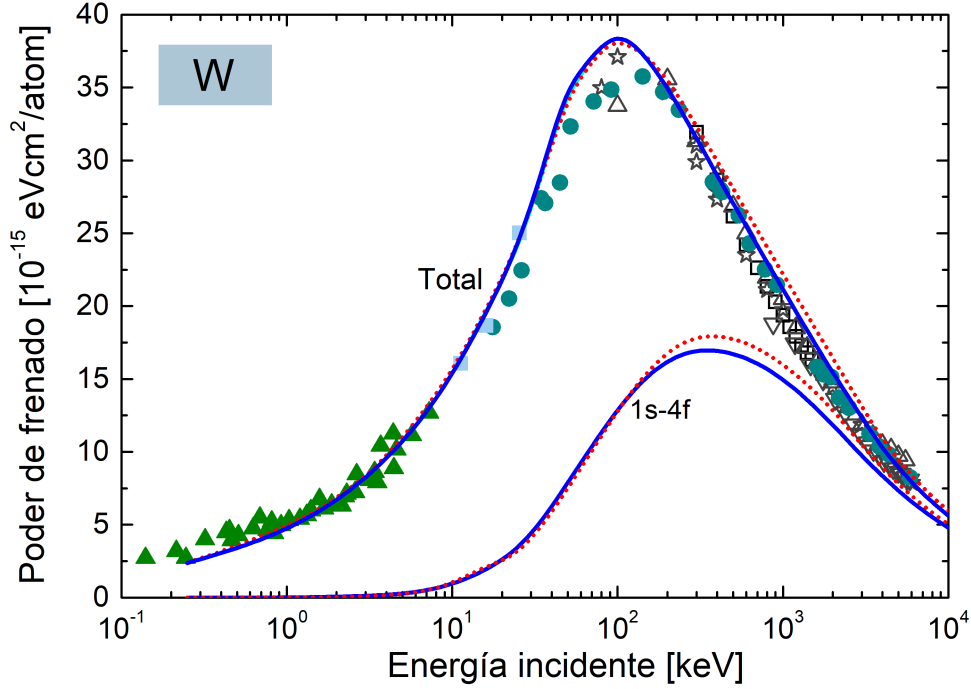


Figura 3.4: Sección eficaz de frenado de W para H. Curvas: como en la Figura 3.2. Simbolos: datos experimentales ■ [127], ▲ [128], ● [62], ☆ [111], □ [124], △ [129], ▽ [118].

evidentes en los tres casos, notándose sobre todo en Ta.

3.3.2. Poder de frenado de los elementos pertenecientes al grupo VI

Es importante corroborar que el modelo SLPA-LM sigue describiendo adecuadamente los buenos resultados SLPA-LL para átomos con menos capas de electrones ligados. Para ello, analizamos blancos con estructuras de valencia similares. Por ejemplo, Cr y Mo, que al igual que W pertenecen al grupo VI de la tabla periódica señalado en la Figura 3.1. Los resultados respectivos se presentan en las Figuras 3.8 y 3.9. Las diferencias entre los cálculos previos de SLPA-LL y los resultados actua-

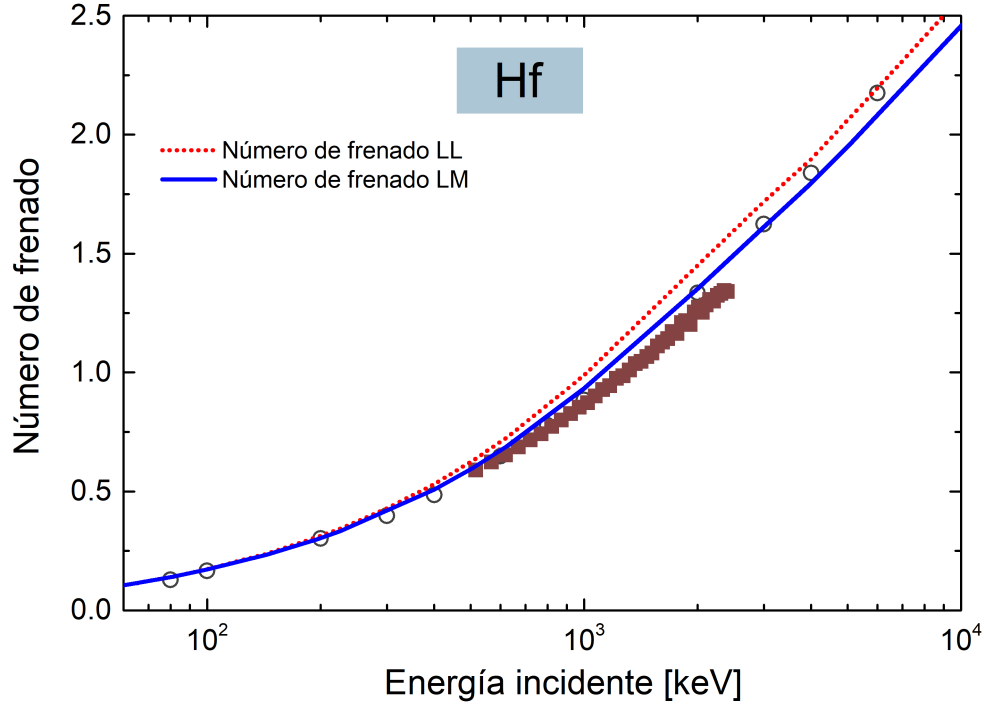


Figura 3.5: Número de frenado del Hf para H. Curvas y símbolos como en FIG. 3.2.

les de SLPA-LM son evidentes para las curvas de contribución de electrones ligados $1s - 3p$ de Cr y $1s - 4p$ de Mo. Pero los valores totales son similares; no obstante, la descripción de los datos experimentales por encima de 0.5 MeV mejora ligeramente respecto a los resultados previos.

Este detalle es amplificado en las Figuras 3.10 y 3.11 en las que se presenta el número de frenado de protones en Cr y Mo, respectivamente. El análisis en el régimen de altas energías revela que las diferencias introducidas por el modelo propuesto son relativamente pequeñas para elementos de bajo número atómico. Sin embargo, dichas diferencias siguen, en general, la tendencia correcta en comparación con los datos experimentales o con modelos previos.

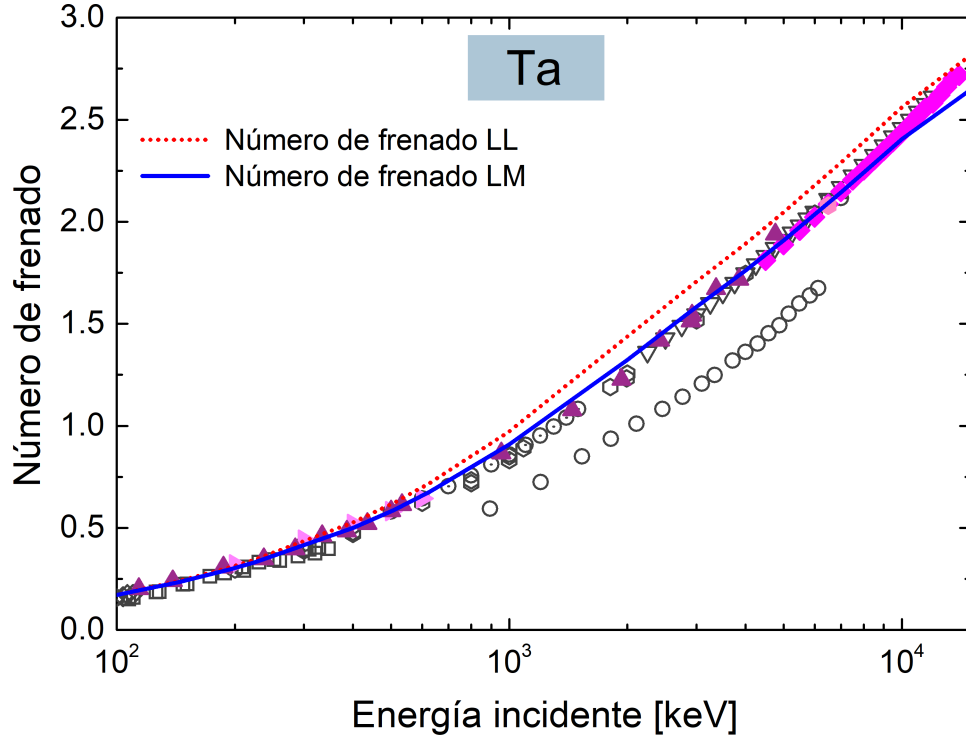


Figura 3.6: Número de frenado del Ta para H. Curvas y símbolos como en FIG. 3.3

3.4. Conclusiones

En esta sección, se discutió la importancia de considerar una descripción más realista de la respuesta de los electrones ligados, incluyendo un tiempo de decaimiento finito en la función dieléctrica, o equivalentemente, incluyendo un factor de amortiguamiento en las excitaciones colectivas. Introducimos esta característica utilizando la función dieléctrica Levine-Mermin en lugar de la función Levine-Lindhard empleada previamente. Incorporamos un factor de amortiguamiento dependiente de la densidad local de electrones alrededor de su núcleo blanco. De esta manera, el cálculo mantiene su característica de tener como únicas entradas la densidad y energía de ligadura teóricos de cada blanco. Al nuevo desarrollo lo denominamos SLPA-LM. La SLPA-LM disminuye la sobreestimación encontrada previamente para el poder de

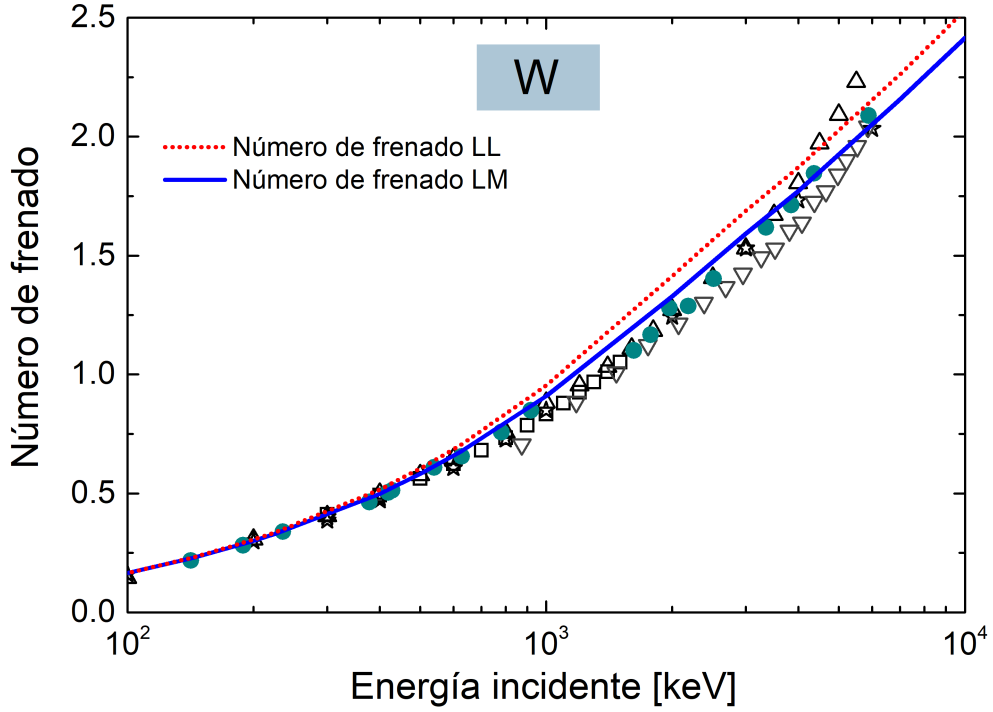


Figura 3.7: Número de frenado del W para H. Curvas y símbolos como en FIG. 3.4.

frenado en blancos multielectrónicos en la región de los MeVs. Esta mejora casi no afecta los resultados para blancos con menos electrones ligados. El avance logrado nos permite continuar con el estudio de la pérdida de energía de protones en blancos que incluyen la capa $4f$ de electrones.

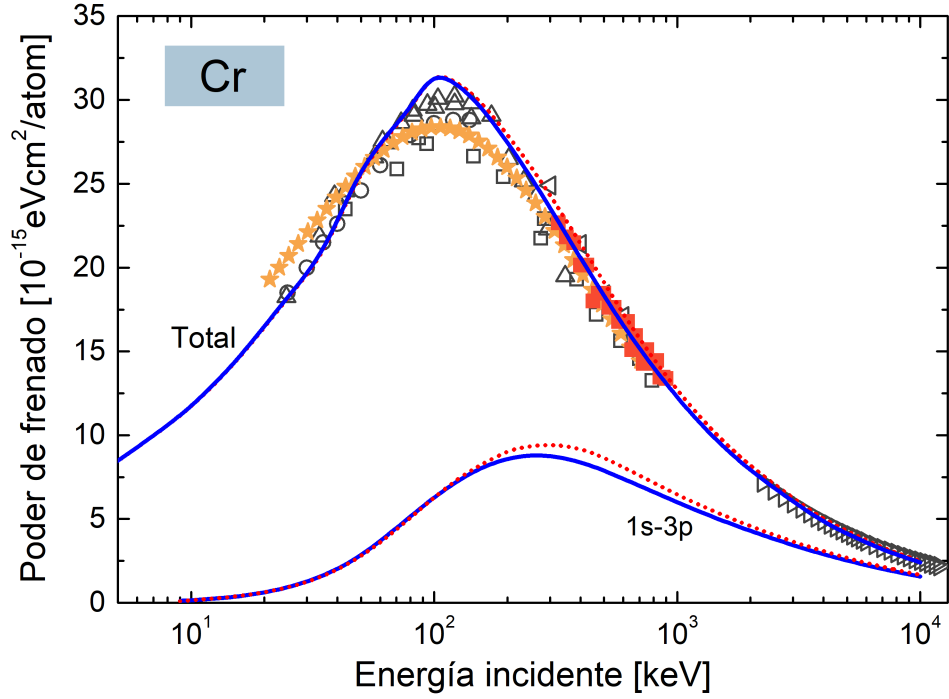


Figura 3.8: Sección eficaz de frenado del Cr para H. Curvas: línea sólida, resultados presentes utilizando SLPA-LM para electrones ligados; línea a trazos, resultados utilizando SLPA-LL para electrones ligados. Datos experimentales: símbolos, se utilizan símbolos llenos de color para destacar los datos posteriores a 1990 y con símbolos vacíos datos precedentes; ■ [65], ★ [130], ○ [131], □ [132], △ [133, 134], ▷ [135], ◁ [114].

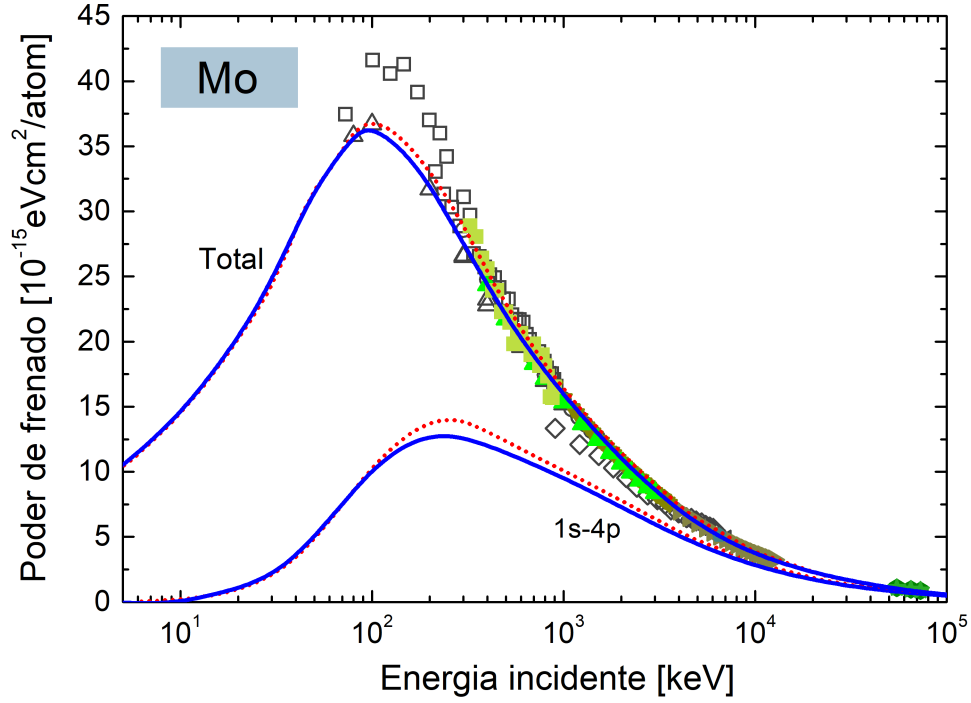


Figura 3.9: Sección eficaz de frenado de Mo para H. Curvas: línea sólida, resultados presentes utilizando SLPA-LM para electrones ligados; línea a trazos, resultados utilizando SLPA-LL para electrones ligados. Datos experimentales: símbolos, se utilizan símbolos llenos de color para destacar los datos posteriores a 1990 y con símbolos vacíos datos precedentes; ■ [65], ★ [113], ▼ [136], ▲ [137], ► [115], ● [117], ● [116], ○ [124], □ [138], △ [111], ◇ [118], ⊖ [126], ◁ [122].

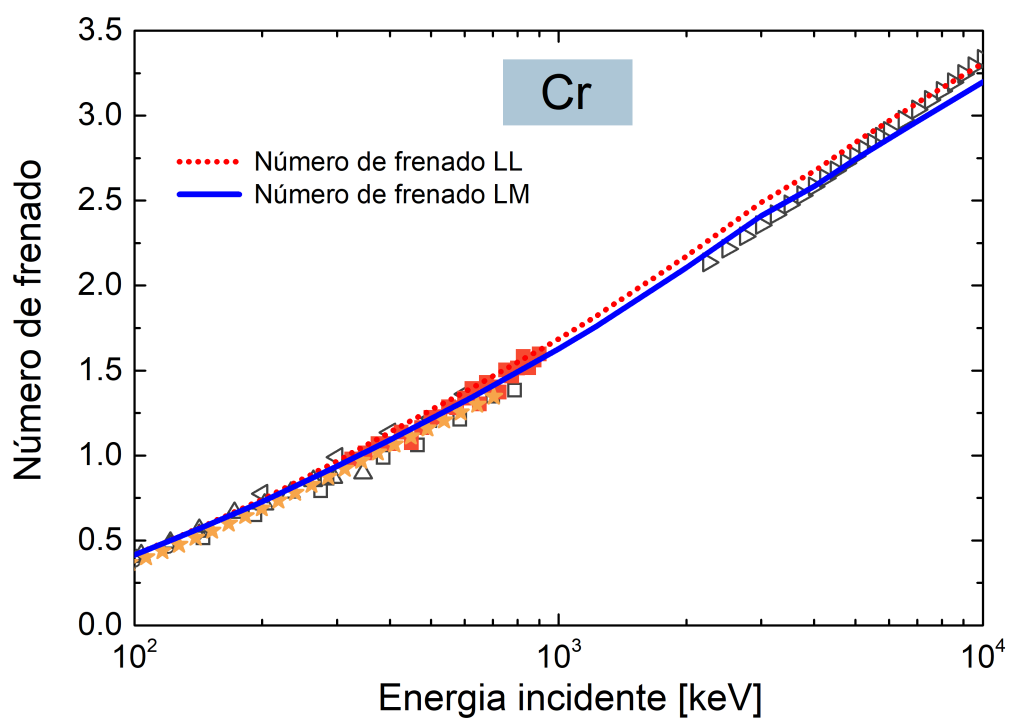


Figura 3.10: Número de frenado del Cr para H. Curvas y símbolos como en FIG. 3.8.

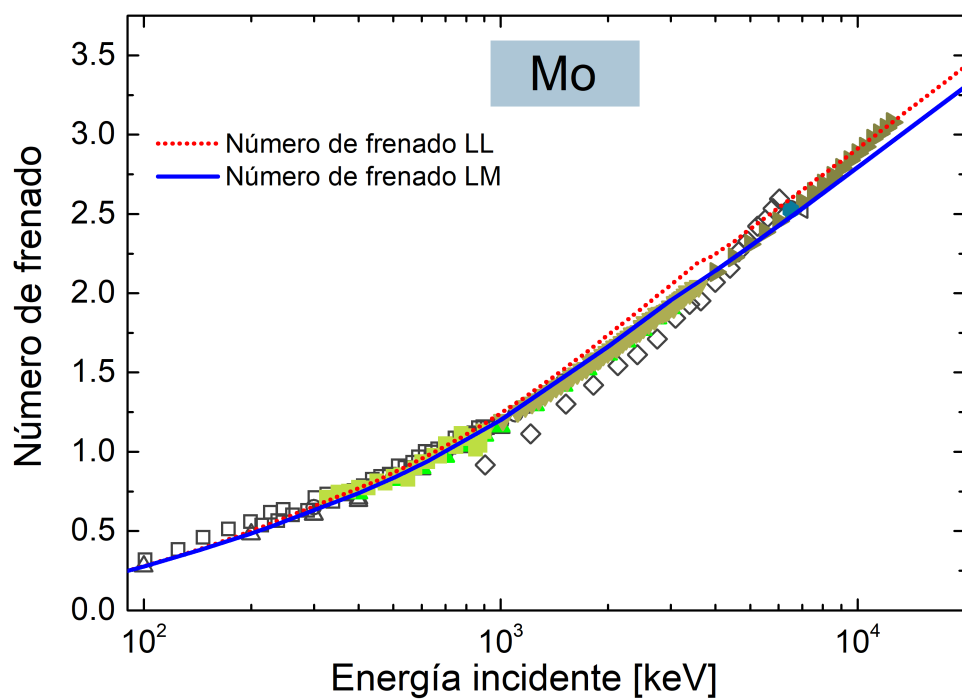


Figura 3.11: Número de frenado del Mo para H. Curvas y símbolos como en FIG. 3.9.

Capítulo 4

Pérdida de energía de protones en lantánidos, la importancia de la capa 4*f*

Los lantánidos, también conocidos como elementos de tierras raras (REE, por sus siglas en inglés), abarcan quince átomos: lantano (La), cerio (Ce), praseodimio (Pr), neodimio (Nd), prometio (Pr), samario (Sm), europio (Eu), gadolinio (Gd), terbio (Tb), disprosio (Dy), holmio (Ho), erbio (Er), tulio (Tm), iterbio (Yb) y lutecio (Lu). Estos elementos tienen números atómicos que van del 57 al 71 y poseen propiedades únicas, principalmente relacionadas con el llenado progresivo de la subcapa 4*f*. Sus ubicaciones en la tabla periódica pueden apreciarse en la Figura 4.1.

Los estudios recientes sobre los lantánidos y sus aleaciones han estado impulsados por sus aplicaciones prácticas. Estas incluyen dispositivos tecnológicos avanzados, almacenamiento de información, tecnologías para ahorro de energía (tecnología verde), superconductores y aplicaciones médicas [75–77]. Por ejemplo, el lutecio tiene aplicaciones esenciales en terapias contra el cáncer [139]. Cabe mencionar que el prometio es el único elemento de esta serie que es radiactivo, siendo un producto de reacciones nucleares como la fisión espontánea del uranio y el decaimiento alfa del ^{151}Eu .

El poder de frenado de los lantánidos, es un tema de investigación abierto. Desde

TABLA PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

GRUPO

PERIODO

MASA ATÓMICA RELATIVA (1)

GRUPO IUPAC

GRUPO CAS

NÚMERO ATÓMICO

SÍMBOLO

NOMBRE DEL ELEMENTO

ESTADO DE AGREGACIÓN (25 °C)

Legend:

- Metales
- Metales alcalinos
- Metales alcalinotérreos
- Elementos de transición
- Lantánidos
- Actinidos
- Semimetales
- No metales
- Anfígenos
- Halógenos
- Gases nobles

LANTÁNIDOS

ACTINIDOS

(1) Atomic weights of the elements 2013, Pure Appl. Chem., 88, 265-291 (2016)

Copyright © 2017 Eri General

Figura 4.1: Los blancos estudiados en este capítulo se resaltan con naranja: todos los lantánidos desde La ($Z = 57$) hasta Lu ($Z = 71$).

el punto de vista teórico, la descripción de la estructura atómica de estos blancos con la capa de subvalencia $4f$ abierta representa un desafío considerable. Es necesario realizar cálculos completamente relativistas para describir adecuadamente su estructura electrónica y energías de ligadura. Estos cálculos son fundamentales para las capas de electrones internos, pero también afectan las capas externas, como las $4f$ y $5p$, como se mostrará en la sección 4.1.1.

En cuanto a los datos experimentales de pérdida de energía de protones en lantánidos, las mediciones disponibles para Ce, Pr, Sm, Ho, Er, Yb son muy escasas, con pocos datos concentrados en regiones de energía reducida. En otros casos (Pm, Eu, Tm), los datos son completamente inexistentes. Para Nd, Tb, Dy y Lu, las únicas mediciones experimentales disponibles son las realizadas por Krist y Mertens [119, 120] en 1983. Sin embargo, los datos en [119, 120] discrepan con la mayoría de los valores experimentales disponibles para otros blancos como Al, Au, Ag, Ta, Pt [50, 72], lo cual introduce dudas respecto a los datos en Nd, Tb, Dy y Lu. El caso de Gd es excepcional; existen múltiples conjuntos de valores experimentales en un rango de energía extendido desde 0,5 keV a 10 MeV. Un punto interesante es que las mediciones recientes de la Ref. [61] para Gd difieren de los datos anteriores y las predicciones de SRIM [53] en energías de impacto cercanas al máximo de *stopping power* y por debajo de él, lo cual es uno de los desafíos para nuestra propuesta.

En este capítulo se presenta un estudio sistemático del poder de frenado de las REE para los protones. Se investigó la influencia en el cálculo de las secciones eficaces de frenado de distintos factores: la estructura atómica, el número de electrones de valencia, la promoción de electrones $4f$ a la banda de conducción, el apantallamiento entre electrones de la misma subcapa e incluso de subcapas cercanas en energía como la $4f$ y $5p$.

El capítulo está organizado de la siguiente manera: en la Sección 4.1 presentamos el análisis de la estructura atómica y de los electrones de valencia en la Sección 4.1.1; y los modelos de poder de frenado empleados en la Sección 4.1.2. Los resultados obtenidos, las comparaciones con los datos experimentales, y con otros modelos se presentan y analizan en la Sección 4.2. Finalmente, la Sección 4.3 resume las conclusiones de este capítulo.

4.1. Cálculos del poder de frenado

En nuestros cálculos de poder de frenado de metales consideramos contribuciones electrónicas independientes de las capas internas (ligadas) y externas (de conducción, FEG) a la pérdida de energía. Por lo tanto, el conocimiento de cuáles son las capas de electrones ligados y cuáles electrones forman parte de FEG es crucial. En los compuestos, la mayoría de los lantánidos forman enlaces con valencia +3, aunque también pueden aparecer en estados de valencia +2 y +4 [76, 140]. Cuando se trata de lantánidos metálicos, surge la duda si esta configuración persiste y cuántos electrones por átomo forman parte de la banda de conducción del metal. Los datos de ELF experimentales para los lantánidos son muy escasos y dispersos [141, 142], los cuales a través del pico de plasmones darían un acercamiento al número de electrones en el FEG. Decidimos estudiar este tema desde distintos puntos de vista: cómo es la estructura atómica y las energías de ligadura, cómo se combinan los lantánidos en compuestos, y cuál sería la energía de Fermi de los electrones del FEG respecto de la energía de los electrones $4f$ atómicos. Luego evaluamos estos resultados incorporándolos al cálculo de pérdida de energía mediante los modelos de FEG y a la SLPA-LM.

4.1.1. Estructura Atómica y electrones de valencia

La configuración del estado fundamental de los lantánidos atómicos se puede expresar generalmente como $[\text{Xe}] 4f^n 6s^2$ o $[\text{Xe}] 4f^{n-1} 5d 6s^2$. Pueden clasificarse acorde al número n de electrones en la capa $4f$, hasta $4f^7$ se denominan livianos (La a Eu), y desde $4f^7$ a $4f^{14}$ pesados (Gd a Lu). Presentamos estas configuraciones fundamentales en la Tabla 4.1. Como describimos en la sección 2.3, se utilizaron cálculos de estructura atómica completamente relativista mediante el código HULLAC [105], introduciendo un esquema de configuración de interacción (CI), que considera la configuración fundamental y los estados excitados contribuyentes. Ésto depende de cada blanco, por ejemplo los detalles sobre la CI en el cálculo para Gd y Er se pueden encontrar en la Ref. [101] y para Ce en la Ref. [82].

Dada la importancia de la capa $4f$ en los lantánidos, incluimos en la Tabla 4.1

Tabla 4.1: Estructura atómica y datos de electrones de valencia de La a Lu: Z , carga nuclear; configuración electrónica; $E_{4f\pm}^{\text{exp}}$, mediciones experimentales (valor medio) de la subcapa $4f$; E_{4f} y $\langle r \rangle_{4f}$, cálculos teóricos actuales para la energía de enlace y los radios medios de la subcapa $4f$; N_e , el número de electrones de valencia por átomo; r_S , los radios de Wigner-Seitz; ω_p , la frecuencia del plasmón, Γ^{exp} , la mitad del ancho del pico del plasmón experimental; E_F , la energía de Fermi, y E_p , la energía mínima del protón para excitar los plasmones.

Elementos	Z	Configuración electrónica	$E_{4f\pm}^{\text{exp}} \dagger$ [au]	E_{4f} [au]	$\langle r \rangle_{4f}$ [au]	N_e	r_S [au]	ω_p [au]	$\Gamma^{\text{exp}} (*)$ [au]	E_F [au]	E_p [keV]
La	57	[Xe] $5d6s^2$	-	-	-	3	2.72	0.386	0.15	0.25	24
Ce	58	[Xe] $4f5d6s^2$	0.003 ± 0.044	0.19	1.098	4	2.40	0.466	0.15	0.32	30
Pr	59	[Xe] $4f^36s^2$	0.073 ± 0.022	0.09	1.176	3	2.66	0.398	0.15	0.26	25
Nd	60	[Xe] $4f^46s^2$	0.055 ± 0.033	0.08	1.125	3	2.64	0.404	0.15	0.26	25
Pm	61	[Xe] $4f^56s^2$	-	0.32	1.060	3	2.61	0.410	0.15	0.27	26
Sm	62	[Xe] $4f^66s^2$	0.202 ± 0.040	0.41	0.925	3	2.61	0.410	0.15	0.27	26
Eu	63	[Xe] $4f^76s^2$	0.000 ± 0.117	0.06	1.140	3	2.96	0.341	0.15	0.21	21
Gd	64	[Xe] $4f^75d6s^2$	$0.305 \pm 0.003\dagger$	0.39	0.926	3	2.61	0.411	0.15	0.27	26
Tb	65	[Xe] $4f^96s^2$	0.095 ± 0.055	0.12	0.995	2	2.96	0.341	0.15	0.21	21
Dy	66	[Xe] $4f^{10}6s^2$	0.154 ± 0.058	0.18	0.870	2	2.94	0.344	0.15	0.21	21
Ho	67	[Xe] $4f^{11}6s^2$	0.135 ± 0.110	0.17	0.852	2	2.93	0.346	0.15	0.21	21
Er	68	[Xe] $4f^{12}6s^2$	0.158 ± 0.051	0.15	0.828	2	2.91	0.349	0.15	0.22	21
Tm	69	[Xe] $4f^{13}6s^2$	0.194 ± 0.069	0.10	0.825	2	2.89	0.352	0.15	0.22	22
Yb	70	[Xe] $4f^{14}6s^2$	0.231 ± 0.036	0.11	0.787	2	3.22	0.300	0.15	0.18	18
Lu	71	[Xe] $4f^{14}5d6s^2$	0.253 ± 0.018	0.39	0.723	3	2.51	0.435	0.15	0.29	27

$\dagger$ Valores tomados de Ref. [143] excepto para Gd.

$\ddagger$ Tomado de Ref. [144].

(*) Tomado de Ref. [141] para Tb y aplicado para todas las REE.

el radio medio $\langle r \rangle_{4f}$, la energía de ionización E_{4f} de los cálculos relativistas, y su correspondiente valor experimental E_{4f}^{exp} (y su error) de la Ref. [106]. A medida que incrementa la carga nuclear y el orbital $4f$ se llena, observamos la bien conocida contracción del radio de los lantánidos. Este efecto es el principal responsable de muchas de sus propiedades espectroscópicas y magnéticas [145].

Analizamos los resultados para la energía de ligadura de todas las capas atómicas de los 15 lantánidos. Mostramos estos valores en las Figuras 4.2 a 4.7. Los valores HULLAC son atómicos, pueden ser comparados con los datos experimentales para las capas internas de blancos sólidos. A medida que se pasa a capas más externas estos resultados pueden diferir. Se puede observar en las Figuras 4.2 a 4.7 que para

los electrones $6s$ $5d$ y a veces para los $4f$ no hay datos experimentales de energía de ligadura en el sólido. Las capas de valencia sin mediciones experimentales pueden indicar que esos electrones forman parte de la banda de conducción. Esta comparación da indicios del número de electrones N_e que forman parte del FEG, lo cual es el valor que buscamos para nuestros cálculos. A continuación analizamos cada uno de los lantánidos con el objetivo de evaluar el valor de N_e y la energía de Fermi E_F correspondiente. Incluimos estos valores en la Tabla 4.1 y en las Figuras 4.2 a 4.7.

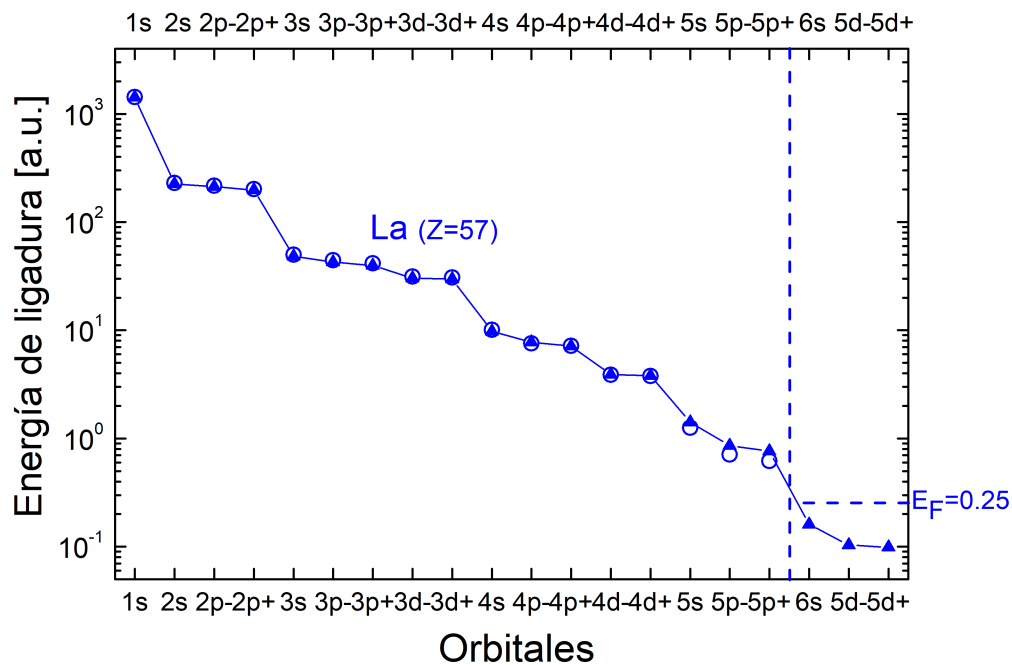


Figura 4.2: Energía de ligadura de La. Simbolos: ▲ resultados HULLAC, y ○ datos experimentales en sólidos de Ref. [106]. En línea punteada se indica la energía de Fermi E_F de la Tabla 4.1.

Las energías de ligadura relativistas de lantano (La) son presentadas en la Figura 4.2. Lantano es el primero en la serie y no tiene electrones $4f$. La Figura 4.2 sugiere que los 3 electrones $5d$ $6s^2$ son parte de FEG con $E_F = 0.25$. Esto es coherente con el primer metal de transición post-lantánido, Hf, cuyos 4 electrones de valencia $5d^2$ $6s^2$

son parte del FEG, como se mostró en el Capítulo 3. También puede observarse en la Figura 4.2 el buen acuerdo entre los resultados teóricos relativistas y los valores experimentales. Las mayores diferencias aparecen para las capas más externas, $5s$ y $5p$, lo cual es esperable entre cálculos atómicos y energías de sólidos.

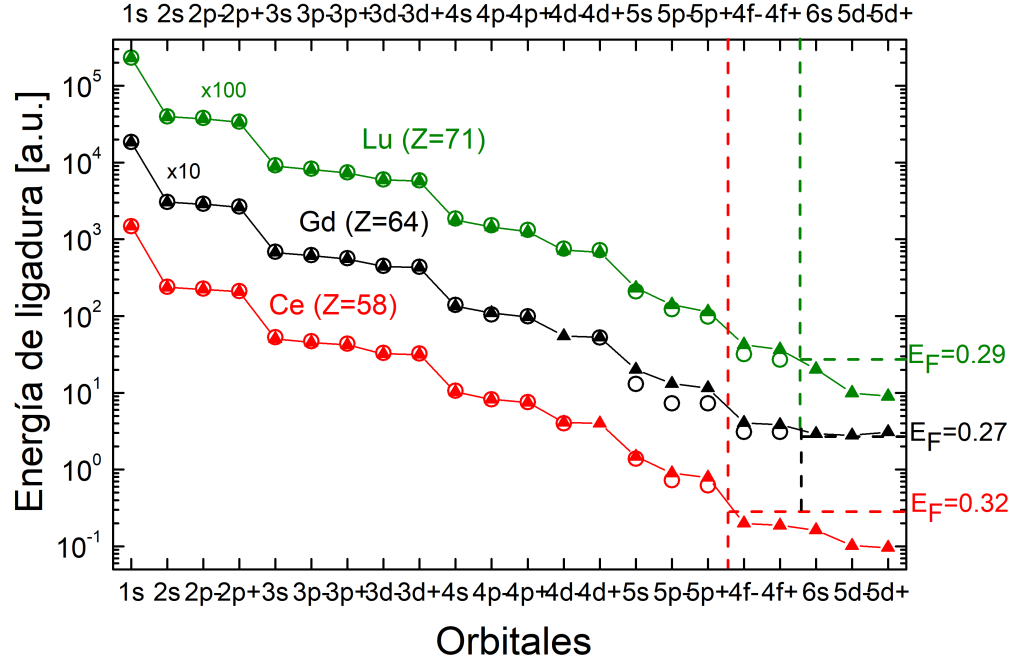


Figura 4.3: Energías de ligadura de Ce (rojo), Gd (negro) y Lu (verde). Símbolos: ▲ resultados HULLAC, y ○ datos experimentales en sólidos de Ref. [106]. Nótese que los valores de Gd están multiplicados por un factor 10 y de Lu por un factor 100. En línea punteada horizontal se indica la energía de Fermi, E_F , de la Tabla 4.1, y en vertical se separan las capas de electrones en el FEG y ligadas, siguiendo los colores asociados a cada lantánido.

La Figura 4.3 ilustra los valores para Ce, Gd, y Lu. Agrupamos estos tres elementos porque son los únicos REE con electrones $5d$ según se observa en la Tabla 4.1. Otra característica de esta disposición es que Ce tiene un solo electrón en la subcapa $4f$, mientras que Gd y Lu presentan la subcapa $4f$ semillena y completamente llena, respectivamente. Se puede observar en esta figura que hay valores experimentales de

E_{4f} para Lu y Gd , mientras que no los hay para Ce, sugiriendo que el electrón $4f$ de Ce podría formar parte del FEG. Si se compara el valor de E_{4f} y el valor de E_F , la relación $E_{4f} < E_F$ también indica que electrones $4f$ atómicos son promovidos al FEG en el sólido. Para Gd y Lu, los electrones $5d\ 6s^2$ serían de conducción ($N_e = 3$), mientras que para Ce son los $4f\ 5d\ 6s^2$ ($N_e = 4$).

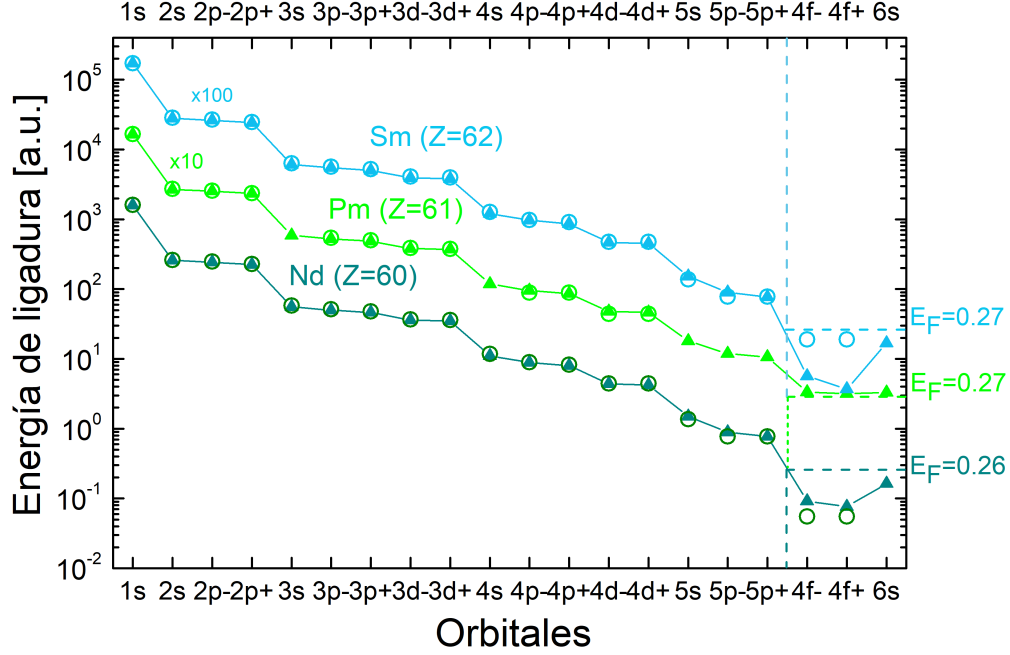


Figura 4.4: Energías de ligadura de Nd, Pm y Sm. Símbolos: $\blacktriangle$ resultados HULLAC, y $\circ$ datos experimentales en sólidos de Ref. [106]. Nótese que los valores de Pm están multiplicados por un factor 10 y de Sm por un factor 100. En línea punteada se indica la energía de Fermi E_F de la Tabla 4.1.

Realizamos un análisis similar para el resto de los lantánidos, las cuales se muestran en las Figuras 4.4 (Nd, Pm, y Sm), 4.5 (Pr, Eu y Tb), 4.6 (Dy, Ho, y Er), y 4.7 (Tm y Yb). Los valores de energía para algunos blancos son multiplicados por un factor de 10 ó 100 para separar valores superpuestos. Comparamos los resultados teóricos con las mediciones experimentales de estado sólido compiladas por Williams [106], que incluyen datos de Ref. [143].

En la Figura 4.4, se observa que para Pm, no existen valores experimentales para los orbitales de subvalencia $5s$, $5p$ y $4f$. No es esperable que todos estos electrones sean parte del FEG, más bien está relacionado con la naturaleza radiactiva del Pm y la complejidad experimental que eso implica. Nd, Pm y Sm tienen entre 4 y 6 electrones $4f$, y hay valores medidos para E_{4f} en [106]. Esta característica unida al valor +3 de valencia en compuestos, nos sugiere que solo un electrón $4f$ es promovido al FEG y los otros electrones permanecen ligados. La propuesta de $N_e = 3$ es representada en la Figura 4.4 en el valor de E_F .

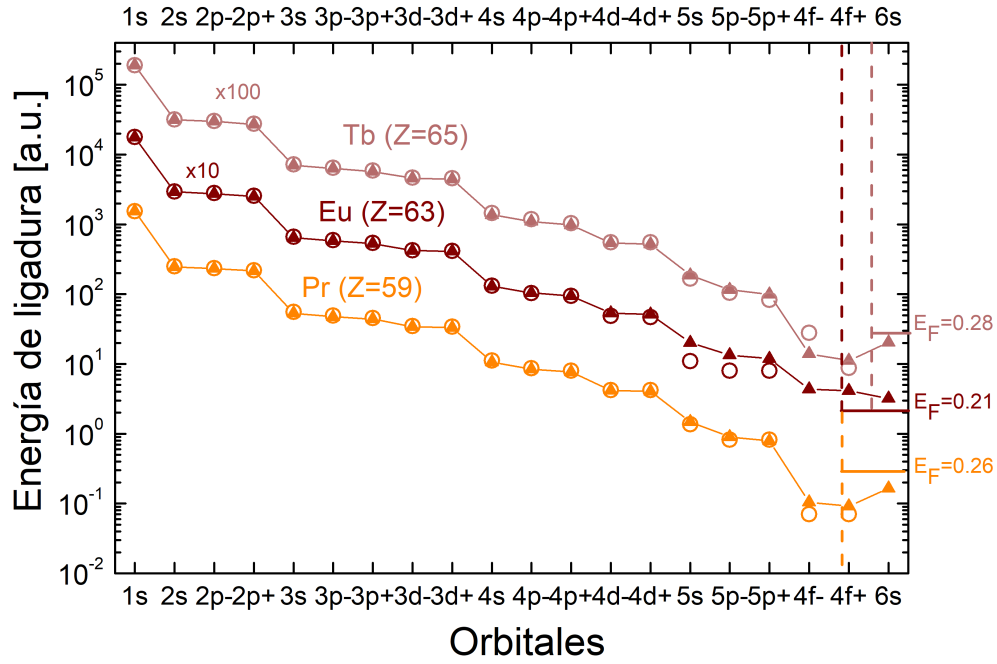


Figura 4.5: Energías de ligadura de Pr, Eu y Tb. Simbolos: $\blacktriangle$ resultados HULLAC, y $\circ$ datos experimentales en sólidos de Ref. [106]. Nótese que los valores de Eu están multiplicados por un factor 10 y de Tb por un factor 100. En línea punteada se indica la energía de Fermi E_F de la Tabla 4.1.

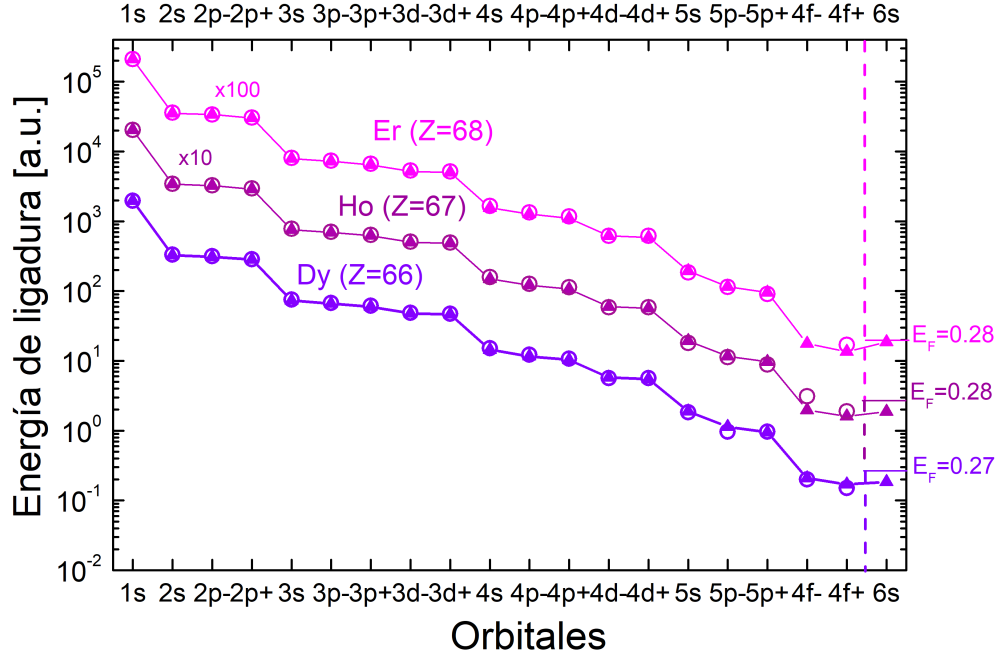


Figura 4.6: Energías de ligadura de Dy, Ho y Er. Simbolos: $\blacktriangle$ resultados HULLAC, y $\circ$ datos experimentales en sólidos de Ref. [106]. Nótese que los valores de Ho están multiplicados por un factor 10 y de Er por un factor 100. En línea punteada se indica la energía de Fermi E_F de la Tabla 4.1.

En la Figura 4.5, se muestran los valores para Pr, Eu y Tb. La energía de ligadura experimental del Eu es muy pequeña, $E_{4f} = 0 \pm 0.117$ [143]. Este valor no es incluido en la Fig. 4.5, pero podemos notar que el valor teórico $E_{4f} = 0.06$ se encuentra dentro del error experimental. Se puede observar en la Tabla 4.1 que a medida que la capa 4f está más llena, los valores de E_{4f}^{exp} son mayores y los radios medios $\langle r \rangle_{4f}$ son menores. Esto es claro para los lantánidos pesados (Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb) de las Figs. 4.5, 4.6 y 4.7. En base a esto, sugerimos que los electrones 4f de Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb están ligados y solamente los electrones $6s^2$ forman parte del FEG. Esta propuesta concuerda con estudios *ab-initio*, que concluyen que estos elementos metálicos presentan una configuración de valencia +2 en [146].

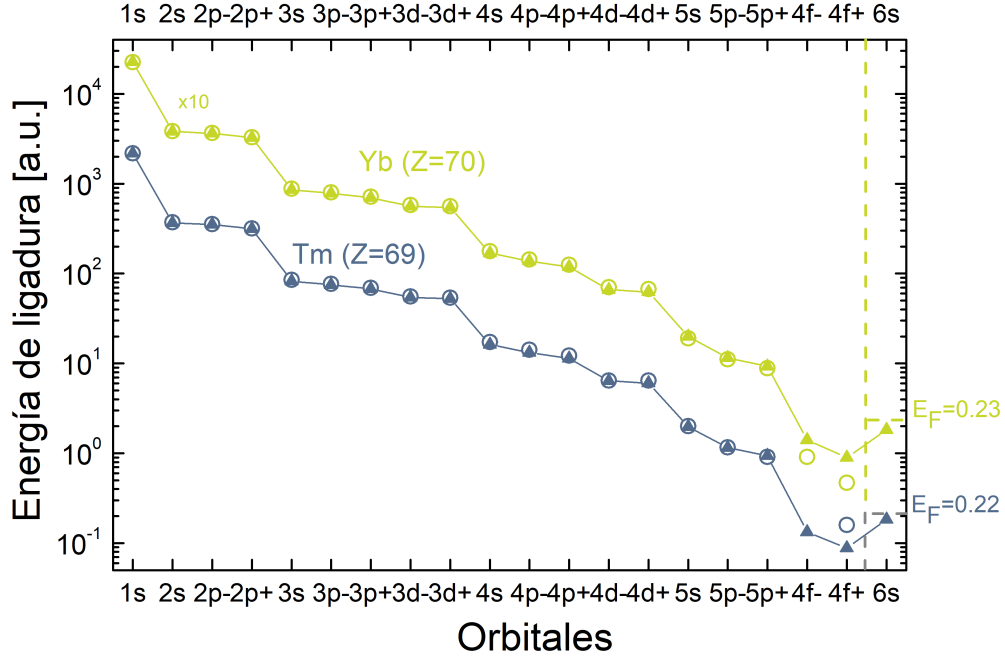


Figura 4.7: Energías de ligadura de Tm e Yb. Símbolos: $\blacktriangle$ resultados HULLAC, y $\circ$ datos experimentales en sólidos de Ref. [106]. Nótese que los valores de Yb están multiplicados por un factor 10. En línea punteada se indica la energía de Fermi E_F de la Tabla 4.1.

En resumen, el presente análisis nos llevó a considerar la promoción de un electrón $4f$ al FEG para los lantánidos ligeros ($Z = 58 - 63$) junto con los electrones $6s^2$ o $6s^2 5d$ si corresponde. En el caso de los lantánidos pesados ($Z = 64 - 71$), los electrones $4f$ están ligados y sólo los electrones externos $6s^2$ o $6s^2 5d$ son parte del FEG. El número N_e inferido para los quince REE se presenta en la Tabla 4.1, así como los parámetros que se calculan a partir de ese valor: radio de Wigner-Seitz r_s , frecuencia de plasma ω_p y la energía de Fermi E_F . Estos valores son fundamentales para la descripción de la pérdida de energía en el FEG.

4.1.2. Pérdida de energía

Se calculó la pérdida de energía en lantánidos utilizando una descripción para los electrones de valencia como un FEG mediante la SPCC (sección 2.1.1) para energías de impacto menores a E_p (energía mínima para la excitación de plasmones) y el formalismo dieléctrico con la función de Mermin-Lindhard (sección 2.1.2), para energías de impacto más altas. Para describir el poder de frenado de las capas ligadas de electrones, utilizamos la aproximación (SLPA-LM) [81] detallada en el capítulo 3. Algunos detalles de estos cálculos para el caso de lantánidos se dan a continuación.

4.1.2.a. El poder de frenado del FEG

En la Tabla 4.1 se incluyeron los parámetros del FEG calculados a partir de los valores de N_e propuestos en la sección 4.1.1. Comprobamos que nuestros ω_p concuerdan bastante bien con los picos ELF obtenidos utilizando DFT [146]. Por otro lado, los datos ELF experimentales para los lantánidos son muy escasos y dispersos [141, 142]. Nuestros valores de ω_p son 5–30 % más pequeños que los valores experimentales ω_p^{exp} informados por Colliex [141]. Los estudios disponibles para lantánidos [141, 142] tabulan ω_p^{exp} y no toda la forma de la ELF, lo cual es un problema porque conocer la función de pérdida de energía permite obtener el ancho del pico y el valor de Γ_p . La única excepción que encontramos en la literatura es Tb [141] con $\gamma_p(\text{Tb}) \simeq 0,15$ a.u. En los cálculos actuales, usamos este valor para las quince REE. Investigamos la dependencia del poder de frenado máximo con el valor de γ_p , que resultó ser pequeño ($\lesssim 5\%$).

Otro parámetro que tomamos en cuenta en nuestros cálculos es la mínima energía de excitación de plasmon, E_p . Estos valores pueden aproximarse siguiendo el trabajo de Ref. [88], y están incluidos en la Tabla 4.1 para todas las REE. Este valor es de interés porque empleamos el modelo SPCC no perturbativo para energías de impacto inferiores a E_p ; mientras que para energías de impacto superiores a E_p , utilizamos el modelo Mermin-Lindhard.

4.1.2.b. El poder de frenado de los electrones ligados

Como se mencionó en la sección 2.3, las energías de ionización relativistas presentan desdoblamiento espín-orbita. Sin embargo, ese desdoblamiento en energías es pequeño. Siguiendo trabajos previos con el modelo SLPA [79, 112] consideramos que para tiempos de colisión cortos, la incerteza de Heisenber, $\Delta E \Delta t \geq 1/2$, hace que esta división desaparezca. Revisamos su validez para todas las capas de todos los REE. Estimamos aproximadamente $\Delta t \approx 2\langle r \rangle_{nl\pm}/v$, con $\langle r \rangle_{nl\pm}$ y v el radio orbital medio y la velocidad del ion, respectivamente. Usando este criterio, comprobamos que efectivamente las diferencias entre las energías $\Delta E_{\pm}$ de cada orbital es menor que $1/(2\Delta t)$. La SLPA-LM es un modelo de capas independientes donde los electrones de una "misma" energía de ligadura se describen como una densidad de electrones ligados, incluyendo procesos colectivos y apantallamiento entre los mismos. El concepto de "misma" energía teniendo en cuenta la incerteza hace que describa los electrones $nl\pm$ juntos como una única densidad electrónica $\rho_{nl}(r)$ con energía de ligadura media E_{nl} . La consecuencia física de este enfoque es la inclusión de apantallamiento entre estos electrones de la misma subcapa nl , o apantallamiento *intra-capas*. Análogamente, por encima de ciertas velocidades de impacto, puede darse la mezcla o apantallamiento entre electrones que pertenecen a diferentes orbitales pero con energías de enlace muy cercanas. Esto lo observamos entre los orbitales $5p$ y $4f$ de metales de transición pesados (Hf, Ta, W) [81, 112] y también en los lantánidos. Se calculó la velocidad umbral para la mezcla de capas $4f$ y $5p$ como $v_{pf} \geq 4\Delta E_{pf}\langle r \rangle_{pf}$, donde $\Delta E_{pf} = |E_{4f} - E_{5p}|$ es el gap de energía entre la capa $4f$ y $5p$, y $\langle r \rangle_{pf}$ es el valor medio de r de la densidad electrónica combinada de estas capas. Para velocidades de impacto $v > v_{pf}$, consideramos estos electrones para responder al proyectil entrante como una única nube electrónica.

4.2. Resultados y discusión

Mostramos los resultados obtenidos para la pérdida de energía en cada uno de los 15 lantánidos en las subsecciones 4.2.1 a 4.2.14, y en las Figuras 4.8 a 4.34. A excepción de la figura de La y Ce que no cuentan con electrones $4f$ ligados, en ca-

da figura se incluyen cuatro curvas sólidas: la contribución del FEG (línea azul con cuadrados), de los electrones ligados (curva a trazos cortos naranja), la contribución de los electrones $4f$ (curva de puntos naranjas), y el poder de frenado total (curva sólida roja). Comparamos los presentes resultados con los datos experimentales disponibles [50, 72]. En todos los casos, incluimos apantallamiento entre capas $4f$ y $5p$ por encima de la velocidad de impacto correspondiente v_{pf} , detallada en la Sección 4.1.2.b. También incluimos las predicciones SRIM [53] (línea gris de puntos) y los resultados de dos modelos teóricos: la aproximación de convolución para partículas rápidas CASP versión 6.0 de Schiwietz y Grande [37, 38] (línea gris a trazos) y la teoría binaria de frenado electrónico de Schinner y Sigmund [35], incluida en la versión 21.06 del código DPASS (línea gris con doble trazo-punto). Ambos modelos tratan los electrones de valencia como un FEG, mientras que las capas internas se describen utilizando enfoques de colisión binaria. A diferencia de los modelos perturbativos, DPASS y CASP incluyen correcciones de Barkas y efectos de carga, y se pueden aplicar a cualquier combinación de ion-blanco en un amplio rango de energía.

4.2.1. Lantano

En la Figura 4.8, mostramos el poder de frenado de lantano para protones. Para este blanco, el umbral de excitación del plasmón es $E_p = 24$ eV, lo que separa los rangos de validez de los modelos SPCC y Mermin-Lindhard para el FEG. La contribución de los electrones ligados es evidente para energías de impacto tan bajas como 8 keV. Nuestros resultados de frenado total describen los datos de las Refs. [111] y [147] para altas energías (excepto el dato a 200 keV); y son bastante más bajos que las mediciones de las Refs. [119, 120] en torno al máximo de frenado. En la Figura 4.9, comparamos nuestra curva de poder de frenado total con las predicciones de SRIM y con los resultados teóricos de DPASS. Como era de esperar, SRIM [53] es semi-empírico y ajusta los datos alrededor del máximo. En cambio, la curva DPASS [39] es muy cercana a la nuestra, con el máximo de frenado desplazado hacia energías más bajas. Comentaremos estos datos más adelante en este trabajo cuando presentemos una ley de escala válida para todos los datos experimentales de los lantánidos.

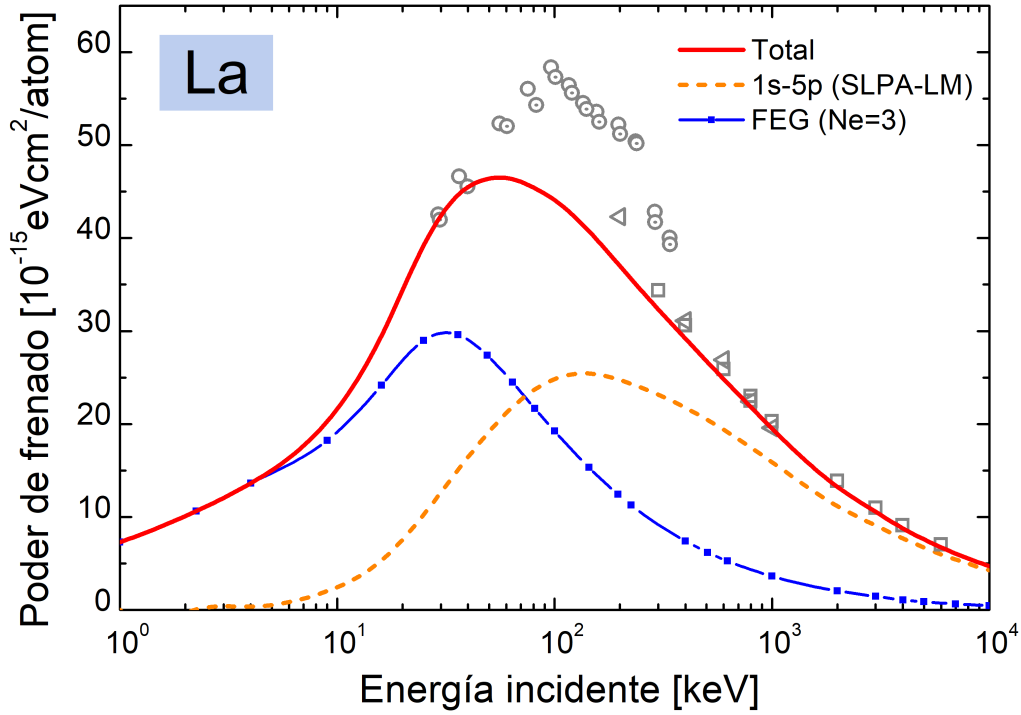


Figura 4.8: Sección eficaz de frenado del lantano (La) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-5p$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 2.72$ ($N_e = 3$) (línea de cuadrados azules). Símbolos: datos experimentales $\diamond$ [147], $\circ$ [119], $\odot$ [120], $\triangleleft$ [111].

4.2.2. Cerio

Cerio es el primer REE con electrones $4f$. Sin embargo, como mostramos en la Tabla 4.1, consideramos que en el metal este electrón es parte del FEG ($N_e = 4$, $4f^1 5d^1 6s^2$) y el resto de los electrones ($1s-5p$) ligados. Mostramos nuestras secciones eficaces de frenado electrónico en la Figura 4.10. La separación entre el FEG y la curva de poder de frenado total evidencia la contribución del electrón ligado para energías de impacto superiores a 5 keV. Nuestros resultados concuerdan bien con los experimentos de alta energía de Knudsen et al. [147]. Los valores de Ref. [118] son inferiores al límite de alta energía esperado del poder de frenado. Más adelante se

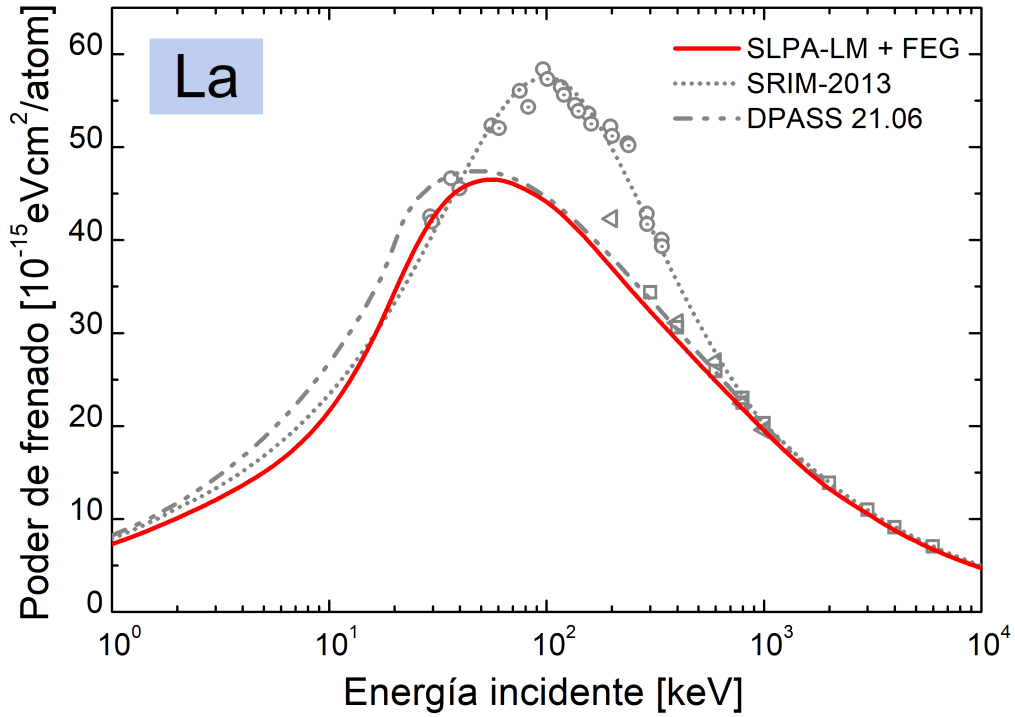


Figura 4.9: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en La. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos) y DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.8.

presentarán más comentarios sobre este conjunto de datos [118] en relación con la escala. En la Figura 4.11 comparamos nuestros resultados con los de otros modelos. Se puede observar que para energías superiores a 400 keV todas las curvas teóricas y la de SRIM concuerdan bastante bien con los valores experimentales de Ref. [147]. Para energías inferiores, nuestra curva está más cerca de SRIM que de DPASS y CASP. Sin embargo, la falta de datos en este rango de energía hace que ningún resultado sean concluyente.

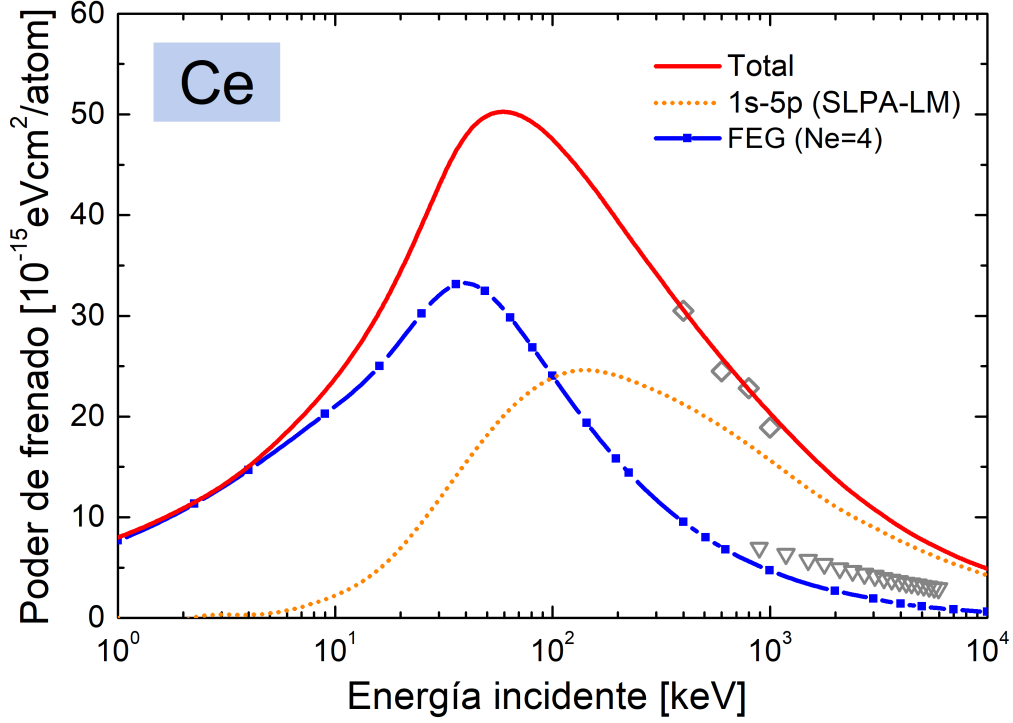


Figura 4.10: Sección eficaz de frenado del cerio (Ce) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-5p$) (línea naranja con trazos cortos), y de FEG con $r_S = 2.40$ ($N_e = 4$) (línea de cuadrados azules). Símbolos: datos experimentales $\diamond$ [147] and ∇ [118].

4.2.3. Praseodimio

En la Figura 4.12 se muestran los resultados de poder de frenado para los protones en Pr. En este caso, los electrones ligados contribuyen significativamente al poder de frenado total, incluso a energías de impacto tan bajas como 1 keV. Incluimos en esta figura la curva correspondiente a la contribución de los electrones $4f$. A bajas energías la pérdida de energía del proyectil por ionización de estos electrones de energía de ligadura pequeña, $E_{4f} = 2.6$ eV, es la principal responsable de esta característica. Recordamos que la contribución de los electrones ligados se obtuvo con el SLPA-LM, que es un modelo perturbativo, por lo que los valores para energías de impacto

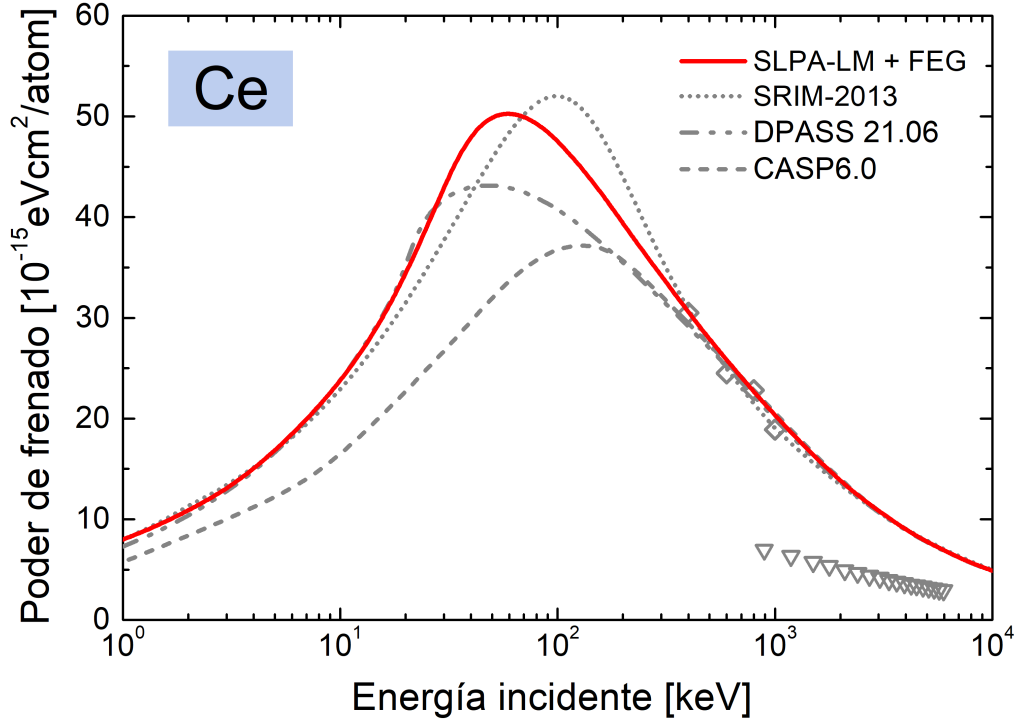


Figura 4.11: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Ce. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 2.41$ ($N_e = 4$) [38] (línea gris a trazos). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.10

inferiores a 20 keV pueden subestimar el poder de frenado de los electrones ligados. Los resultados actuales coinciden con el único conjunto de valores experimentales de Knudsen et al. [147] en el rango de alta energía.

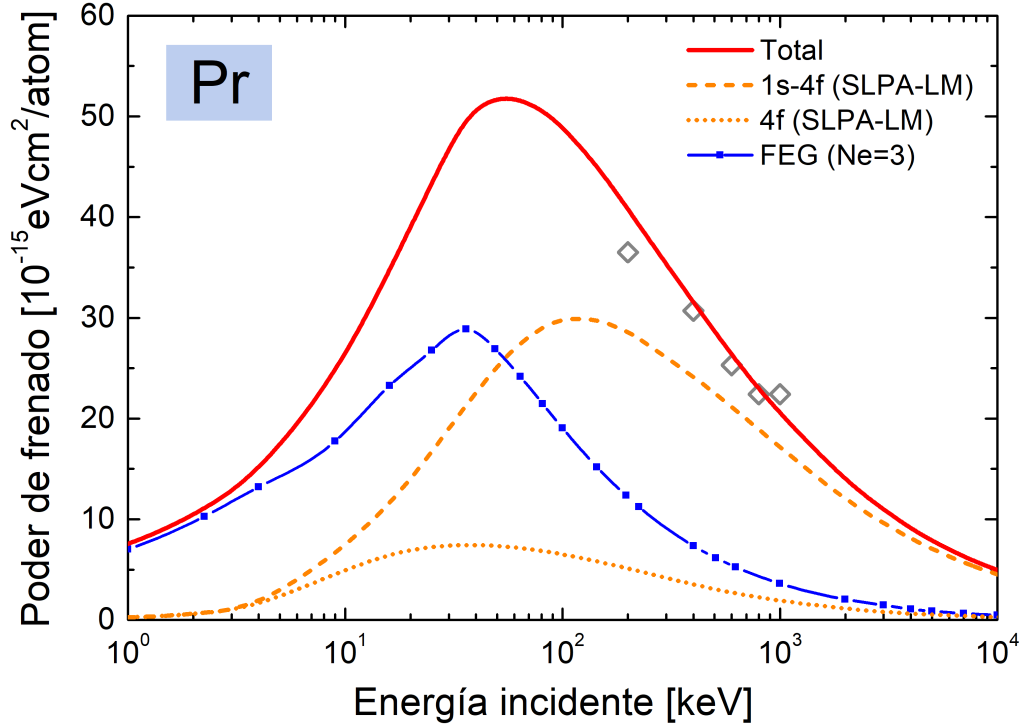


Figura 4.12: Sección eficaz de frenado de Praseodimio (Pr) para protones. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 2.66$ ($N_e = 3$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). Símbolos: datos experimentales $\diamond$ [147].

En la Figura 4.13, comparamos nuestros resultados totales con los de SRIM, CASP, DPASS y los datos experimentales. Si bien a partir de los 700 keV todos los modelos convergen; la discrepancia que se observa entre estos en el rango de bajas y medias energías muestra la necesidad de nuevos datos experimentales, principalmente para energías $E < 200$ keV.

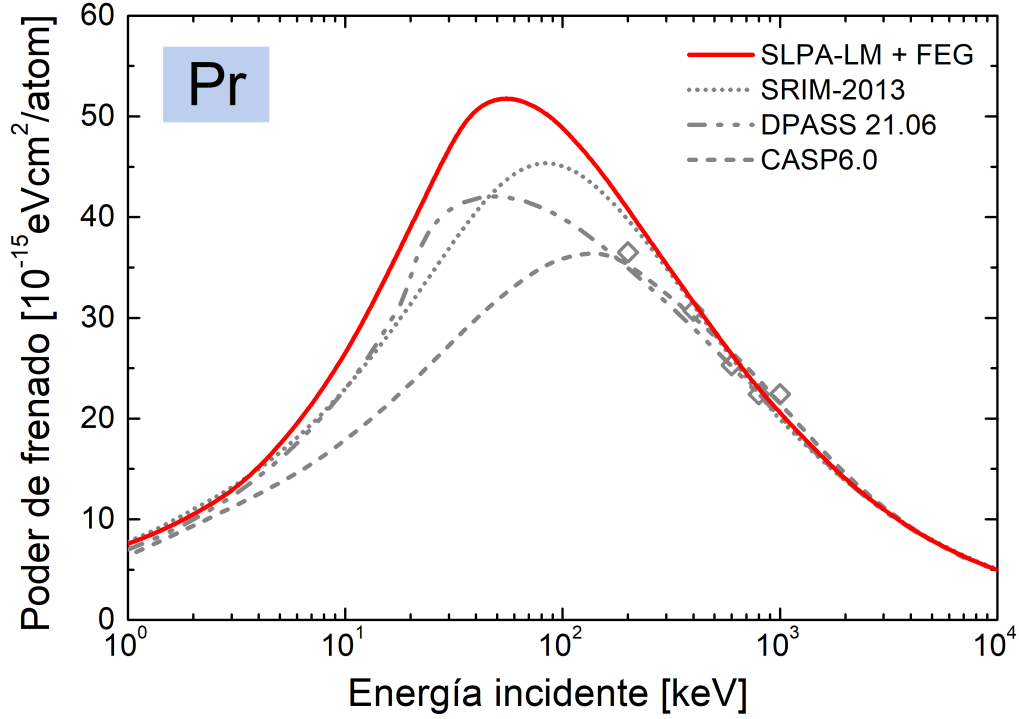


Figura 4.13: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Pr. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 2.23$ ($N_e = 5$) [38] (línea gris a trazos). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.12.

4.2.4. Neodimio

El poder de frenado del Nd se muestra en la Figura 4.14. Como en el caso del Pr, los electrones ligados contribuyen significativamente al poder de frenado total a energías de impacto muy bajas debido a la pequeña energía de enlace $4f$. Nuestros resultados sobreestiman los datos de la Ref. [119, 120]. Como se mencionó en la introducción de este capítulo, se ha demostrado [52] que las mediciones de estas publicaciones tienen algún problema experimental y no concuerdan con la mayoría de los valores experimentales para protones en otros blancos.

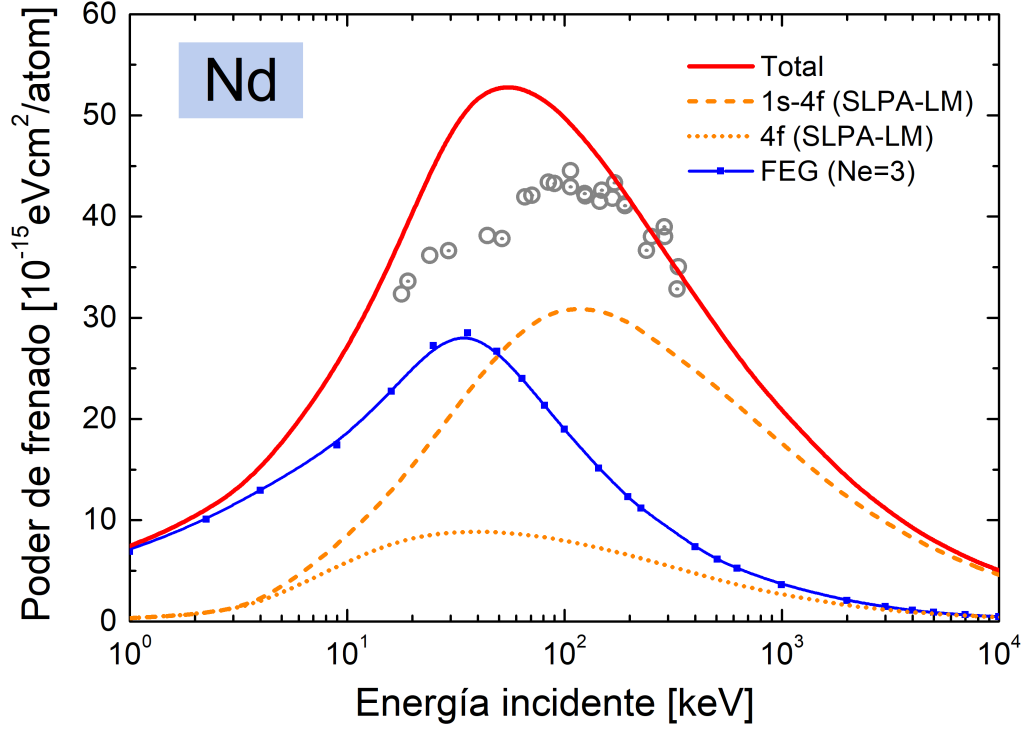


Figura 4.14: Sección eficaz de frenado de Nd para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 2.64$ ($N_e = 3$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). Símbolos: datos experimentales de $\circ$ [119] and $\odot$ [120].

En la Figura 4.15 se muestra la comparación de los distintos modelos junto a los experimentos disponibles. Como es de esperar, los valores semiempíricos SRIM acuerdan perfectamente con los datos. Los máximos de todos los modelos considerados, DPASS y CASP, difieren, por lo que nos lleva a exponer la falta de datos experimentales en Nd en todo el rango de energías.

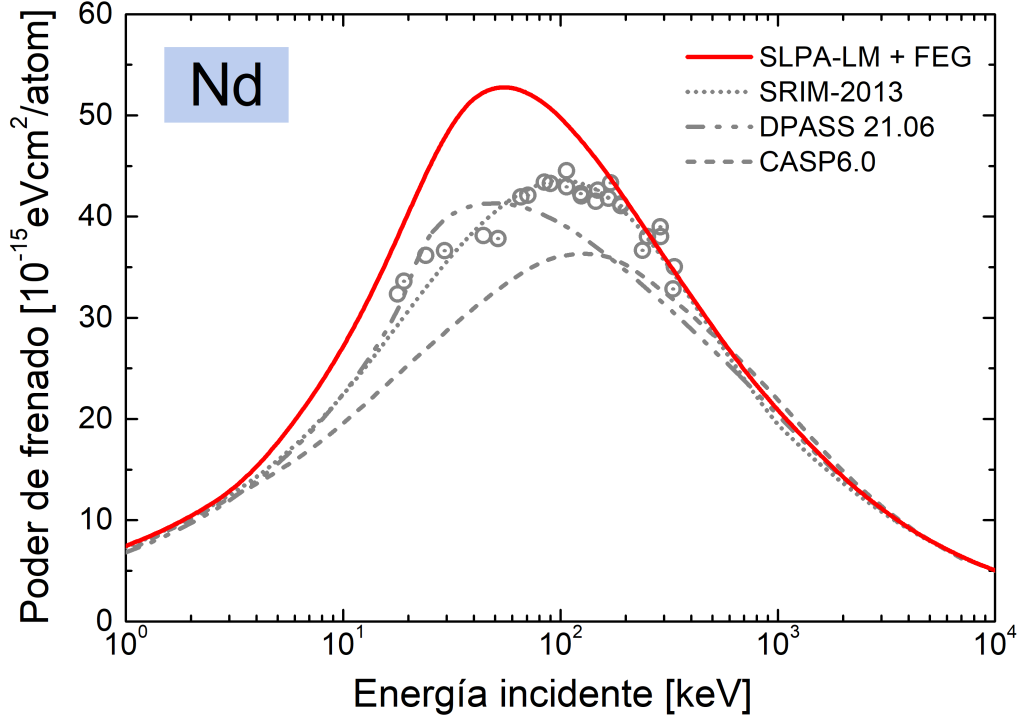


Figura 4.15: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Nd. Curva sólida: resultado presente total teórico (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 2.09$ ($N_e = 6$) [38] (línea gris a trazos). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.14.

4.2.5. Prometio

La Figura 4.16 muestra los resultados teóricos actuales de poder frenado en Pm para protones. La energía de ligadura teórica E_{4f} , es bastante mayor que la de Pr y Nd, como se observa en la Tabla 4.1. Esta característica desplaza el umbral del poder de frenado del electrón ligado (curva de trazos cortos de color naranja) a energías de impacto más altas. Debido a la naturaleza radiactiva del Pm, no hay datos experimentales con los que comparar. Esta falta de datos podría resolverse recurriendo a leyes de escala válidas para todos los elementos, como se mencionará

más adelante.

En la Figura 4.17 se presenta la comparación entre el poder de frenado electrónico obtenido con el modelo propuesto en este trabajo y los resultados de otros modelos disponibles en la literatura, SRIM, DPASS, y CASP. Al no tener datos experimentales, no se puede hacer un análisis de la efectividad de cada uno. Sí podemos mencionar que acuerdan para $E > 500$ keV y para $E < 10$ keV, pero los máximos son bastante diferentes. Cabe mencionar que si bien SRIM es semiempírico, incluye modelo teórico de *stopping power* a partir del cual se calculan las secciones eficaces más allá del ajuste con datos experimentales si los hay.

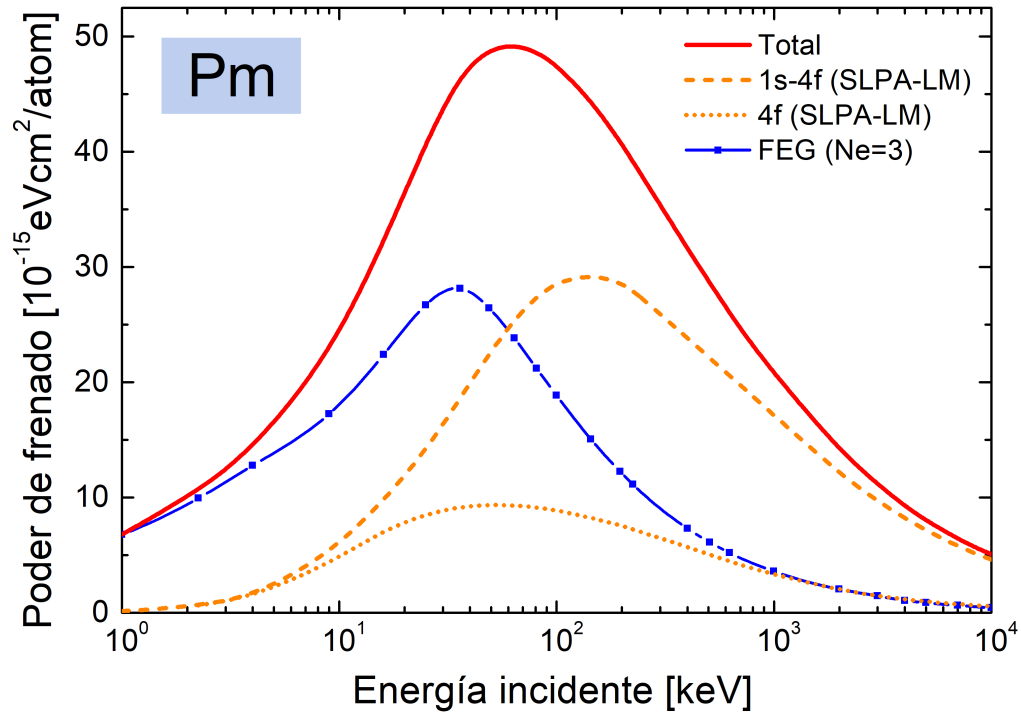


Figura 4.16: Sección eficaz de frenado del prometio (Pm) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 2.61$ ($N_e = 3$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). No hay datos experimentales disponibles.

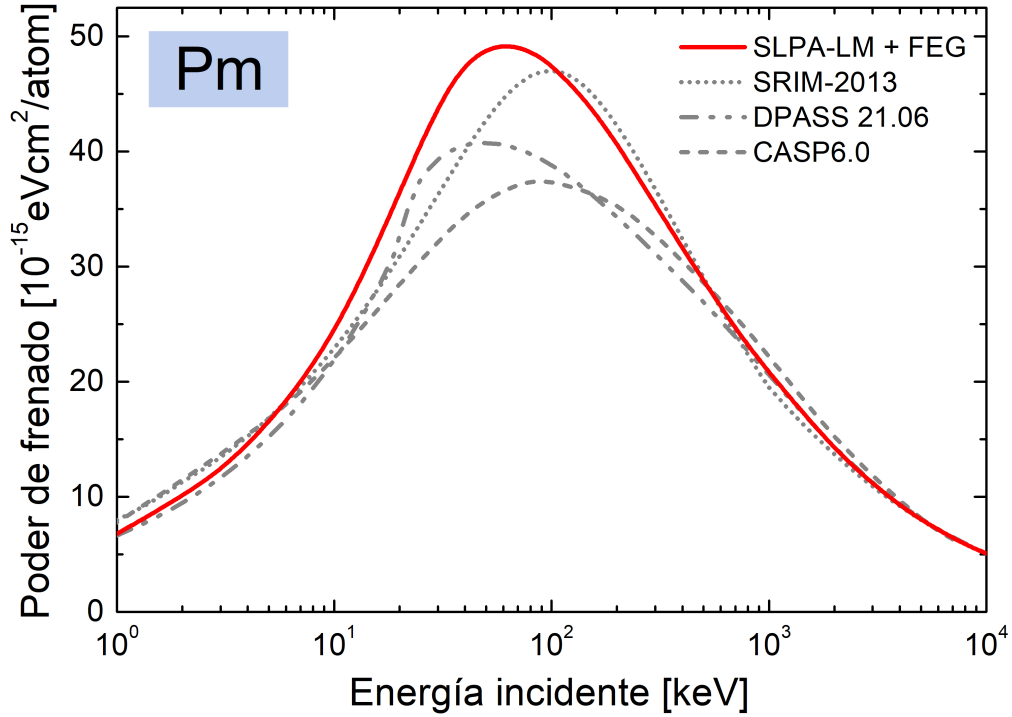


Figura 4.17: Secciones eficaces de frenado total teóricas de H en Pm. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 2.05$ ($N_e = 7$) [38] (línea gris a trazos). No hay datos experimentales disponibles.

4.2.6. Samario

Los resultados obtenidos para Sm se muestran en la Fig. 4.18. Notamos que la sección eficaz de frenado total actual concuerda excelentemente con los datos experimentales [111]. Como para los demás blancos, en la Fig. 4.19 mostramos la comparación entre el poder de frenado electrónico obtenido con el modelo propuesto en este trabajo y los resultados srin, DPASS, y CASP, junto con los datos experimentales disponibles. Nuestros resultados muestran un mejor acuerdo con los datos de referencia en la región de energía intermedia (80–300 keV), donde los modelos existentes presentan mayores discrepancias. En el régimen de alta energía (> 300 keV), todos los

modelos mostrados tienden a converger.

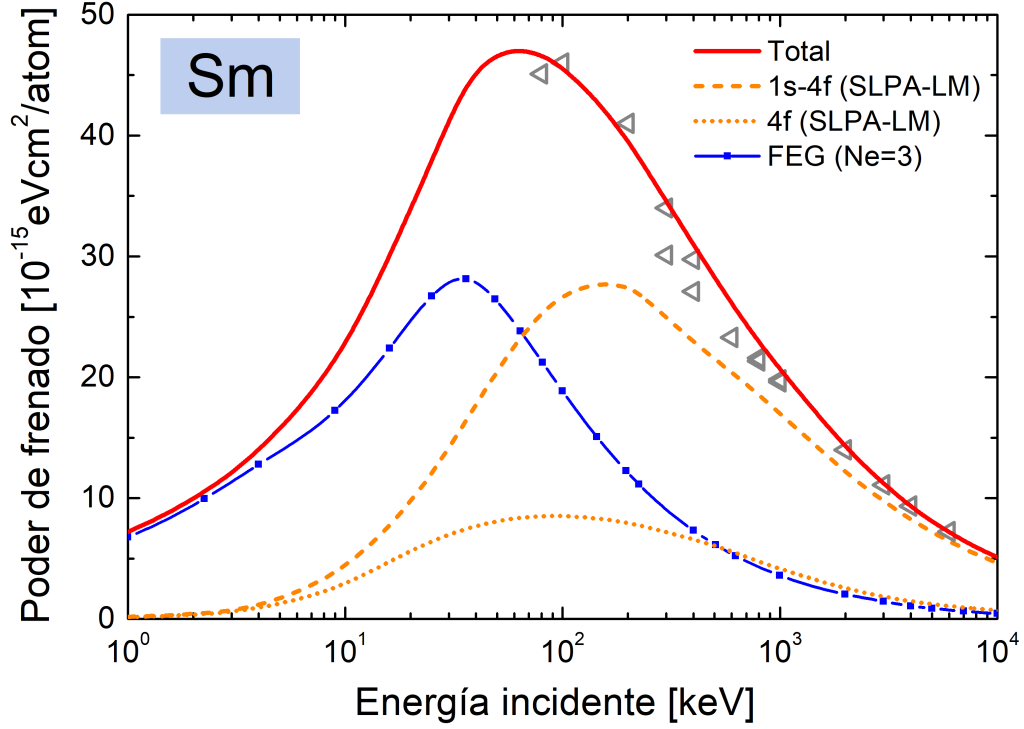


Figura 4.18: Sección eficaz de frenado del samario (Sm) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 2.61$ ($N_e = 3$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). Símbolos: datos experimentales de $\triangleleft$ [111].

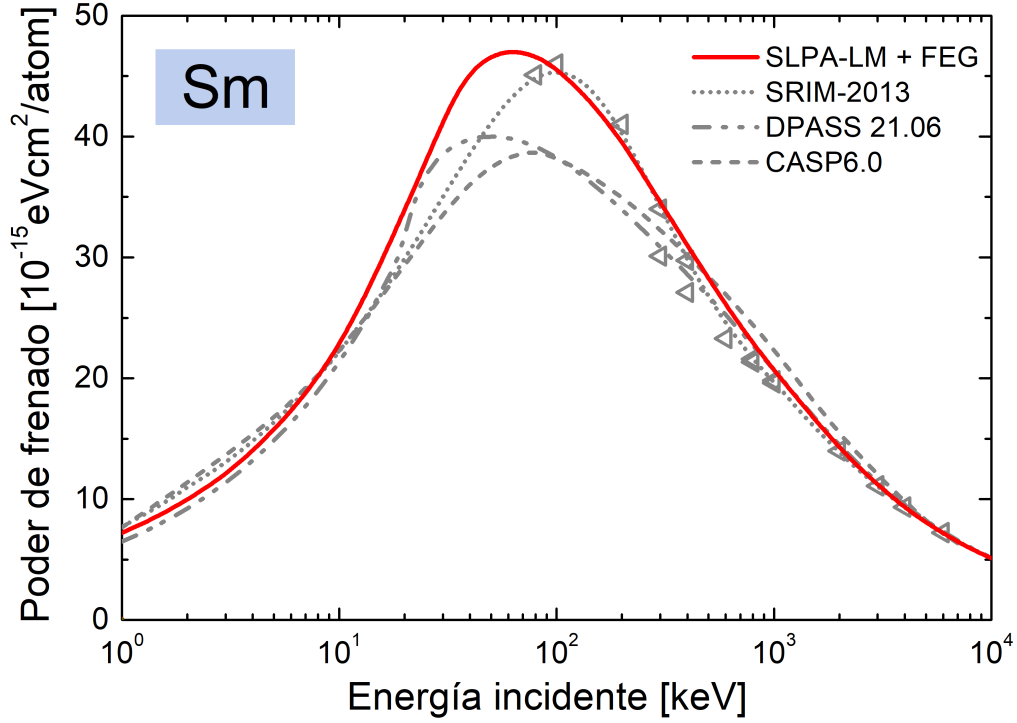


Figura 4.19: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Sm. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 1.88$ ($N_e = 8$) [38] (línea gris a trazos). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.18.

4.2.7. Europio

En la Figura 4.20, representamos el poder de frenado total correspondiente a Eu. Como en el caso de Pr, no hay datos experimentales disponibles. Sin embargo, llama la atención el buen acuerdo entre los diferentes modelos teóricos, tal como puede verse en la Figura 4.21. Podemos notar la diferencia con CASP a bajas energías. Esta sobreestimación puede deberse al número de electrones considerados en el FEG. Como se presentó en la sección anterior, usamos $N_e = 3$ mientras que CASP considera $N_e = 8$.

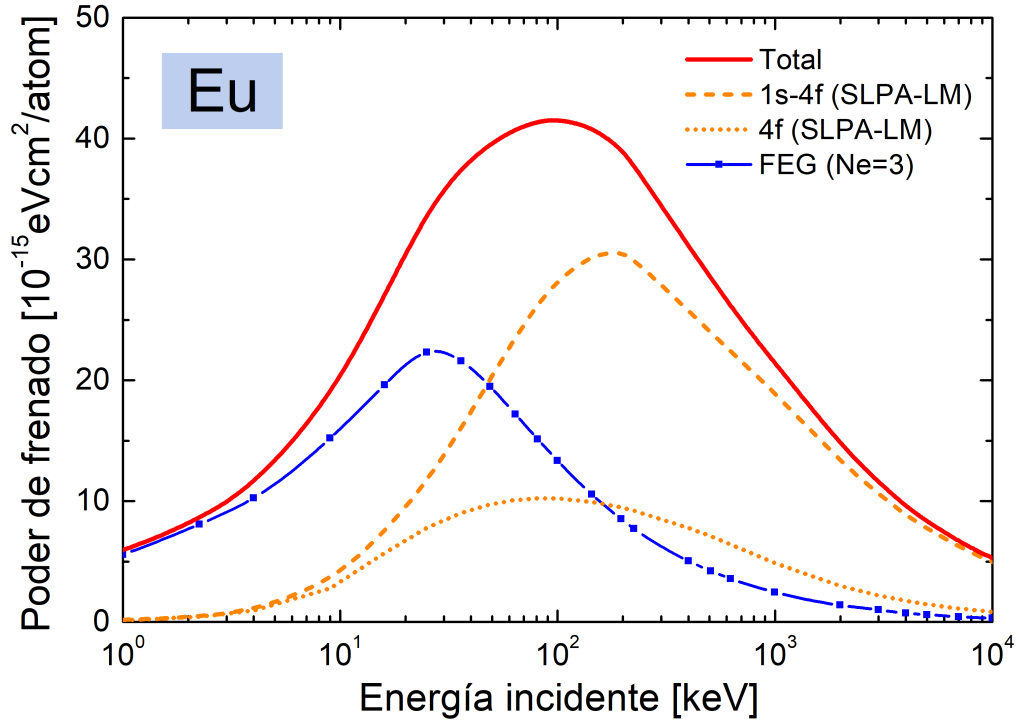


Figura 4.20: Sección eficaz de frenado del europio (Eu) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 2.96$ ($N_e = 3$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). No hay datos experimentales disponibles.

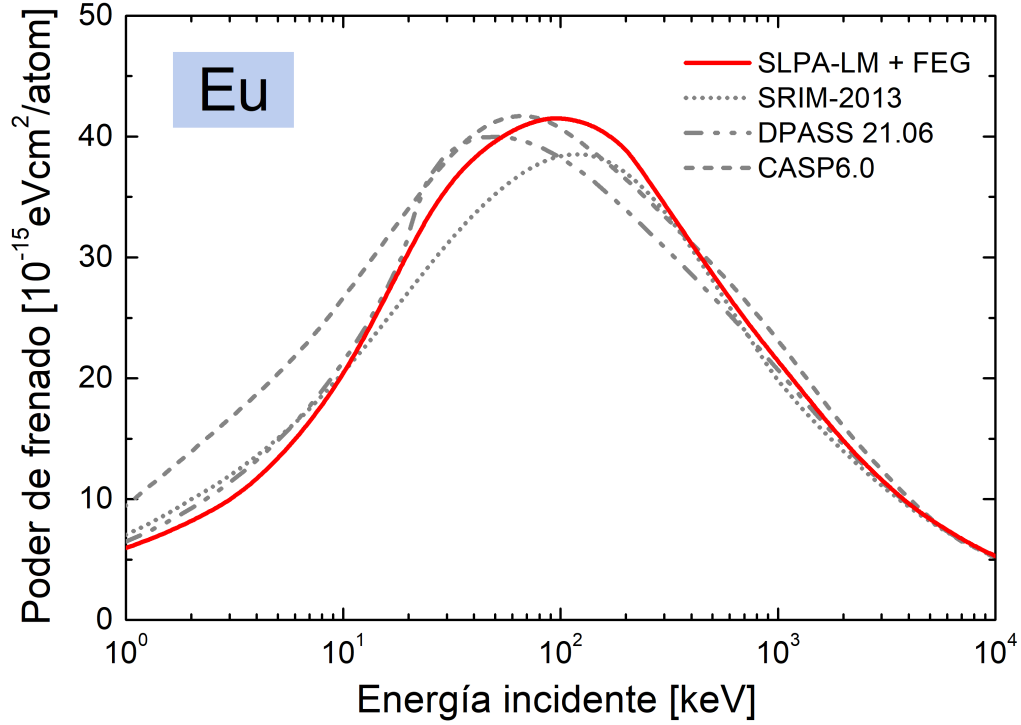


Figura 4.21: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Eu. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 2.13$ ($N_e = 8$) [38] (línea gris a trazos). No hay datos experimentales disponibles.

4.2.8. Gadolinio

El poder de frenado total de Gd se presenta en la Figura 4.22. Puesto que hay suficientes datos experimentales para cubrir todo el rango de energía, consideramos este elemento como un punto de referencia para nuestro modelo. Estas mediciones se pueden separar en dos grupos, los datos anteriores a 1990 [111, 123, 125, 147] con símbolos en gris en la figura, y los posteriores [61] resaltados con símbolos en color. Nuestros resultados concuerdan muy bien con los datos [61] para energías superiores a 10 keV abarcando el máximo de *stopping*. Pero no así a energías menores

a 10 keV. Investigamos esta discrepancia analizando otros valores de N_e en el FEG. Pero decidimos quedarnos en la coherencia para todos los lantánidos del análisis llevado a cabo en la sección 4.1.1.

El poder de frenado total de Gd de los distintos modelos se presenta en la Figura 4.23 junto a los datos experimentales disponibles. Podemos observar que SRIM ajusta su predicción al grupo de datos publicados antes de 1990. Esto se debe a que la última versión de este código es SRIM2013, previo a los datos [61] que son de 2017. Por otro lado, por debajo de 10 keV, todos los modelos teóricos subestiman los datos experimentales de Roth et al. [61].

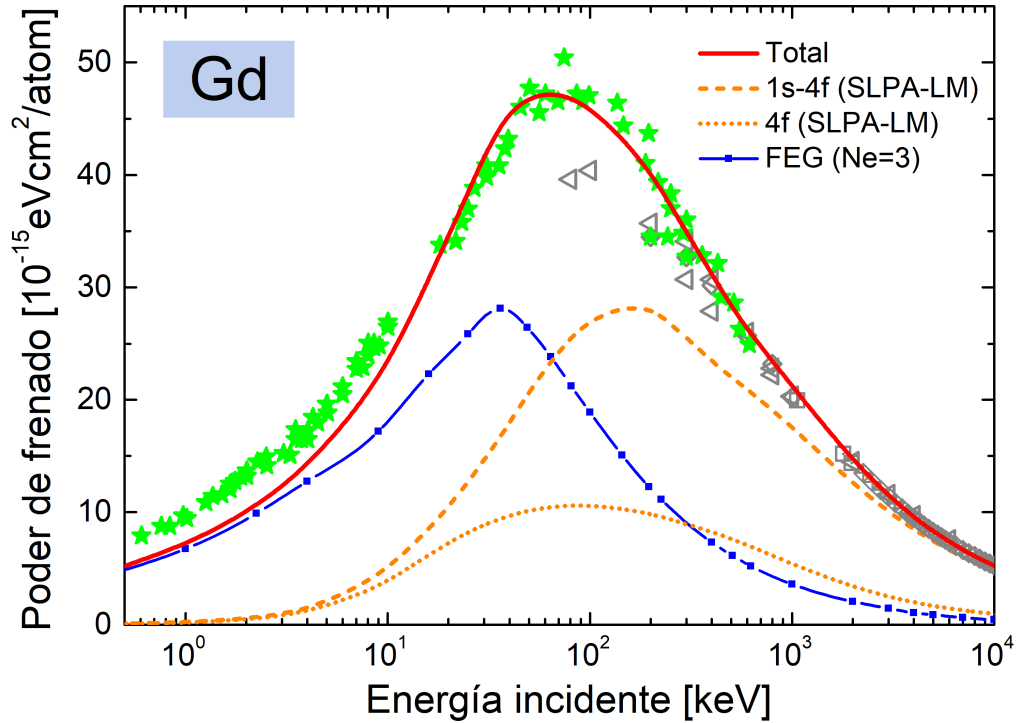


Figura 4.22: Sección eficaz de frenado del gadolinio (Gd) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S=2.61$ ($N_e=3$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). Símbolos: datos experimentales de $\diamond$ [147], $\triangleleft$ [111], $\square$ [125], $\diamond$ [123], y destacamos las últimas mediciones de $\star$ [61].

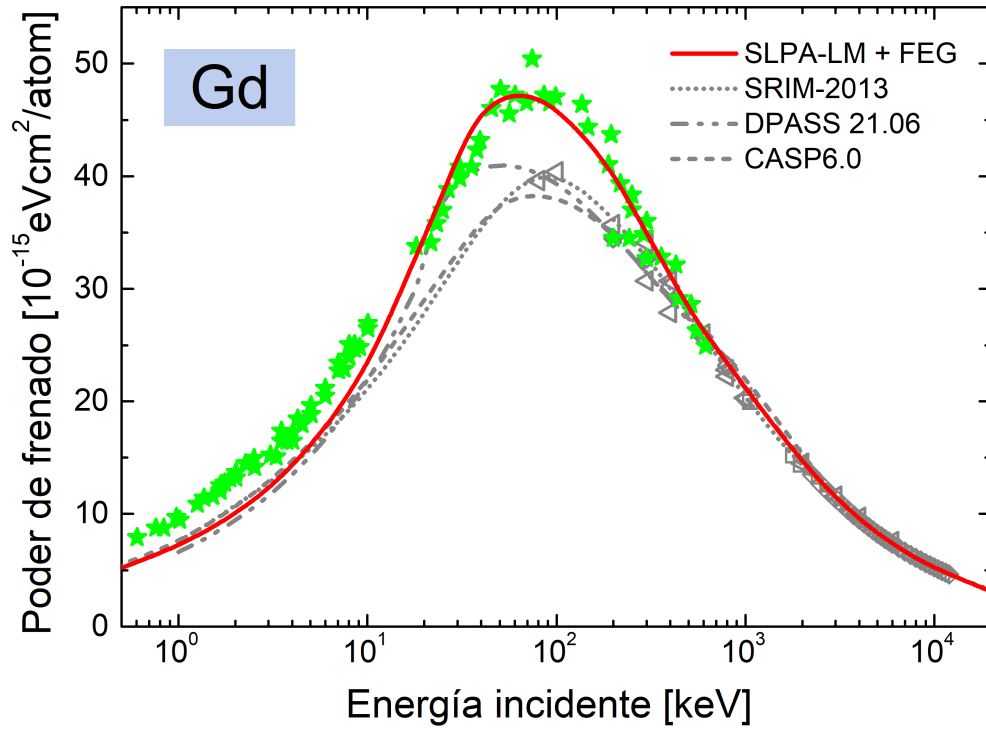


Figura 4.23: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Gd. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 1.88$ ($N_e = 8$) [38] (línea gris a trazos). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.22

4.2.9. Terbio

Mostramos los resultados obtenidos para Tb en la Figura 4.24. Como en el caso de Nd, la energía de ionización de los electrones $4f$ es muy pequeña. Esta característica explica la gran contribución de los electrones ligados al poder de frenado total a bajas energías. Hay dos conjuntos de datos [119, 120], que describen el máximo de frenado. Debido a que no hay datos experimentales disponibles a altas energías, incluimos mediciones recientes para el impacto de He de Ref. [148] considerando la

dependencia Z_p^2 . Estos datos se representan con símbolos llenos en lugar de huecos para señalar que no son para el impacto de protones. Nuestros resultados concuerdan con los datos experimentales por encima de 100 keV.

Como para los otros blancos, en la Figura 4.24 se presenta la comparación entre el poder de frenado electrónico obtenido con el modelo propuesto en este trabajo y los resultados de SRIM, DPASS [39], y CASP más los datos experimentales disponibles [72]. El máximo de frenado de nuestros resultados se encuentra en $E \simeq 50$ keV, lo que concuerda con DPASS; sin embargo, las curvas DPASS y CASP son mucho más bajas. A energías de impacto mayores a 1 MeV todos los modelos convergen.

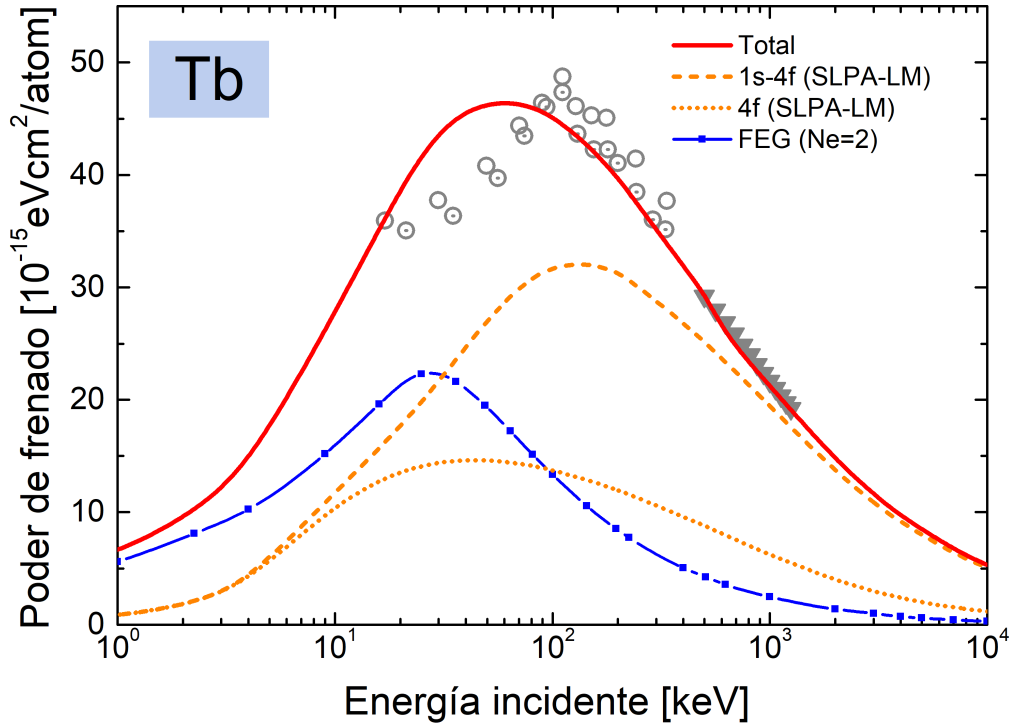


Figura 4.24: Sección eficaz de frenado del terbio (Tb) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 2.96$ ($N_e = 2$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). Símbolos: datos experimentales de $\circ$ [119], $\odot$ [120], y valores equivalentes de He en Tb $\blacktriangledown$ [148].

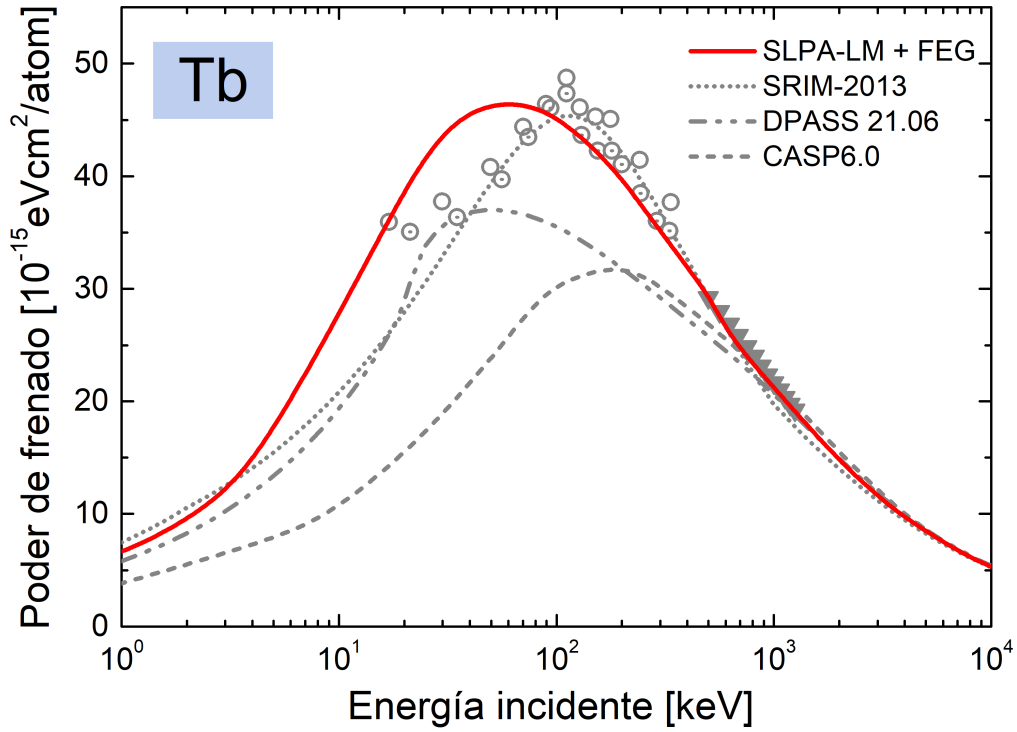


Figura 4.25: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Tb. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 2.94$ ($N_e = 2$) [38] (línea gris a trazos). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.24.

4.2.10. Disprosio

Los resultados para Dy se muestran en la Figura 4.26. Nuestros valores totales concuerdan con los experimentales para energías de impacto superiores a 150 keV. La comparación teórico-experimental es muy similar a la Fig. 4.24 para Tb, con la ventaja de que, en este caso, hay otros datos disponibles en la Ref. [147] para altas energías. En la Figura 4.27 se muestra la comparación de nuestros resultados y los otros modelos, como en las figuras precedentes. los resultados del modelo actual

junto a otros modelos teóricos y SRIM y los experimentos. La comparación es bastante parecida al caso de Tb, los modelos dan muy diferente entre sí, dejando en claro que el poder de frenado en estos elementos es un tema abierto aún, y sobre todo la falta de datos experimentales.

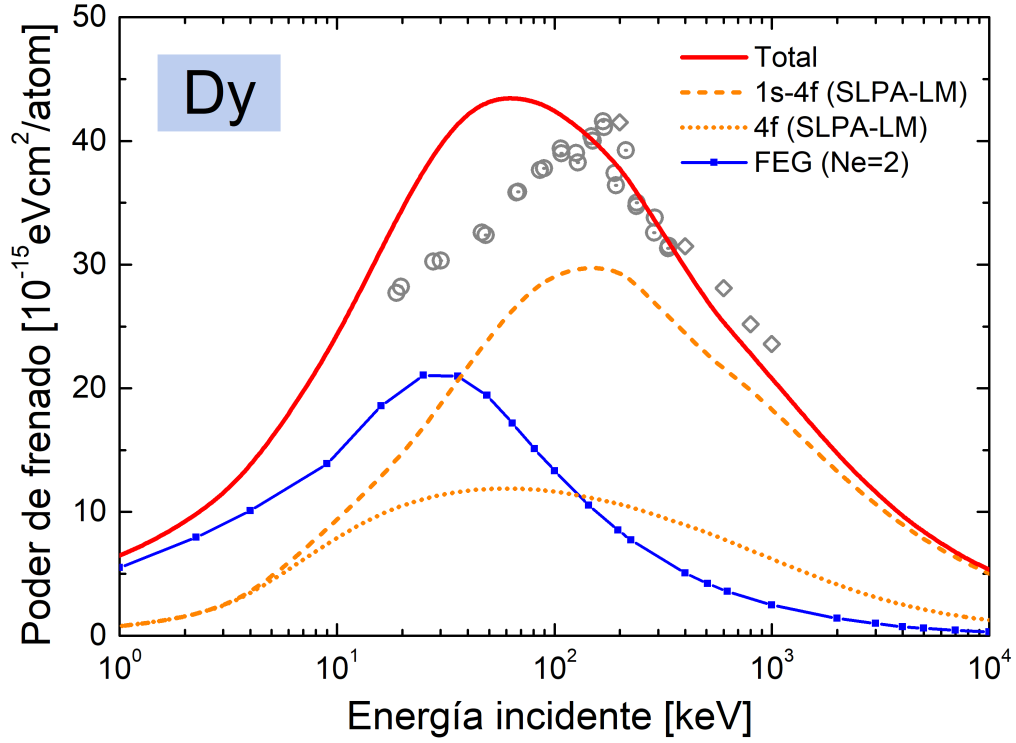


Figura 4.26: Sección eficaz de frenado del disprosio (Dy) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 2.94$ ($N_e = 2$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). Símbolos: datos experimentales de ◇ [147], ○ [119] y ⊖ [120].

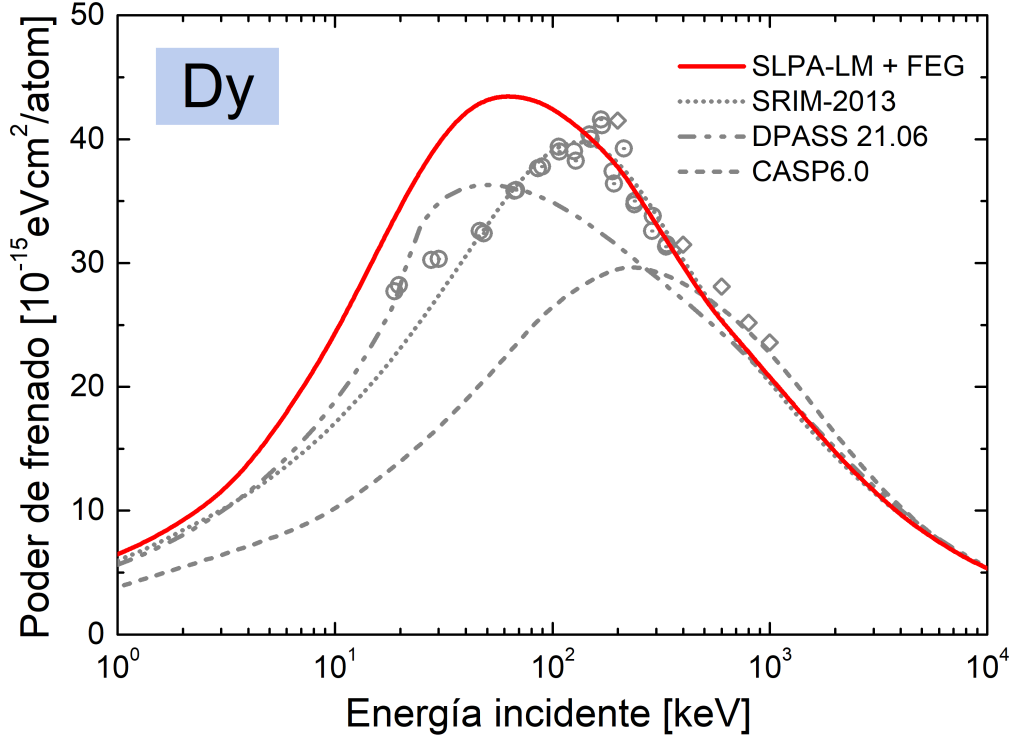


Figura 4.27: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Dy. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 2.94$ ($N_e = 2$) [38] (línea gris a trazos). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.14.

4.2.11. Holmio

En la Figura 4.28, incluimos los resultados obtenidos para protones en Ho. Se pueden hacer dos comentarios: en primer lugar, describimos todos los valores experimentales de Ref. [147], incluso a 200 keV, que llamativamente no es descrito por los otros modelos, SRIM, DPASS21.06 [39], y CASP, como se muestra en la Figura 4.29. Nuestros valores son más altos que los de cualquiera de los otros modelos alrededor del máximo de frenado y por debajo de este. Evidentemente, se requieren

mediciones en el rango de energías intermedias y bajas para este blanco para resolver la discrepancia de las predicciones de frenado en esta región.

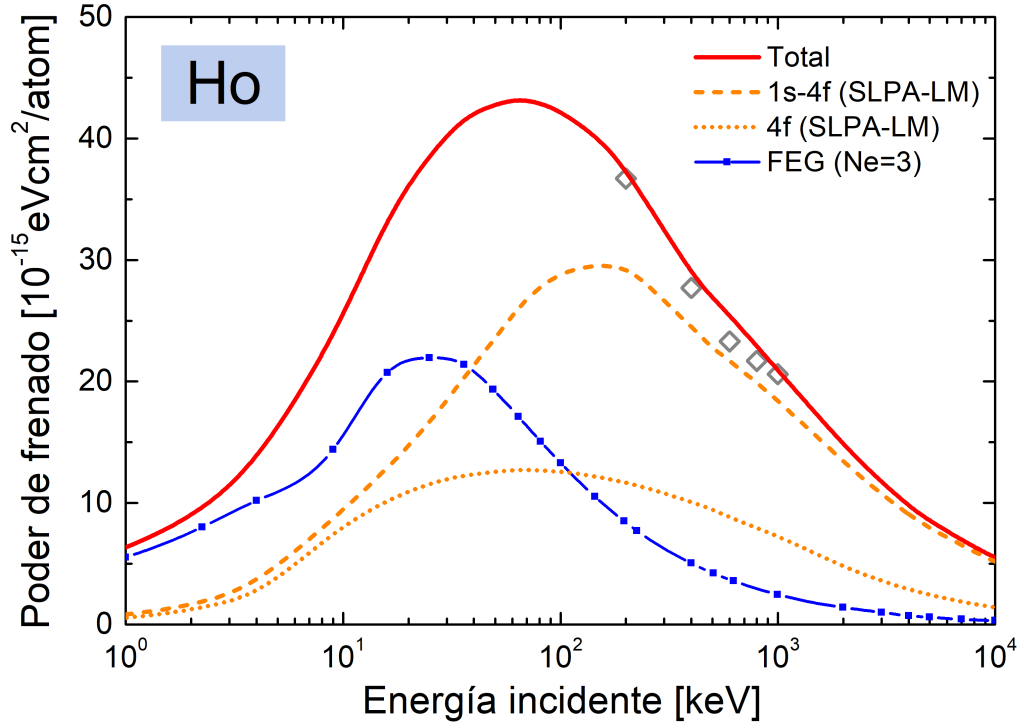


Figura 4.28: Sección eficaz de frenado del holmio (Ho) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 2.93$ ($N_e = 2$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). Símbolos: datos experimentales de $\diamond$ [147].

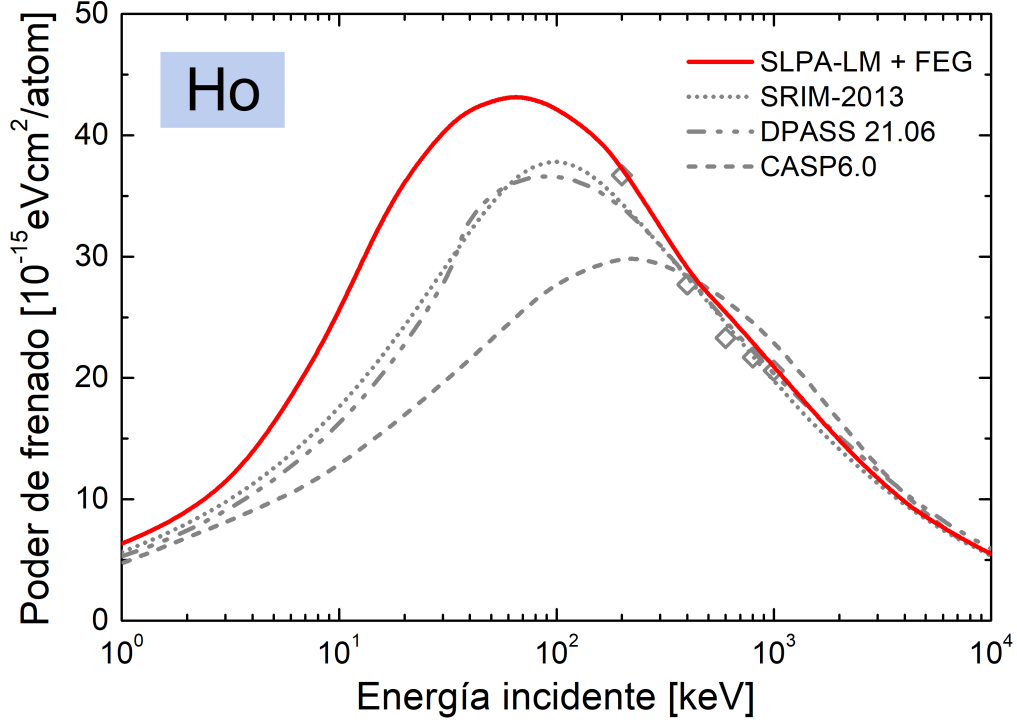


Figura 4.29: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Ho. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 2.56$ ($N_e = 3$) [38] (línea gris a trazos). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.28.

4.2.12. Erblio

Los resultados obtenidos para Er se muestran en la Figura 4.30. El acuerdo con los datos experimentales es excelente en un rango de energías desde 200 keV hasta 2500 keV. Las regiones de energía media y baja no han sido exploradas experimentalmente. En la Figura 4.31 podemos ver la comparación con los otros modelos. Claramente nuestros resultados para Er mejoran las predicciones del resto.

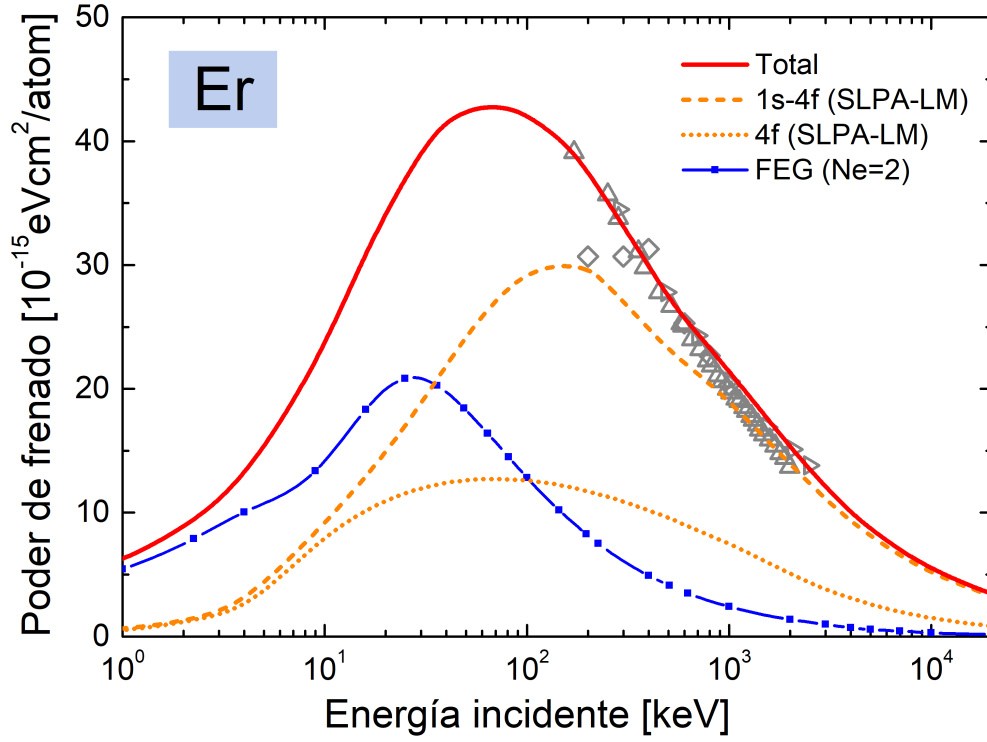


Figura 4.30: Sección eficaz de frenado del disprosio (Dy) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 2.91$ ($N_e = 2$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). Símbolos: datos experimentales de $\diamond$ [147], $\triangle$ [149] y $\triangleright$ [150].

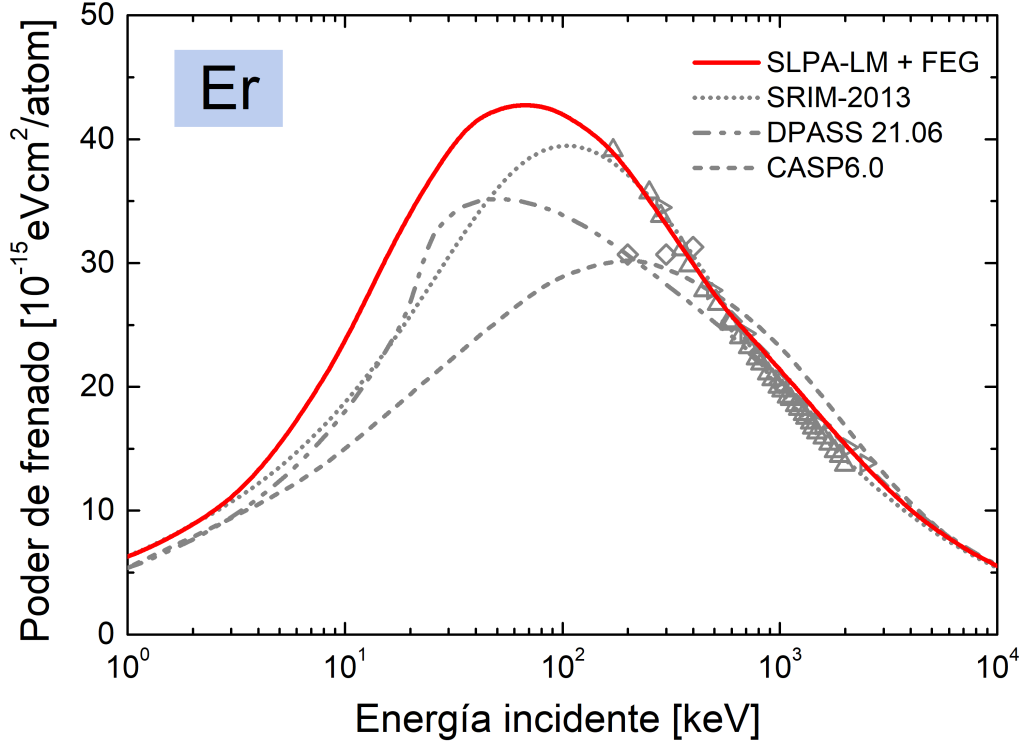


Figura 4.31: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Er. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 2.31$ ($N_e = 4$) [38] (línea gris a trazos). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.30.

4.2.13. Iterbio

Yb y Lu son los últimos lantánidos, y se caracterizan por la subcapa $4f^{14}$ llena. Ésto se refleja en la importancia de esta contribución al *stopping power*. La Figura 4.32 muestra la sección eficaz de poder de frenado para protones en Yb. Nuestros cálculos concuerdan con las mediciones experimentales para energías superiores a 200 keV. La comparación con otros resultados en la Figura 4.33 Muestra que nuestros valores son más altos que los valores de DPASS y CASP en las regiones de

energías intermedias y bajas. Son cálculos teóricos para elementos con más de 70 electrones y una capa de subvalencia importante con 14 electrones. Esta dificultad se refleja en los resultados. Creemos que nuestros resultados por encima de DPASS y CASP que se repiten para los blancos con $Z \geq 64$ señalan la importancia de los cálculos de energías y funciones de onda relativistas y su implicancia para la capa $4f$.

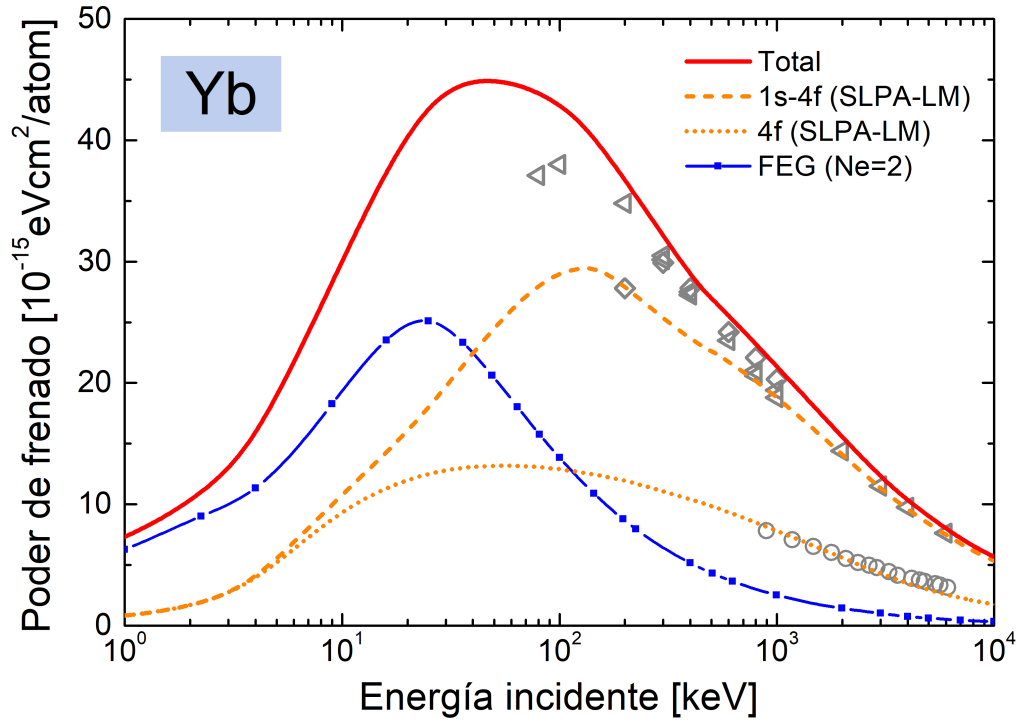


Figura 4.32: Sección eficaz de frenado del iterbio (Yb) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 3.22$ ($N_e = 2$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). Símbolos: datos experimentales de $\diamond$ [147], $\triangleleft$ [111] and ∇ [118].

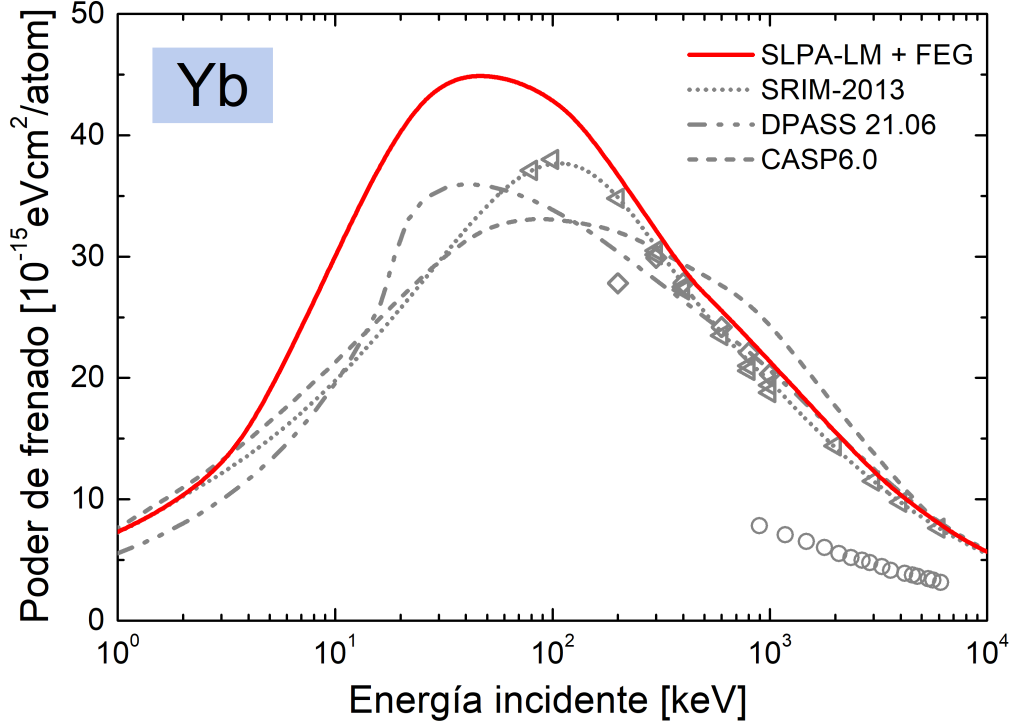


Figura 4.33: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Yb. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 2.23$ ($N_e = 6$) [38] (línea gris a trazos). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.32.

4.2.14. Lutecio

Finalmente, presentamos el poder de frenado de Lu en la Fig. 4.34. Los electrones $4f$ de Lu están más fuertemente ligados ($E_{4f} = 10,6$ eV) que en Yb. Por lo tanto, la contribución de estos electrones a la pérdida de energía se desplaza a energías más altas. La comparación de nuestros resultados con los datos experimentales alrededor del máximo de la curva es bastante buena, pero se desplaza a energías más bajas. Estos datos corresponden a las Refs. [119, 120] sobre los cuales expresamos dudas anteriormente. Dado que no hay datos experimentales disponibles para Lu en el rango

de alta energía, incluimos los las mediciones recientes de poder de frenado por impacto de He en Lu de la Ref. [151], con la conversión de equivelocidad correspondiente y normalizado con Z_P^2 . Estos datos se representan con símbolos llenos.

En la Fig. 4.35 se presenta la comparación con los resultados SRIM, DPASS, y CASP, y los datos experimentales. Los valores semiempíricos SRIM ajustan el máximo experimental. Nuestros resultados quizás proporcionan una mejor concordancia con los datos experimentales en la región del máximo del poder de frenado. Sin embargo, las dudas sobre estos valores experimentales dejan esto abierto. En el régimen de altas energías, arriba de 500 keV, todas las curvas convergen razonablemente, y describen los valores medidos de la Ref. [151].

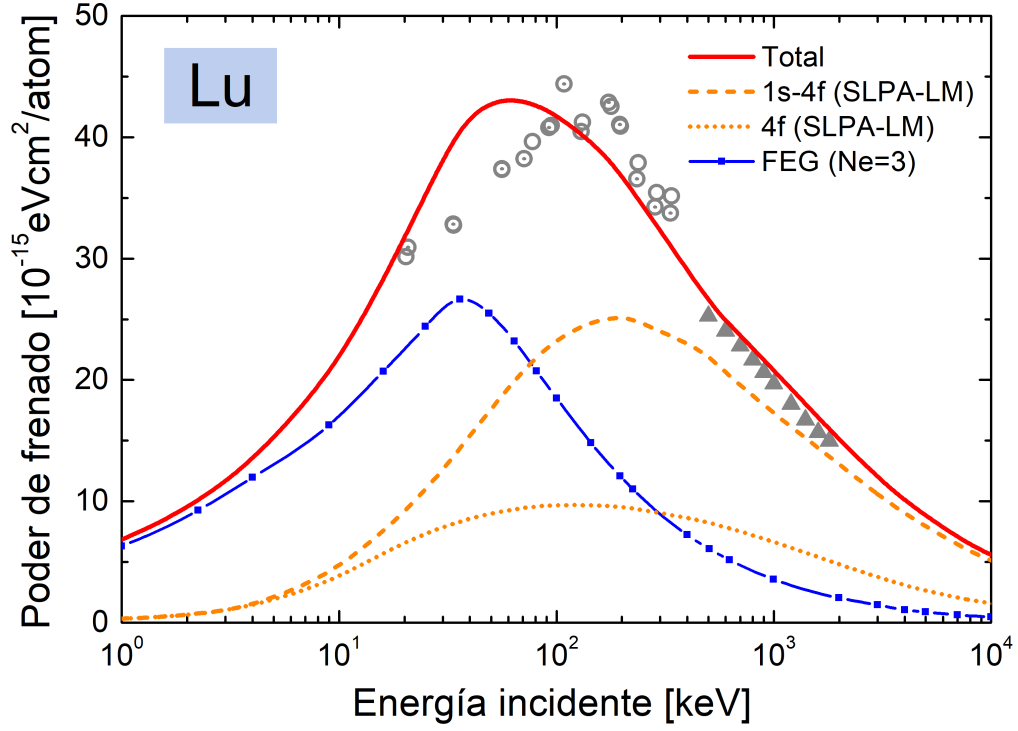


Figura 4.34: Sección eficaz de frenado del lutecio (Lu) para protones incidentes. Curvas: resultados presentes, total (línea roja continua), de los electrones ligados ($1s-4f$) (línea naranja con trazos cortos), y del FEG con $r_S = 2.51$ ($N_e = 3$) (línea de cuadrados azules). Electrones ligados ($4f$) (línea naranja con trazo-punto). Símbolos: datos experimentales de ○ [119], ⊙ [120], y valores equivalentes de He en Lu ▲ [151].

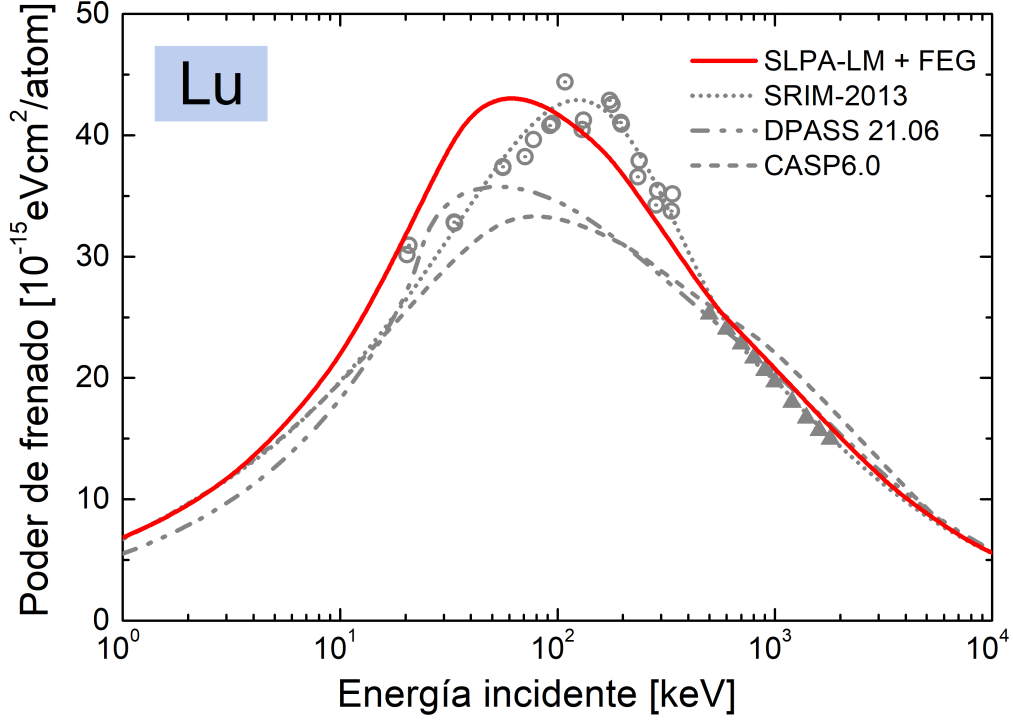


Figura 4.35: Secciones eficaces de frenado total teóricas, semiempíricas y experimentales de H en Lu. Curva sólida: nuestro resultado (línea roja continua). Curvas discontinuas: SRIM [53] (línea gris de puntos), DPASS21.06 [39] (línea gris con doble trazo-punto), y CASP6.0 con $r_S = 1.89$ ($N_e = 7$) [38] (línea gris a trazos). Símbolos: datos experimentales como en la Figura 4.34.

4.2.15. Reglas de escala

La sistematización realizada para los quince lantánidos sólidos, la falta de datos en muchos casos y las dudas sobre algunas mediciones antiguas nos llevó a buscar alguna forma de analizar en conjunto, recurriendo a leyes de escala. Consideramos la propuesta de Lindhard [41] de escalear del número de frenado L de la ecuación (3.5) con v^2/Z_T . El resultado fue sorprendente, como se muestra en la Figura 4.36. La validez de la ley de escala es impresionante; todas nuestras curvas para los 15 blancos con $Z_T = 57 - 71$ casi se unen en una sola banda. Además, todos los datos experi-

mentales, juntos, cubren casi todo el rango de energía. Esto es muy interesante y útil porque podría emplearse para predecir valores para nuevas mediciones en las zonas donde no las hay. La ley de escala también hace que los valores atípicos sean más evidentes. Por ejemplo, los datos para Ce e Yb (∇ [118]) se encuentran notablemente fuera de la tendencia general. Además, los datos medidos por [119, 120] no siguen completamente la escala, en particular para el lantano a energías intermedias. Para analizar más a fondo estas discrepancias, realizamos un gráfico similar para los resultados de SRIM, que se muestra en el recuadro. La naturaleza semiempírica de este enfoque lleva a SRIM a seguir los valores experimentales y esto lleva a que el escaleo de las curvas SRIM sea más abierto que el que obtuvimos con nuestros cálculos.

4.3. Conclusiones

En este capítulo presentamos un estudio sistemático del poder de frenado de los protones en los quince lantánidos: desde La (57) hasta Lu (71). Calculamos la estructura electrónica completamente relativista de los blancos atómicos y notamos la importancia de estos cálculos aún para las capas externas de electrones $5p$, $4f$, $5d$. Analizamos la capa de valencia como la banda de conducción de los lantánidos metálicos. Con base en el estudio sistemático de la estructura atómica y la literatura disponible, consideramos el FEG compuesto por los electrones $6s^2$ más los $5d$ (si los hay). Para los lantánidos ligeros (Ce a Eu), un electrón $4f$ es promovido a la banda de conducción, mientras que ninguno para los lantánidos pesados (Gd a Lu). El número de electrones propuesto en el FEG concuerda, en algunos casos, con valores inferidos experimentalmente y, en otros, con valores derivados teóricamente.

Obtuvimos los valores de poder de frenado a partir de la suma de las contribuciones de los electrones ligados y de conducción. El frenado electrónico de las capas internas se calculó con el modelo SLPA-LM a partir de las funciones de onda y energías de ligadura relativistas. Se prestó especial atención a la contribución de la capa $4f$, se tomó en cuenta el apantallamiento de electrones de la misma subcapa nl y también de capas de energías de ligadura cercanas como la $4f$ y $5p$. En cambio, para el FEG, utilizamos el modelo SPCC para energías inferiores a la energía de

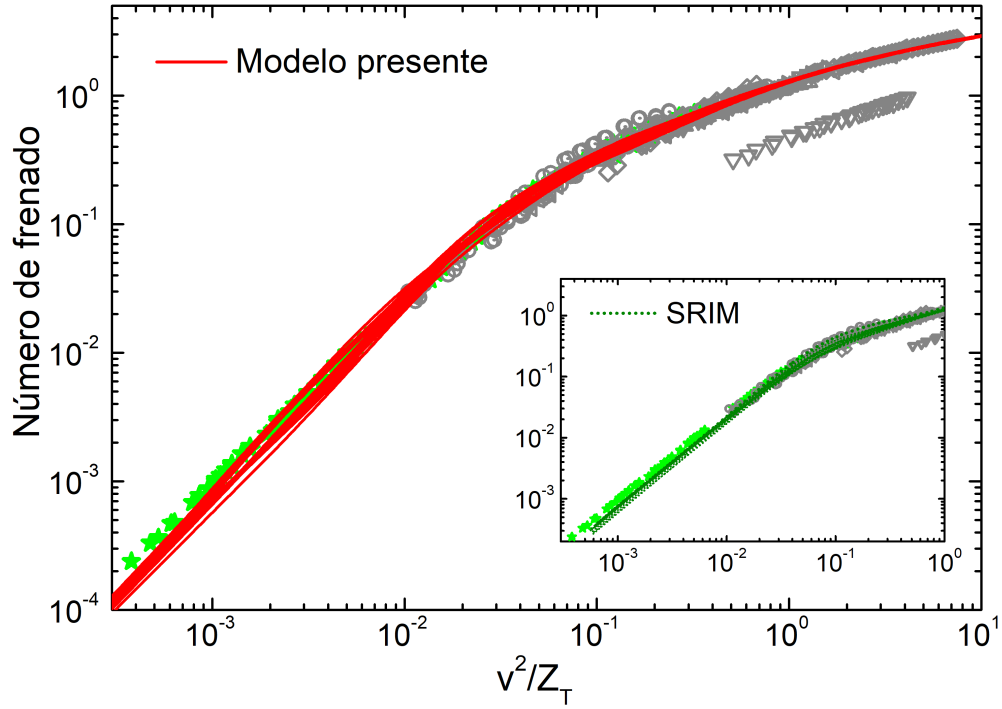


Figura 4.36: Escalado del número de frenado $L = Sv^2/(4\pi Z_T)$ en función de v^2/Z_T para todos los lantánidos. Las curvas sólidas muestran nuestros resultados. Los símbolos son los datos experimentales, con la misma notación que en las Figuras 4.8 a 4.34. Recuadro: el mismo escalado del número de frenado, pero con los resultados SRIM.

excitación del plasmón y el formalismo dieléctrico de Mermin-Lindhard por encima de este valor.

En general, las mediciones experimentales de detención para REE son bastante antiguas (anteriores a 1990). Además, hay solamente 10 fuentes de datos publicadas para los quince lantánidos, y cubren sólo la región de alta energía, excepto para Gd. Nuestros resultados describen bastante bien las secciones eficaces de *stopping power* experimentales, excepto para los valores de baja energía en Gd y algunos conjuntos de datos alrededor del máximo. En particular, para La, Nd y Dy, los únicos datos alrededor del máximo son los incluidos en Refs. [119, 120]. Llamamos la atención sobre estos valores ya que las mediciones para blancos bien conocidos (Al, Au, Ag, Ta y Pt) han mostrado inconsistencias con muchos otros valores experimentales disponibles en la literatura. Destacamos la necesidad de nuevos esfuerzos experimentales sustentados en la importancia de los lantánidos.

Finalmente, uno de los resultados más impactantes de este capítulo es la ley de escala del número de frenado con v^2/Z_T . Esto permite evaluar las curvas teóricas y los valores experimentales. También es una herramienta valiosa para cubrir los huecos en los datos experimentales tanto por blancos como por rangos de energías.

Capítulo 5

La contribución de los electrones de la capa d al poder de frenado de los metales de transición

Según los Principios de Nomenclatura Química de la IUPAC [152], un metal de transición es cualquier elemento de los grupos 3 a 12 de la tabla periódica, también conocidos como elementos del bloque d . Su configuración electrónica es $(n+1)s^{k-j} + nd^j$, donde n es el número cuántico principal, k el número de grupo y j el número de electrones d . La pérdida de energía en los metales de transición *posteriores* ($k = 8 - 11$, $j = 6 - 9$) ha sido objeto de múltiples estudios experimentales [153–166] y teóricos [24, 25, 27–30, 167, 168]. Estos trabajos se basaron no solo en sus conocidas propiedades y aplicaciones sino también en algunos hallazgos específicos sobre el poder de frenado de bajas energías y la respuesta de los electrones d . A energías muy bajas, las aproximaciones del FEG sugieren una dependencia lineal del poder de frenado electrónico con la velocidad iónica. Para Cu, Ag y Au (grupo 11), los valores experimentales mostraron una ruptura inesperada de este comportamiento lineal [153–162]. Esto se ha atribuido a la contribución de los electrones d , como un cambio drástico en el r_S por encima de una velocidad de impacto crítica específica [155]. Sorprendentemente, el poder de frenado de baja energía de Ni, Pd y Pt (grupo 10) no muestra el cambio mencionado en la pendiente [161–165].

Quizás la teoría *ab initio* más detallada, los cálculos de poder de frenado es la teoría funcional de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT) [169]. Esta teoría describe con gran precisión el poder de frenado para iones de bajas energías, siendo más adecuada para el caso de trayectoria por un canal cristalino específico (*channelling*) o blancos monocristalinos, que para las trayectorias aleatorias en blancos policristalinos o amorfos (*off-channelling*). A bajas energías pocos electrones del blanco están sujetos a excitaciones o a ionización. Sin embargo, incluir todos (o la mayoría de) los electrones para extender el poder de frenado a energías intermedias y altas representa una tarea pesada para el modelo TDDFT. Por otro lado, los resultados recientes de TDDFT para el poder de frenado en Fe, Ni, Cu, Pt y Au [24, 25, 27–30] a bajas energías muestran una no-linealidad suave en lugar de la línea discontinua y el cambio en la pendiente mencionados antes.

En este capítulo, presentamos un nuevo modelo no perturbativo para calcular la contribución de los electrones *d* al poder de frenado electrónico en los metales de transición *posteriores*. Nos concentramos en este grupo porque tienen electrones *d* débilmente ligados, a diferencia de los metales de transición anteriores (grupos 3-7) cuyos electrones *d* forman parte del FEG, como vimos en los casos de La, Ta, Hf, W, Mo, y Nb en esta Tesis. El objetivo de este trabajo es describir los valores experimentales a energías de impacto bajas, pero también el poder de frenado electrónico total en un rango de energía extendido. Nos centramos en los grupos 10 y 11, formados por Ni, Pd, Pt, Cu, Ag y Au, debido a los diferentes comportamientos de baja energía encontrados experimentalmente. Asimismo, con el objetivo de testear el modelo en todo el rango de metales de transición posteriores, estudiamos el caso del Fe, elemento perteneciente al grupo 8, elegido por su relevancia tecnológica y por la abundante disponibilidad de datos experimentales existentes para protones en Fe [72]. En la Fig. 5.1 remarcamos los blancos analizados en este capítulo. Nuestro objetivo es comprender y describir la física involucrada en la respuesta de estos electrones *d* débilmente ligados al paso de iones. Los resultados actuales se comparan con la compilación experimental en la base de datos de potencia de frenado electrónico de la IAEA [52, 72], destacando los datos experimentales de baja energía más recientes [154–166]. También comparamos nuestras curvas con los resultados TDDFT (off-channelling) disponibles para estos blancos [24, 25, 27, 28].

TABLA PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

GRUPO

PERIODO

GRUPO I	GRUPO II	GRUPO III	GRUPO IV	GRUPO V	GRUPO VI	GRUPO VII	GRUPO VIII	GRUPO IX	GRUPO X	GRUPO XI	GRUPO XII	GRUPO XIII	GRUPO XIV	GRUPO XV	GRUPO XVI	GRUPO XVII	GRUPO XVIII
1 H 1.008 HIDRÓGENO	2 He 4.0026 HELIO																
3 Li 6.94 LITIO	4 Be 9.0122 BERILIO																
11 Na 22.990 SODIO	12 Mg 24.305 MAGNESIO																
19 K 39.098 POTASIO	20 Ca 40.078 CALCIO	21 Sc 44.956 ESCANDIO	22 Ti 47.867 TITANIO	23 V 50.942 VANADIO	24 Cr 51.996 CROMO	25 Mn 54.938 MANGANESE	26 Fe 55.845 HIERRO	27 Co 58.933 COBALTO	28 Ni 58.693 NIOBELIO	29 Cu 63.546 COBRE	30 Zn 65.38 ZINC	31 Ga 69.723 GALIO	32 Ge 72.64 GERMANIO	33 As 74.922 ARSENICO	34 Se 78.971 SELENO	35 Br 79.904 BROMO	36 Kr 83.798 KRIPTON
37 Rb 85.468 RUBIDIO	38 Sr 87.62 ESTRONCIO	39 Y 88.906 ITRIO	40 Zr 91.224 CIRCONIO	41 Nb 92.906 NIOBIO	42 Mo 95.95 MOLIBDENO	43 Tc (98) TECNICIO	44 Ru 101.07 RUTENIO	45 Rh 102.91 RADIO	46 Pd 106.42 PALADIO	47 Ag 107.87 PLATA	48 Cd 112.41 CADMIO	49 In 114.82 INDIO	50 Sn 118.71 ESTAÑO	51 Sb 121.76 ANTIMONIO	52 Te 127.60 TELURIO	53 I 126.90 YODO	54 Xe 131.29 XENÓN
55 Cs 132.91 CESIO	56 Ba 137.33 BARIO	57-71 La-Lu LANTANÍDOS	72 Hf 178.49 HAFNIO	73 Ta 180.95 TANTALO	74 W 183.84 WOLFRAMIO	75 Re 186.21 RENIUM	76 Os 190.23 OSMIO	77 Ir 192.22 IRIDIO	78 Pt 195.08 PLATINO	79 Au 196.97 ORO	80 Hg 200.59 MERCURIO	81 Tl 204.38 TALIO	82 Pb 207.2 PLOMBO	83 Bi 208.98 BISMUTO	84 Po (209) POLONIO	85 At (210) ASTATO	86 Rn (222) RADÓN
87 Fr (223) FRANCIO	88 Ra (226) RADIO	89-103 Ac-Lr ACTINÍDOS	104 Rf (261) RUTHERFORDIO	105 Db (268) DUBNIO	106 Sg (271) SEABORGIO	107 Bh (272) BOHRIO	108 Hs (277) HASIO	109 Mt (278) MEITNERIO	110 Ds (281) DARMSTADTIO	111 Rg (280) ROENTGENIO	112 Cn (285) COPERNICIO	113 Nh (286) NIHONIO	114 Fl (289) FLEROVIO	115 Mc (290) MOSCOWIO	116 Lv (293) LIVERMORIO	117 Ts (294) TENESIO	118 Og (294) OGANESÓN

METALES DE TRANSICIÓN
GRUPOS 8, 10 Y 11

LANTANÍDOS

57 La 138.91 LANTANIO	58 Ce 140.12 CERIO	59 Pr 140.91 PRASEODIMIO	60 Nd 144.24 NEODIMIO	61 Pm (145) PROMETIO	62 Sm 150.36 SAMARIO	63 Eu 151.96 EUROPIO	64 Gd 157.25 GADOLINIO	65 Tb 158.93 TERBIO	66 Dy 162.50 DISPROBIO	67 Ho 164.93 HOLMIO	68 Er 167.26 ERBIO	69 Tm 168.93 TULIO	70 Yb 173.05 ITERBIO	71 Lu 174.97 LUTECIO
--------------------------------	-----------------------------	-----------------------------------	--------------------------------	-------------------------------	-------------------------------	-------------------------------	---------------------------------	------------------------------	---------------------------------	------------------------------	-----------------------------	-----------------------------	-------------------------------	-------------------------------

ACTINÍDOS

89 Ac (227) ACTINIO	90 Th 232.04 TORIO	91 Pa 231.04 PROTACTINIO	92 U 238.03 URANIO	93 Np (237) NEPTUNIO	94 Pu (244) PLUTONIO	95 Am (243) AMERICIO	96 Cm (247) CURIO	97 Bk (247) BERKELIO	98 Cf (251) CALIFORNIO	99 Es (252) EINSTEINIO	100 Fm (257) FERMIO	101 Md (258) MENDELEVIO	102 No (259) NOBELIO	103 Lr (262) LAWRENCIO
------------------------------	-----------------------------	-----------------------------------	-----------------------------	-------------------------------	-------------------------------	-------------------------------	----------------------------	-------------------------------	---------------------------------	---------------------------------	------------------------------	----------------------------------	-------------------------------	---------------------------------

(1) Atomic weights of the elements 2013, Pure Appl. Chem., 88, 265-291 (2016)

Copyright © 2017 Eni Generali

Figura 5.1: Los blancos estudiados en este capítulo se resaltan con amarillo: metales de transición del grupo 8 (Fe), grupo 10 (Ni, Pd y Pt) y grupo 11 (Cu, Ag y Au).

La nueva propuesta teórica se introduce en la Sección 5.1. Detalles de los cálculos de estructura atómica y electrones de valencia se incluyen en la sección 5.2. Los resultados de secciones eficaces de pérdida de energía en metales de transición y la comparación con las mediciones experimentales disponibles se muestran y analizan en la Sec. 5.3 para bajas energías (Sección 5.3.1.a) y en un rango amplio de energías abarcando el máximo y hasta decenas de MeVs (Sección 5.3.1.b). Finalmente, las conclusiones se dan en la Sec. 5.4.

5.1. Modelo no perturbativo para los electrones d débilmente ligados

Consideremos una carga puntual que se mueve con velocidad v en una nube de electrones inhomogénea, que tienen cierto perfil de velocidades y una función de distribución de momento $f(p)$. La sección eficaz de frenado electrónico, $S(v)$, está dada por [94]

$$S(v) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} f(p) v_r \frac{\vec{v}_r \cdot \vec{v}}{v} \sigma_{tr}(v_r), \quad (5.1)$$

donde $\vec{v}_r = \vec{v} - \vec{p}$ es la velocidad relativa, $\vec{p}$ es el momento del electrón, que es equivalente a la velocidad del electrón en unidades atómicas, $\sigma_{tr}(v_r)$ es la sección eficaz de transporte

$$\sigma_{tr}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) \sin^2 [\delta_l(k) - \delta_{l+1}(k)], \quad (5.2)$$

y $\delta_l(k)$ son los cambios de fase generados por un potencial central $V(r)$.

En la aproximación de FEG, $f(p) = \theta(p - p_F)$, la distribución de velocidades es *homogénea* en el rango $0 - p_F$, como se expresa en la ecuación (2.9). En el presente modelo, proponemos describir la respuesta de los electrones nd (n el número cuántico principal) débilmente ligados a través de una función de distribución de momentos *inhomogénea* dada por

$$f_{nd}(p) = \frac{(2\pi)^3}{2} |\Phi_{nd}(\vec{p})|^2, \quad (5.3)$$

donde $\Phi_{nd}(\vec{p})$ es la transformada de Fourier de la función de onda $\phi_{nd}(\vec{r})$, normalizada al número de electrones N_d en la subcapa nd . Con esta definición, la función de distribución $f_{nd}(p)$, verifica que

$$\int f_{nd}(p) d\vec{p} = \frac{(2\pi)^3}{2} N_d. \quad (5.4)$$

Desarrollamos el cálculo de la sección eficaz de pérdida de energía a partir de la ecuación (5.1). Escribiendo $v_r = (v^2 + p^2 - 2 v p \cos \varphi)^{1/2}$, $d\vec{p} = 2\pi p^2 dp \sin \varphi d\varphi$, y cambiando la variable de integración de φ a v_r , la ecuación (5.1) puede ser expresada como [85]

$$S(v) = \frac{1}{(2\pi v)^2} \int_0^\infty dp p f(p) I(p), \quad (5.5)$$

con

$$I(p) = \int_{|v-p|}^{|v+p|} dv_r v_r^2 (v_r^2 + v^2 - p^2) \sigma_{tr}(v_r). \quad (5.6)$$

Un cambio en el orden de las integrales en las ecuaciones (5.5) y (5.6) resulta en

$$S(v) = \frac{1}{(2\pi v)^2} \int_0^\infty dv_r v_r^2 \sigma_{tr}(v_r) I'(v_r), \quad (5.7)$$

con

$$I'(v_r) = \int_{|v_r-v|}^{|v_r+v|} (v_r^2 + v^2 - p^2) p f(p) dp. \quad (5.8)$$

Este cambio de orden de integración sitúa la función de distribución en la integral interior y la sección eficaz de transporte en la exterior, mejorando el rendimiento de los cálculos numéricos de $\sigma_{tr}(v)$ con el potencial $V(r)$. Consideramos a los electrones d sometidos a un potencial apantallado $V(r)$ dependiente de la velocidad del ion y de la densidad de electrones d . Para ésto, utilizamos el potencial propuesto en el modelo SPCC [84] ya descrito en la sección 2.1.2.

Las funciones de distribución de momento $f_{nd}(p)$ dadas por la ecuación (5.3), se obtuvieron analíticamente mediante la expansión de las funciones de onda $\phi_{nd}(r)$ en Slaters, dado que la transformada de Fourier de las funciones de Slater es analítica utilizando las integrales de Flannery-Levy [170]. Luego, la integración en la ecuación (5.8) también es analítica (ver el Apéndice B para más detalles).

5.2. Características de los metales de transición estudiados en este capítulo

En la Tabla 5.1, incluimos los detalles sobre los metales de transición estudiados en este capítulo. Los electrones d de estos metales se caracterizan porque están débilmente ligados, algunos de ellos son promovidos a la banda de conducción, mientras que otros permanecen unidos al núcleo del blanco. Saber cuántos electrones d son parte del FEG y cuántos permanecen unidos es crucial para la descripción de la pérdida de energía. Con este fin, analizamos los datos experimentales de ELF (por espectroscopía de pérdida de energía de electrones de reflexión en sólidos) de Werner [93]. Los valores ω_p^{exp} y Γ^{exp} en la Tabla 5.1 se obtuvieron del primer pico significativo y el ancho de la ELF en [93]. A partir de ω_p^{exp} , inferimos el número de electrones en el FEG, siguiendo lo explicado en la sección 2.1. El valor obtenido a partir de ω_p^{exp} no es entero, entonces decidimos considerar N_e como el entero más cercano al mismo. A partir de N_e , obtuvimos la frecuencia del plasmon ω_p , los radios de Wigner-Seitz r_S y la energía de Fermi E_F mostrados en la parte izquierda de la Tabla 5.1.

La configuración atómica y las características de los electrones ligados a d en las columnas de la derecha de la Tabla 5.1 son el resultado de los cálculos de estructura atómica de Hartree-Fock (Fe, Ni y Cu) y totalmente relativistas (Pd, Ag, Pt y Au) [101]. Un ejemplo de estos resultados se muestra en la Figura 5.2 para el caso de Au. Se puede notar la diferencia entre resultados no relativistas (ICSTO [171]) y completamente relativistas [105], y la importancia de estos últimos para describir los valores experimentales con $n = 4$ y 5. Estos valores corresponden a los átomos, no a los blancos sólidos. Esta distinción es evidente al comparar los valores de E_F con el valor atómico para la energía de ligadura de los electrones d , E_d , en la Tabla 5.1. Suponiendo que en el metal parte de los electrones d son promovidos al FEG, los restantes deberían estar por debajo del nivel de Fermi, $E_d > E_F$. Podemos notar en la Tabla 5.1, que $E_d \ll E_F$ para Pd, Pt y Au, lo cual es coherente con que varios de los electrones d débilmente ligados de estos metales se transfieren al FEG ($N_e=7$).

Para Cu, Ag y Au sólidos, los cálculos DFT de densidad de estados (DOS) [172]

Tabla 5.1: Estructura atómica, electrones de conducción, y electrones d -ligados para Fe, Ni, Cu, Pd, Ag, Pt, y Au. Columnas del sector izquierdo, carga Z y estructura atómica; columnas centrales, valores del FEG propuestos (N_e , r_s , ω_p , E_F) y experimentales (ω_p^{exp} , Γ^{exp}); columnas de la derecha, resultados atómicos Hartree-Fock [104] (Fe, Ni, Cu) y relativistas [101] (Pd, Pt, Ag, Au) de E_d , $\langle v_d \rangle$ y $\langle r_d \rangle$, la energía de ligadura, la velocidad media y el radio medio de la capa atómica d , respectivamente. La columna N_d representa el número de electrones d ligados, y es igual al número total de electrones s más d menos N_e .

	Elemento	Z	Configuración Atómica	FEG						d -ligados			
				N_e	r_s	ω_p	ω_p^{exp}	Γ^{exp}	E_F	N_d	E_d	$\langle v_d \rangle$	$\langle r_d \rangle$
Grupo 8	Fe	28	[Ar] $3d^6 4s^2$	4	1.68	0.795	0.855	0.26	0.651	4	0.647	3.30	0.95
Grupo 10	Ni	28	[Ar] $3d^8 4s^2$	3	1.80	0.714	0.716	0.27	0.564	7	0.707	3.72	0.965
	Pd	46	[Kr] $4d^{10}$	7	1.50	0.942	0.937	0.21	0.815	3	0.216	2.60	1.61
Grupo 11	Pt	78	[Xe] $5d^9 6s^1$	7	1.51	0.929	0.919	0.17	0.801	3	0.250	2.45	1.71
	Cu	29	[Ar] $3d^{10} 4s^1$	3	1.85	0.689	0.707	0.29	0.537	8	0.491	3.73	0.991
	Ag	47	[Kr] $4d^{10} 5s^1$	3	2.09	0.572	0.625	0.20	0.420	8	0.641	2.88	1.37
	Au	79	[Xe] $5d^{10} 6s^1$	7	1.57	0.877	0.864	0.12	0.742	4	0.309	2.67	1.58

son tales que $0.05 \leq E_d - E_F \leq 0.15$. Para Ni y Pt, estos resultados muestran que la brecha de energía entre los electrones d y la energía de Fermi es incluso menor.

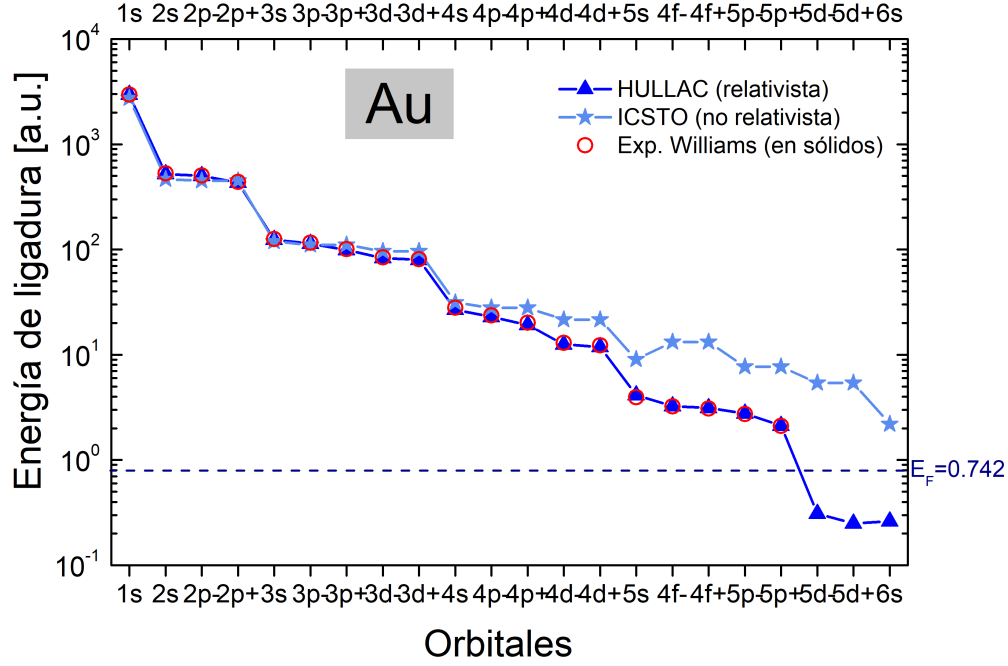


Figura 5.2: Energías de ligadura de Au. Resultados ICSTO no relativistas [171], ★; resultados HULLAC completamente relativistas [79], ▲; datos experimentales en sólidos, ○ [106]; nivel de energía de Fermi, líneas a trazos horizontales.

5.3. Resultados de pérdida de energía en metales de transición

5.3.1. Metales de los grupos 10 y 11

Nuestro modelo tiene como parte fundamental las funciones de distribución de momento *inhomogéneas* $f_{nd}(p)$ dadas por la Ec. (5.3). Por esa razón en la Figura (5.3) las graficamos para Ni, Cu, Pd, Ag, Pt y Au. También incluimos en esta figura la distribución *homogénea* para el FEG, $\Theta(p - p_F)$. Mientras $\Theta(p - p_F) = 1$ constante y se corta en p_F , la distribución $f_{nd}(p)$ tiene una amplitud menor, pero se extiende mas allá de la esfera de Fermi del FEG y cae drásticamente dentro de la región de Fermi.

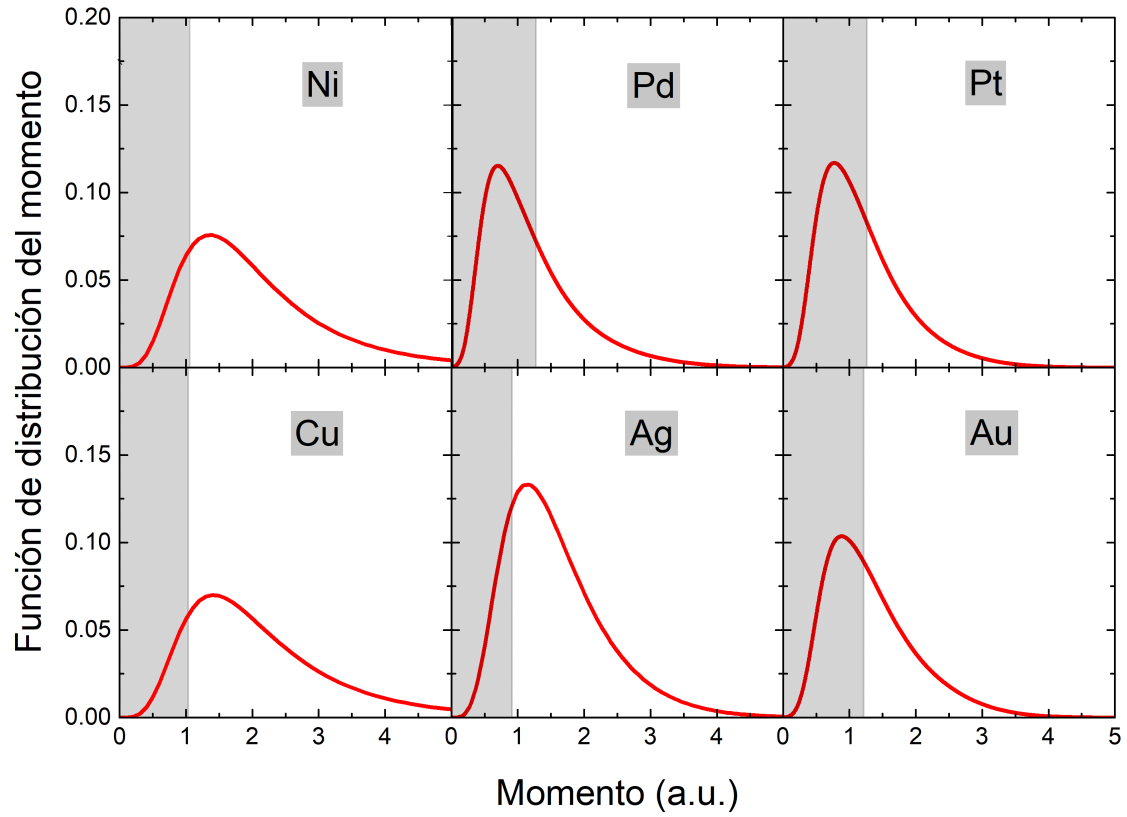


Figura 5.3: Funciones de distribución de los electrones d -electrons, $f_{nd}(p)$ (curva roja sólida) y el FEG (área gris claro desde 0 hasta el momento de Fermi).

Se puede notar en la Figura (5.3) que para Pd, Pt y Au, el valor de v_d es menor que para los demás, lo que explica que el máximo de su $f_{nd}(p)$ se desplace a valores más bajos de p . Volveremos sobre esto más adelante respecto de los resultados.

A continuación se muestra las secciones eficaces de pérdida de energía utilizando el nuevo modelo para la contribución de la capa d y la combinación de éste con modelos de FEG y con la SLPA-LM para las capas más internas. Se compara con todos los datos experimentales disponibles en la literatura y compilados en [72]. Pudimos notar que para energías de impacto cercanas al máximo y por debajo de él, los datos experimentales presentan una dispersión considerable, y esta dispersión es más amplia para los blancos históricamente más medidos (Au, Ag, Cu, Ni). Como la problemática a tratar en este capítulo es la del posible quiebre de la linealidad del *stopping power* a bajas energías de impacto, y es la zona donde esperamos que el nuevo modelo no perturbativo para los electrones d aporte una respuesta, nos enfocamos en los experimentos en esta zona. Resaltamos los datos experimentales a bajas velocidades de impacto ($v \leq 1$) y publicados hace menos de 35 años (1990 en adelante) en las Figuras 5.4 a 5.15 con diferentes colores y con símbolos llenos. En cambio, los datos experimentales de bajas energías pero más antiguos, se muestran en gris y con círculos medio llenos, mientras que las mediciones a energías intermedias y altas, se ilustran con círculos vacíos sin separar por antigüedad.

5.3.1.a. Poder de frenado en la región de bajas energías

En las figuras 5.4 a 5.9, mostramos nuestros resultados para el poder de frenado de Ni, Cu, Pd, Ag, Pt y Au en función de la velocidad, para $0 \leq v \leq 1$. Comparamos nuestros resultados con los datos experimentales en [72] y con los valores de TDDFT disponibles. Las contribuciones de FEG y de los electrones d se muestran por separado, y el poder de frenado total resulta de sumar ambas contribuciones (en este rango de velocidades no hay contribuciones de las capas más internas) .

Las secciones eficaces de poder de frenado de H en Ni se muestran en la Figura 5.4. La importancia de la contribución d es notable por encima de $v = 0.5$. Nuestra curva de *stopping* total describe muy bien los valores experimentales [163, 164]. También incluimos en la Fig. 5.4 los resultados TDDFT de Quashie *et al.* (2018) [25] para

Ni en off-channelling, con 10 electrones activos. La concordancia entre los resultados utilizando el nuevo modelo y los de TDDFT es excelente. Consideramos que la comparación de nuestros resultados con los de un modelo que es *estado del arte* como el TDDFT robustece el modelo desarrollado para la contribución de la capa *d*.

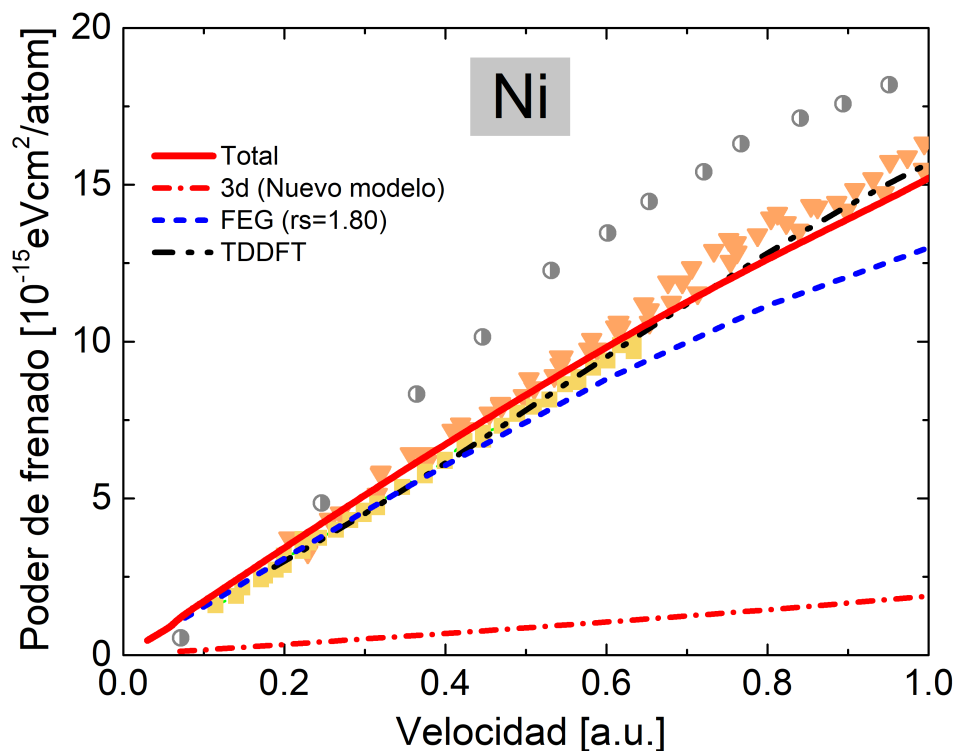


Figura 5.4: Poder de frenado a bajas energías de H en Ni, en función de la velocidad de impacto. Curvas: Poder de frenado total (línea continua roja); capa *d*, nuevo modelo (línea discontinua roja); FEG (líneas discontinua azul); resultados de TDDFT [25] (curva discontinua doble negra). Símbolos: llenos en color, datos experimentales de bajas energías posteriores a 1990, ▼ [163], ■ [164]; semillenos grises, datos a bajas energías previos a 1990, ● [173].

En la Figura 5.5, ilustramos el caso de H en Cu. La dispersión de los datos experimentales en esta región es significativa. A velocidades de impacto muy bajas, hay dos tendencias de los valores experimentales, donde las mediciones de pérdida de energía por la técnica de backscattering de la Ref. [154] son mucho más bajas

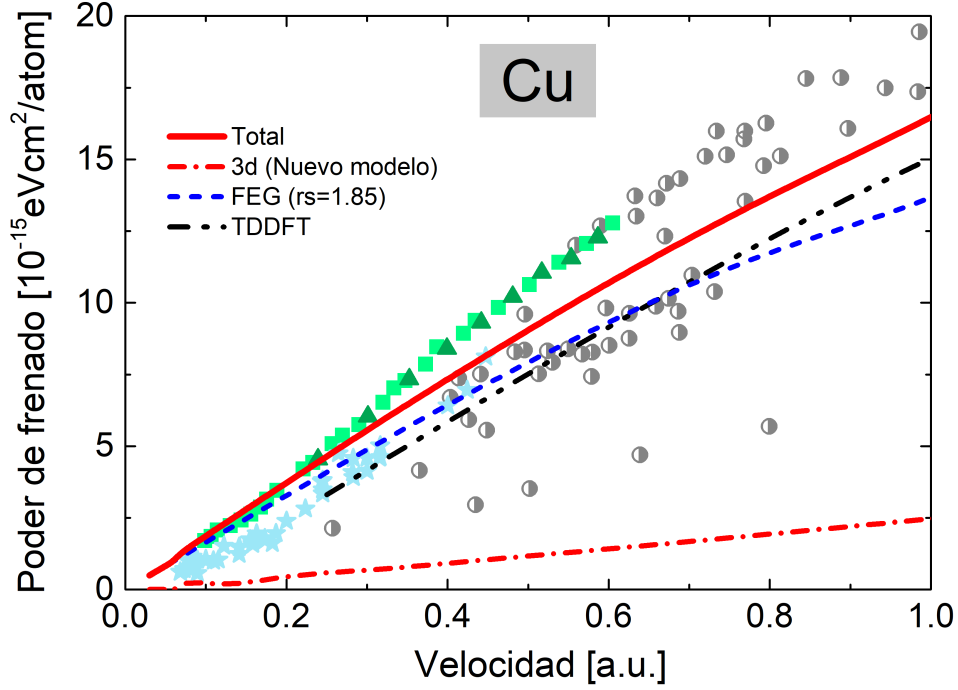


Figura 5.5: Poder de frenado a bajas energías de H en Cu, en función de la velocidad de impacto. Curvas: Poder de frenado total (línea continua roja); capa, nuevo modelo d (línea discontinua roja); FEG (líneas discontinua azul); resultados de TDDFT [24] (curva discontinua doble negra). Símbolos: llenos en color, datos experimentales de bajas energías posteriores a 1990, ★ [154], ■ [155], ▲ [156]; semillenos grises, datos a bajas energías previos a 1990, ● [173–177].

que las mediciones por transmisión a través del metal de las Refs. [155, 156]. Se puede notar además que estos dos grupos de datos están respaldados por separado por mediciones más antiguas, [174] y [178], respectivamente. Nuestra curva de poder de frenado total, que suma el FEG y la contribución $3d$, concuerda con Ref. [155] a las velocidades de impacto más bajas y se ubica entre ambos grupos de datos experimentales para $v > 0,3$. Incluimos también en esta figura los valores TDDFT de Quashie *et al.*(2016) [24]. Nuestros resultados son cercanos pero superiores a estos valores.

Los resultados incluyendo el nuevo modelo para H en Pd se muestran en la Fig.

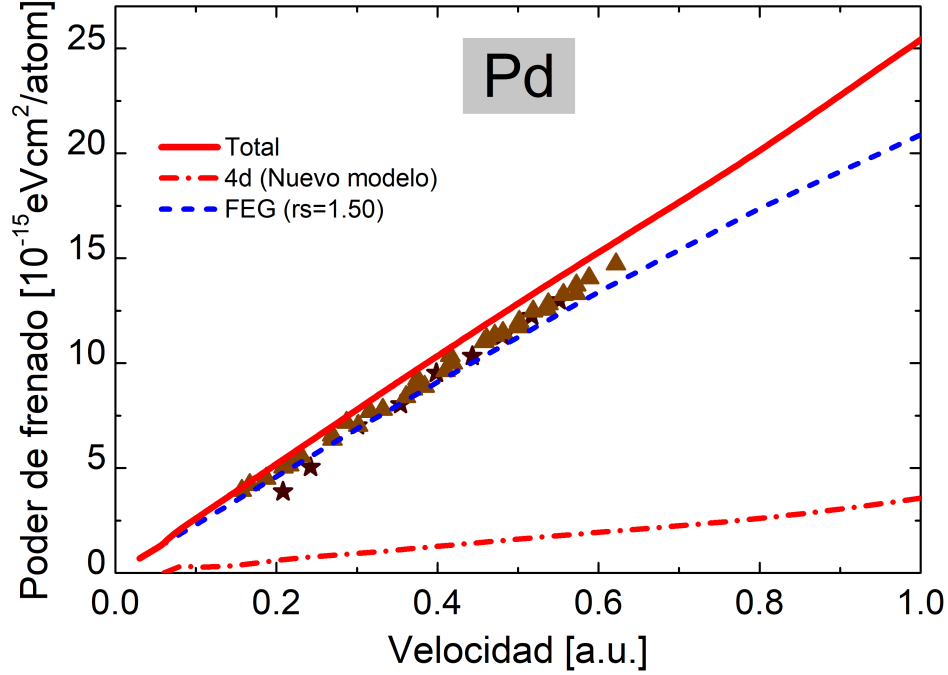


Figura 5.6: Poder de frenado a bajas energías de H en Pd, en función de la velocidad de impacto. Curvas: Poder de frenado total (línea continua roja); capa d , nuevo modelo (línea discontinua roja); FEG (líneas discontinua azul). Símbolos: llenos en color, datos experimentales de bajas energías posteriores a 1990, ▲ [161], ★ [165].

5.6. Podemos observar que a partir de $v > 0.3$ la contribución de la capa d es significativa. Solo hay dos conjuntos de datos disponibles a bajas velocidades, [161] y [165], que concuerdan bastante bien entre sí y muestran una dependencia lineal casi perfecta del poder de frenado con la velocidad de impacto. Nuestros resultados describen estos valores bastante bien aunque ligeramente por encima de los datos experimentales, con diferencias menores al 5%.

En la Figura 5.7, mostramos el caso de H en Ag. Nuestros resultados muestran la importancia de la contribución de la subcapa d por encima de $v = 0.3$. Al igual que en los otros casos, el presente modelo no describe la inclusión de la contribución de los electrones d en el poder de frenado total como un cambio brusco de pendiente en la dependencia con la velocidad, sino como una diferencia suave entre la contribución

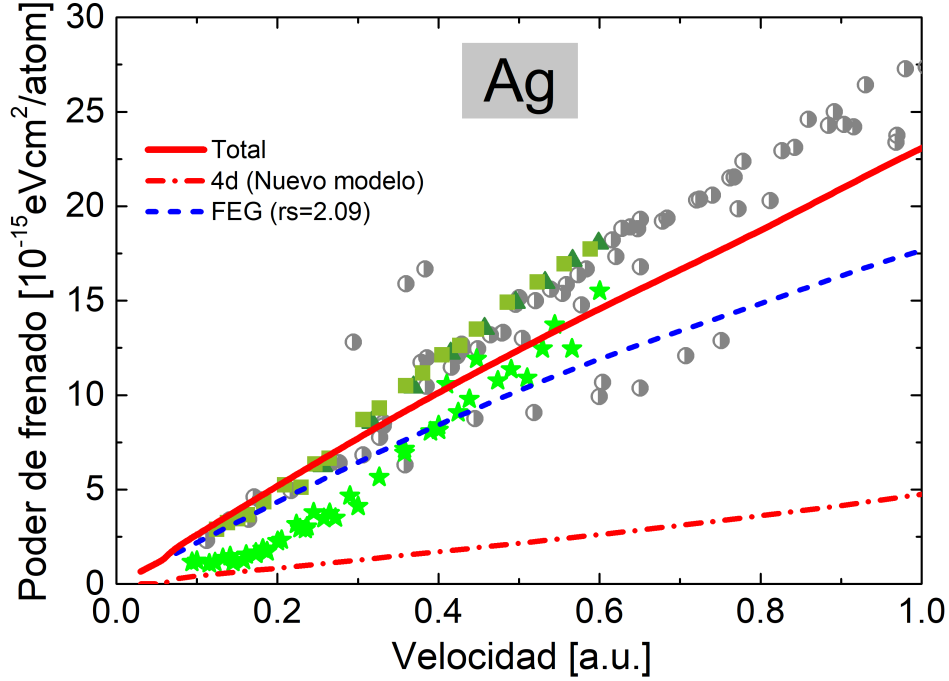


Figura 5.7: Poder de frenado a bajas energías de H en Ag, en función de la velocidad de impacto. Curvas: Poder de frenado total (línea continua roja); capa d , nuevo modelo (línea discontinua roja); FEG (líneas discontinua azul). Símbolos: llenos en color, datos experimentales de bajas energías posteriores a 1990, ■ [155], ★ [160], ▲ [159]; semillenos grises, datos a bajas energías previos a 1990, ◐ [72].

de FEG y los valores de frenado totales. De manera similar al caso de Cu, los datos experimentales se separan en dos grupos: los valores más bajos son mediciones de backscattering de Goebel *et al.* [160], y los más altos son mediciones por transmisión de Cantero *et al.* [155] y Valdes *et al.* [159]. Nuestra curva total está cerca de los valores experimentales de la Ref. [155] para $v < 0.4$, luego de los datos de Ref. [160] para $0.4 < v \leq 0.6$. No encontramos cálculos de poder de frenado con TDDFT para protones en Ag.

La Figura 5.8 muestra nuestros resultados para H en Pt, junto con los datos experimentales recientes del grupo de Uppsala [160, 166] y del grupo experimental del Centro Atómico Bariloche [162]. También se muestran los valores TDDFT recientes

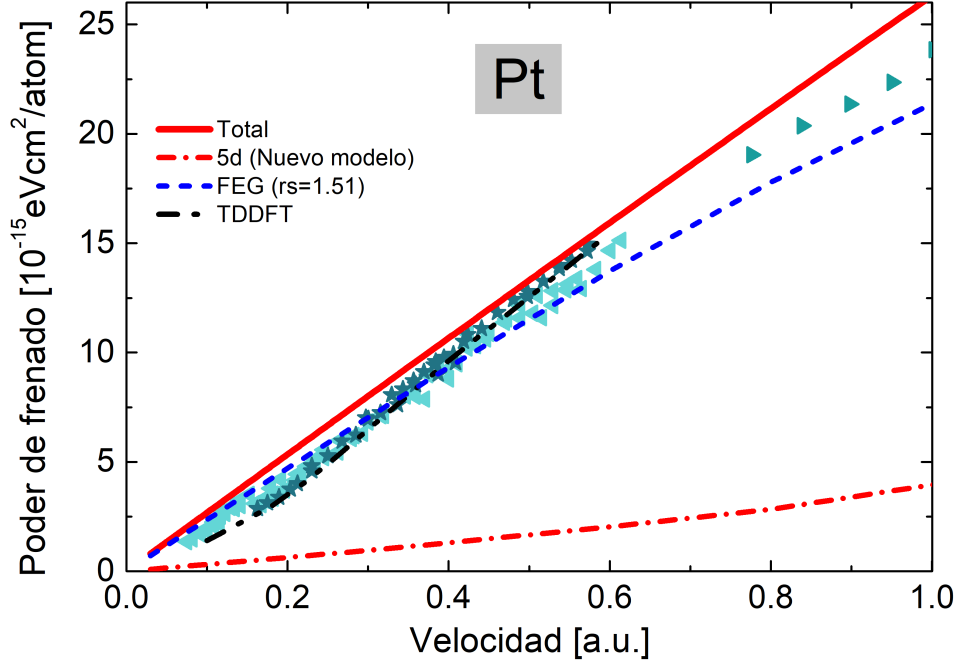


Figura 5.8: Poder de frenado a bajas energías de H en Pt, en función de la velocidad de impacto. Curvas: Poder de frenado total (línea continua roja); capa d , nuevo modelo (línea discontinua roja); FEG (líneas discontinua azul); resultados de TDDFT [28] (curva discontinua doble negra). Símbolos: llenos en color, datos experimentales de bajas energías posteriores a 1990, $\blacktriangleleft$ [160], $\star$ [162], $\blacktriangleright$ [166].

de Li *et al.* [27, 28]. Los datos experimentales [160, 162] concuerdan bastante bien entre ellos, y no indican un cambio de pendiente para la respuesta lineal a bajas energías. Nuestros valores totales, considerando las contribuciones de FEG y $5d$, sobreestiman ligeramente los datos y están cerca de la curva TDDFT para $v > 0.4$. Nuestro modelo para la capa d describe el perfil de velocidades, pero no incluye la energía de ligadura en forma explícita, por lo cual, a muy bajas velocidades de impacto, podría sobreestimar la pérdida de energía.

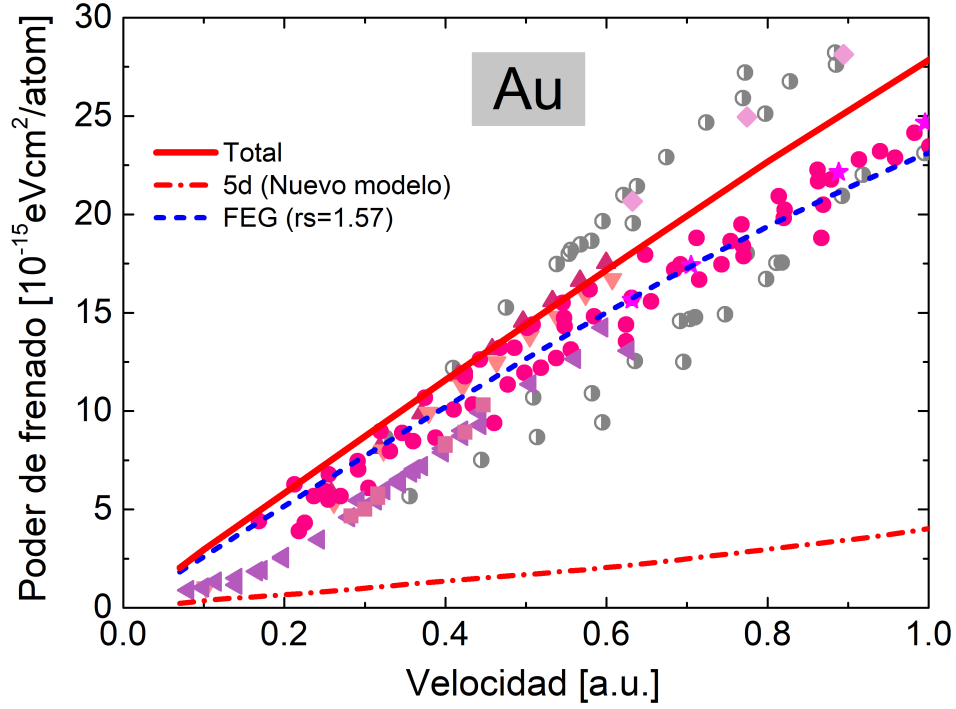


Figura 5.9: Poder de frenado a bajas energías de H en Au, en función de la velocidad de impacto. Curvas: Poder de frenado total (línea continua roja); capa d , nuevo modelo (línea discontinua roja); FEG (líneas discontinua azul); resultados de TDDFT [24] (curva discontinua doble negra). Símbolos: llenos en color, datos experimentales de bajas energías posteriores a 1990, ● [163], ▼ [165], ▲ [153], ◀ [157], ■ [154], ★ [166], ◆ [179]; semillenos grises, datos a bajas energías previos a 1990, ○ [72].

Finalmente, nuestros resultados para H en Au se muestran en la Figura 5.9. Este sistema presenta el número más significativo de mediciones de poder de frenado y la dispersión más amplia de valores [52, 72]. Los resultados actuales concuerdan bien los datos de Valdes y colaboradores [159, 165], mientras que sobreestiman las mediciones de Markin y colaboradores [154, 157]. Notamos que estos últimos datos concuerdan bastante con los valores de poder de frenado en canalización de Au $\langle 100 \rangle$ de Valdes *et al.* [153] y con los resultados de TDDFT en Au $\langle 100 \rangle$ de Zeb y colaboradores [30]. Esto podría ser un llamado de atención sobre la posibilidad de que haya un canal

cristalino preferencial en los experimentos a velocidades muy bajas del proyectil. Los cálculos TDDFT para Au policristalino podrían aportar cierta claridad a este caso. Nuevamente, se puede notar que a partir de $v > 0.3$ la contribución debida a los electrones de la capa $5d$ comienza a tener relevancia en el resultado total de poder de frenado.

Teniendo en cuenta el análisis de las figuras 5.4 a 5.9, podemos decir que la diferencia más clara encontrada entre los metales de transición de los grupos 10 y 11 es la dispersión de los datos experimentales, que es muy importante en el grupo 11 y casi insignificante en el grupo 10. No notamos a partir de nuestros resultados teóricos, ni creemos que se pueda afirmar en base a los datos experimentales, un cambio brusco o quiebre en la pendiente de la pérdida de energía en función de la velocidad. Nuestros resultados concuerdan con las mediciones en metales del grupo 10, y caen en algún lugar en el medio de la nube de datos de los metales del grupo 11. Como ya se mencionó, no descartamos una pequeña sobreestimación en las velocidades más bajas mostradas aquí relacionadas con el ancho de la banda de conducción o con la energía de ligadura E_d . Este tema será objeto de futuras investigaciones.

Para examinar más a fondo el presente modelo, extendimos los resultados de pérdida de energía a energías intermedias y altas y los comparamos con todos los datos disponibles. El objetivo es revisar que la nueva propuesta no solo describa el poder de frenado a bajas energías sino que sea válida en un rango amplio de energías de impacto del proyectil.

5.3.1.b. Poder de frenado en un rango de energía extendido

La pérdida de energía en un rango de energía extendido, desde la región de energía muy baja (0,1 keV) hasta la región de energía alta pero no relativista (100 MeV), se muestra en las figuras 5.10 a 5.15. En estas figuras presentamos nuestros resultados teóricos totales, que también incluyen los valores SLPA-LM [81] para contribuciones de capas internas ($1s - np$, con $n = 3, 4$ para Ni, Cu, Pd y Ag; $1s - 4f$ para Pt y Au) y los resultados Mermin-Lindhard [20] para el FEG para energías superiores a

la de la excitación de plasmones. Incluimos los datos experimentales mencionados en las figuras de bajas energías y agregamos todo el resto de datos de energías medias y altas disponibles. No hicimos distinción en símbolos para estos datos debido a la extensa cantidad existente, pero las referencias de cada uno se encuentran en [72].

La Fig. 5.10 muestra la comparación teórico experimental de la pérdida de energía de H en Ni. Se puede notar que la curva $3d$ extendida para cubrir todo el rango de energías presentado, tiene un máximo en 350 keV/amu. Esto es interesante porque indica que la contribución de la capa $3d$ es máxima cuando la velocidad del proyectil es $v \simeq \langle v_d \rangle$, con $\langle v_d \rangle$ la velocidad media de los electrones $3d$ mostrada en la Tabla 5.1. Aunque hay una sorprendente disparidad de datos experimentales alrededor del máximo de *stopping*, las mediciones más recientes en esta región son de 1986 [180]. Nuestra sección eficaz de frenado total concuerda muy bien con Ref. [163] y con los datos sobre el máximo de detención de Ref. [180]. La comparación con los resultados de TDDFT de Quashie *et al.* [25] (con 16 electrones activos del Ni) es muy buena. Vale la pena destacar a diferencia de TDDFT, nuestros resultados totales incluyen todos los electrones del blanco (hasta la capa K) por medio del SLPA-LM [81], lo que permite extender el rango de energía como se muestra en esta figura.

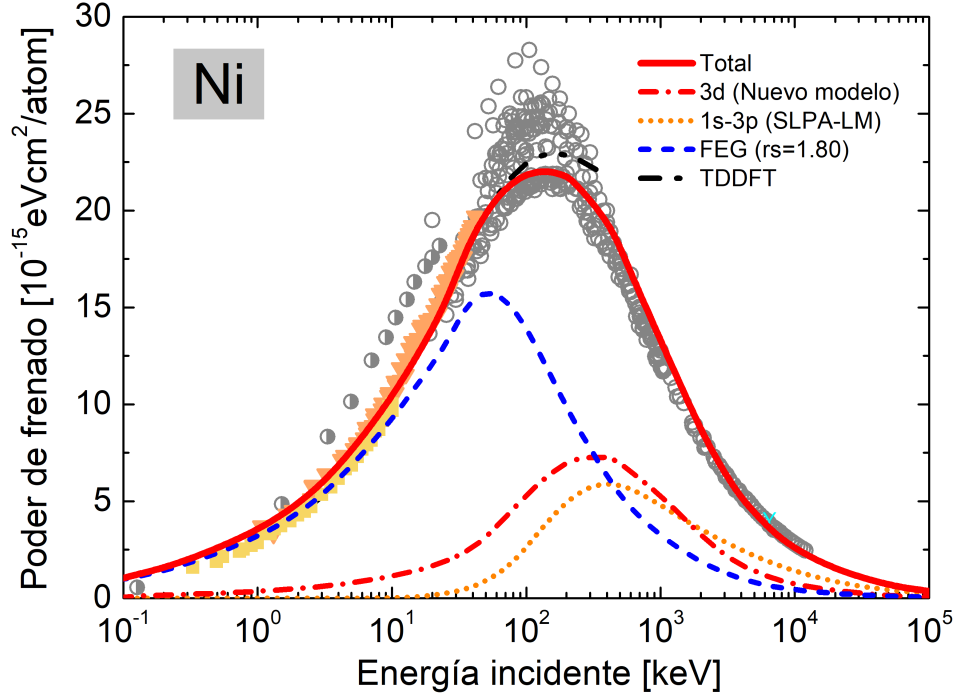


Figura 5.10: Poder de frenado de Ni para H en función de la energía de incidencia. Curvas y símbolos: como en la Fig. 5.4; valores SLPA-LM [81] para las capas internas (curva discontinua naranja); símbolos vacíos grises, datos experimentales de energía media-alta $\circ$ [72].

Las secciones eficaces de frenado para H en Cu en función de la energía de impacto se muestran en la Fig. 5.11. Como se mencionó para el caso de Ni, la contribución $3d$ es máxima para $v \simeq v_d$. Los valores de frenado totales actuales son más altos que los resultados de TDDFT informados en Ref. [24], pero el acuerdo bastante bueno. Para energías altas la curva TDDFT subestima las mediciones debido al número parcial de electrones considerados. Nuevamente, el acuerdo de nuestros resultados con los datos de alta energía se debe a la inclusión de la contribución de las capas internas $1s - 3p$ mediante el uso del SLPA-LM. En la figura puede notarse que a partir de $E = 2$ MeV es la contribución más importante.

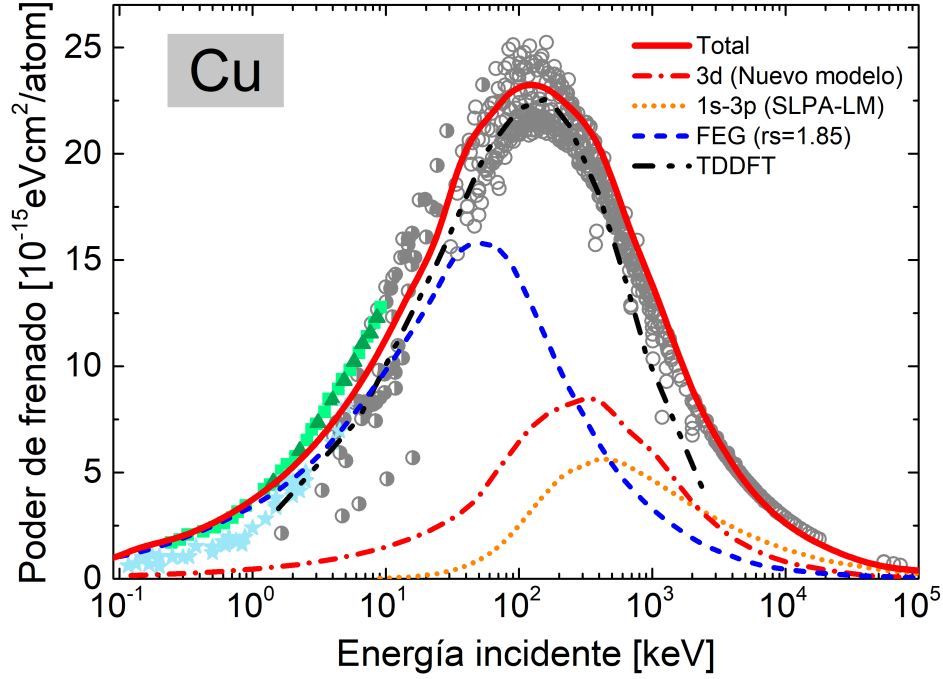


Figura 5.11: Poder de frenado de Ni para H en función de la energía de incidencia. Curvas y símbolos: como en la Fig. 5.5; valores SLPA-LM [81] para las capas internas (curva discontinua naranja); símbolos vacíos grises, datos experimentales de energía media-alta $\circ$ [72].

Los resultados para H en Pd se presentan en la Fig. 5.12. Este caso es diferente de los anteriores: para energías de impacto superiores a 100 keV, el poder de frenado debido a las subcapas $1s - 4p$ es mayor que la contribución de la subcapa $4d$. Los electrones $4d$ de Pd tienen velocidades medias v_d más pequeñas que las de Ni y Cu (véase la Tabla 5.1). Esto es coherente con un máximo de la curva d a energías más bajas ($E \sim 160$ keV). Respecto a nuestros valores totales, éstos concuerdan muy bien con los datos a energías bajas y altas, con el máximo de frenado un poco sobreestimado ($\sim 7\%$ por encima de los valores más altos).

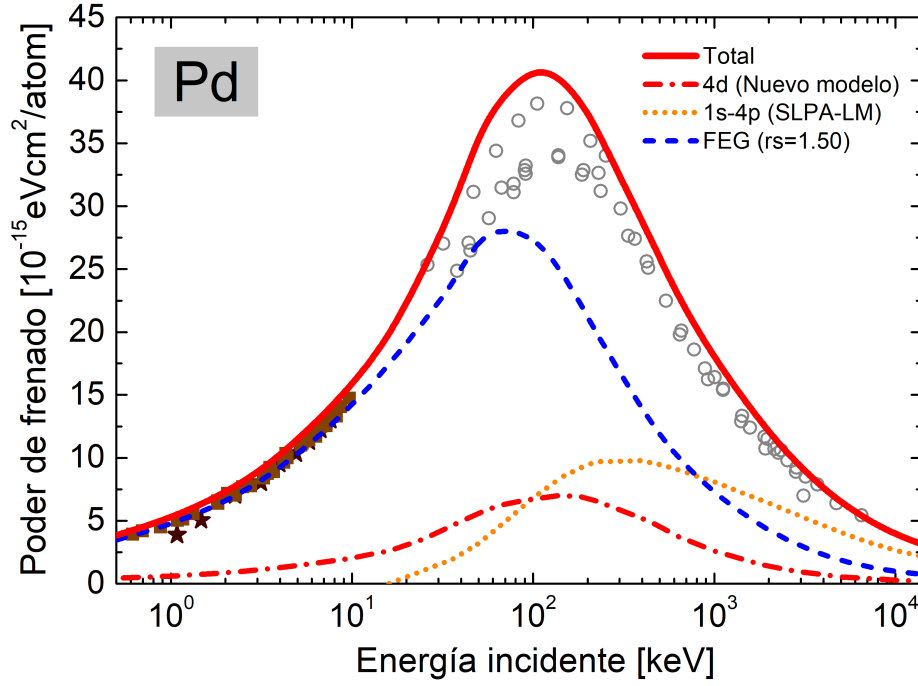


Figura 5.12: Poder de frenado de Pd para H en función de la energía de incidencia. Curvas y símbolos: como en la Fig. 5.6; valores SLPA-LM [81] para las capas internas (curva discontinua naranja); símbolos vacíos grises, datos experimentales de energía media-alta $\circ$ [72].

En la Fig. 5.13, mostramos los nuestros resultados de poder de frenado de H en Ag. La concordancia con los datos experimentales es muy buena, considerando la gran dispersión de valores. El poder de frenado de H en Ag tiene más de cuarenta conjuntos diferentes de mediciones. Sin embargo, el máximo no está bien definido experimentalmente, como se muestra en la Fig. 5.13. Las últimas mediciones alrededor del máximo fueron reportadas por Semrad y colaboradores [130, 180] hace más de 30 años. Vale la pena mencionar que los valores de frenado totales actuales concuerdan muy bien con este grupo de mediciones. La descripción de la contribución del electrón d con el nuevo modelo con un máximo alrededor de 200 keV es crucial para la curva de frenado total reportada.

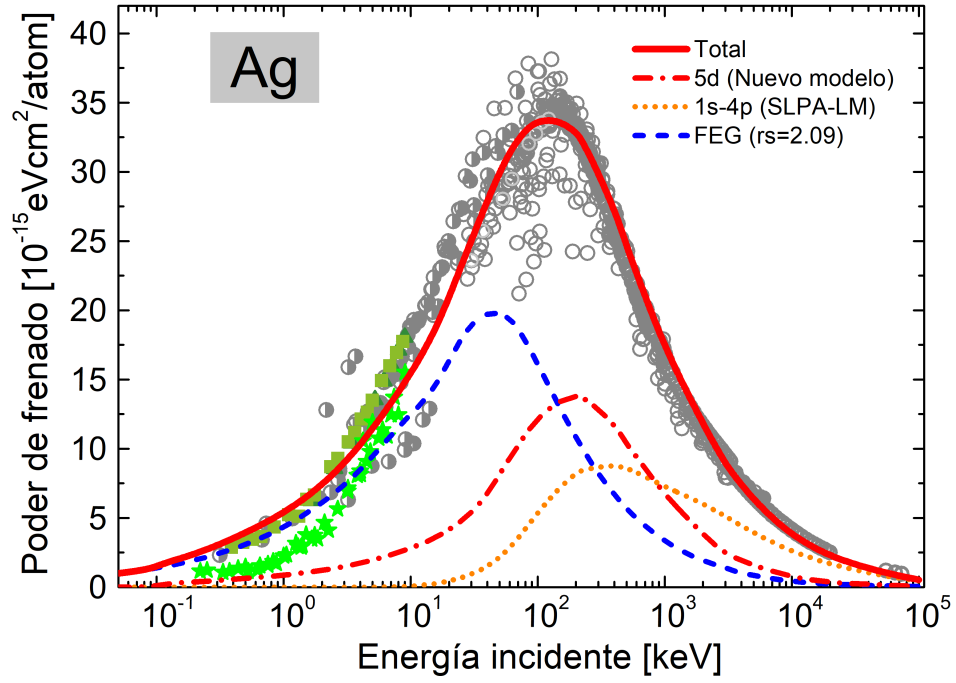


Figura 5.13: Poder de frenado de Ag para H en función de la energía de incidencia. Curvas y símbolos: como en la Fig. 5.7; valores SLPA-LM [81] para las capas internas (curva discontinua naranja); símbolos vacíos grises, datos experimentales de energía media-alta, $\circ$ [72].

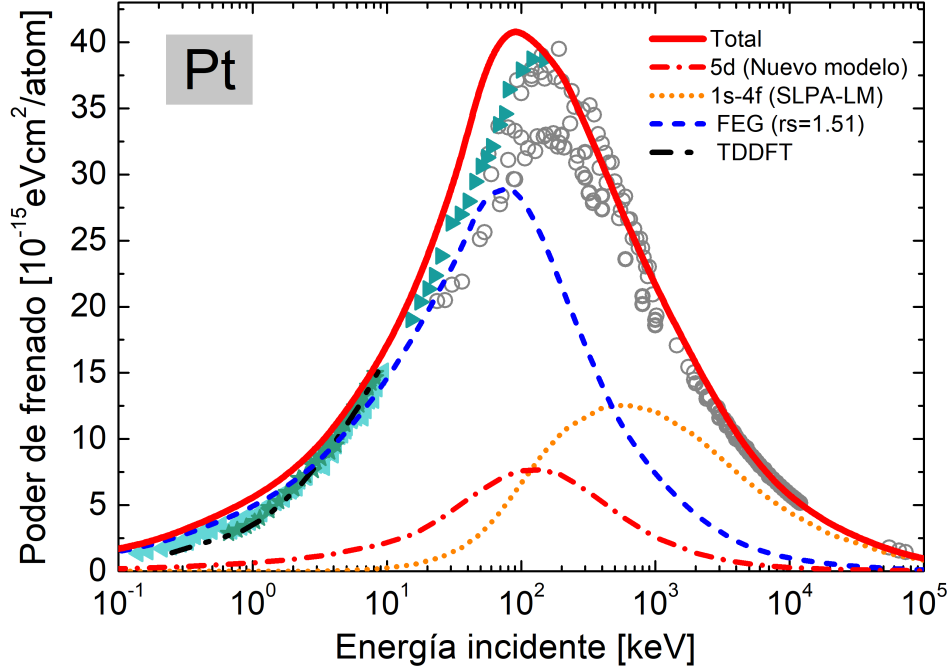


Figura 5.14: Poder de frenado de Pt para H en función de la energía de incidencia. Curvas y símbolos: como en la Fig. 5.8; valores SLPA-LM [81] para las capas internas (curva discontinua naranja); símbolos vacíos grises, datos experimentales de energía media-alta $\circ$ [72].

En las Figs. 5.14 mostramos los resultados para el poder de frenado de H en Pt en función de la energía de impacto, desde 0,1 keV a 100 MeV. Nuestro poder de frenado total concuerda bastante bien con los datos a energías bajas y altas, no así alrededor del máximo. En este caso, nuestra curva alrededor del máximo se aproxima a los datos más recientes de las Refs. [63, 64, 166] con una sobreestimación máxima del 7% a $E = 100$ keV donde se encuentra nuestro valor máximo. Como en todos los blancos estudiados aquí, el máximo de la curva d corresponde a $v \simeq v_d$. Como notamos para el caso de Pd, también Pt tiene una velocidad media de la subcapa d pequeña, lo cual da un valor máximo de la contribución $5d$ en $E \sim 100$ keV, y para energías de impacto más altas esta contribución es mucho menor que la $1s-4f$. Vale la pena mencionar que la mejora introducida en la SLPA a través de SLPA-LM del

Capítulo 3 para las capas $1s-4f$ respalda la excelente concordancia a altas energías.

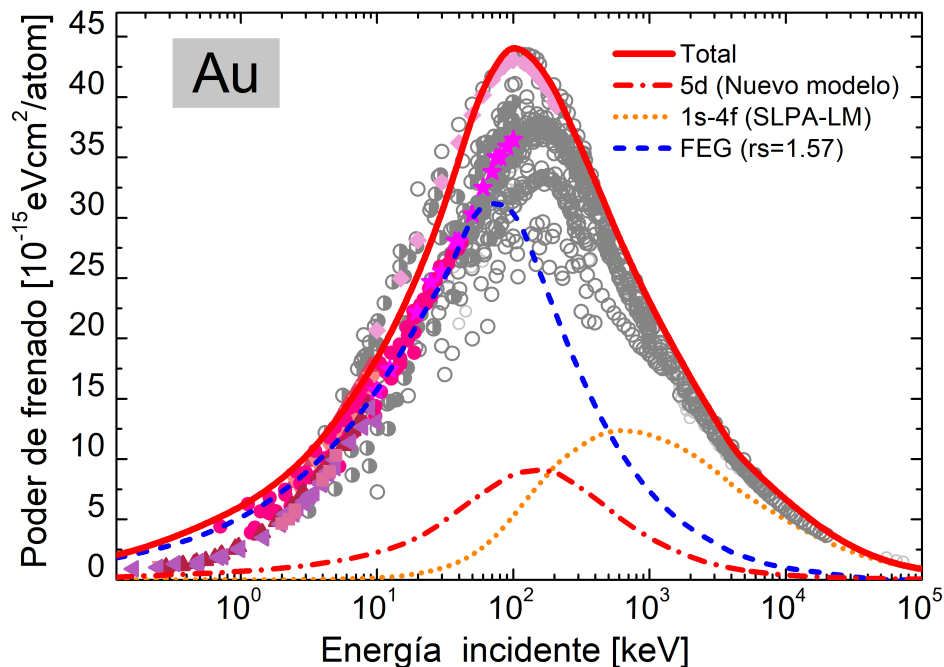


Figura 5.15: Poder de frenado de Au para H en función de la energía de incidencia. Curvas y símbolos: como en la Fig. 5.9; valores SLPA-LM [81] para las capas internas (curva discontinua naranja); símbolos vacíos grises, datos experimentales de energía media-alta $\circ$ [72].

El caso de H en Au es bastante singular. Este sistema tiene el mayor número de medidas de poder de frenado: 72 conjuntos de datos y 1163 valores [52, 72]. También tiene la mayor dispersión experimental, como se puede notar claramente en la Fig. 5.15. Esto dificulta cualquier comparación teórico-experimental y sacar conclusiones de ellas. Nuestros valores totales tienen en general un buen acuerdo con los valores experimentales. Es justo decir que Au, con 79 electrones, es el caso más complejo considerado aquí, y se ha tenido en cuenta la respuesta de todos los 79 electrones. El acuerdo a altas energías utilizando la SLPA-LM es muy bueno. El acuerdo a energías bajas e intermedias es bueno solo con algunos conjuntos de datos. Nuestra curva total sobreestima los datos más recientes a bajas energías [157]

y alrededor del máximo [166], siendo más cercana a las mediciones del grupo de Bariloche en 1996 [179].

5.3.2. Metales de transición del grupo 8, el caso del hierro

En este capítulo desarrolló un modelo no perturbativo para la contribución de electrones débilmente ligados de la capa d a la pérdida de energía. Lo probamos en los metales de transición de los grupos 10 y 11 por el desafío que ciertos datos experimentales representaban. Con el objetivo de testear el modelo en todo el rango de metales de transición posteriores, estudiamos un caso del grupo 8, el primero de los grupos de metales de transición con algunos de los electrones d promovidos a la banda de conducción y otros ligados.

Elegimos el hierro por distintos motivos: la pérdida de energía en hierro es un conocimiento valioso debido a su uso y sus aplicaciones tecnológicas, siendo además el principal componente del acero; para H en Fe hay datos experimentales de pérdida de energía en todo el rango de energías (no así para Os y Ru, los otros elementos del grupo 8); hay datos de 2024 en acero [5] que fueron comparados muy bien con los datos de Fe; y además podemos comparar nuestros resultados con cálculos recientes TDDFT para Fe a bajas energías [181].

La configuración atómica y otras características sobre los electrones del FEG y los d -ligados del Fe se encuentran en la Tabla 5.1. Estudiamos la estructura del Fe a partir de los resultados de Hartree-Fock para las energías de enlace orbital de Bunge et al. [104] y los datos de la espectroscopia de pérdida de energía de electrones de reflexión en sólidos de Werner et al. [93]. Esto es el insumo principal para el cálculo de la contribución de la capa $3d$ que parte de la transformada de Fourier de la función de onda radial, pero también para los cálculos SLPA-LM de capas $1s - 3p$, y para la contribución del FEG con $r_S = 1.68$.

Comparamos las energías de ligadura teóricas de Bunge [104] con las experimentales de Williams [106] tal como se muestran en la Figura 5.16. La concordancia de los cálculos de Bunge [104] con las energías de enlace experimentales en sólidos es buena, excepto para la subcapa $3p$, para la cual el valor teórico es 40% mayor

que el experimental. No se encontraron energías de enlace experimentales para los electrones $3d$ y $4s$ en el Fe sólido, lo cual es coherente con estos electrones en la banda de conducción del metal o con una energía de ligadura mínima. Por otro lado, los datos experimentales de la ELF de Fe de Werner [93] incluidos en la Tabla 5.1 sugieren $N_e = 4$ en el FEG y $E_F = 0.651$, muy cerca de la energía orbital $E_{3d} = 0,647$ de Bunge [104].

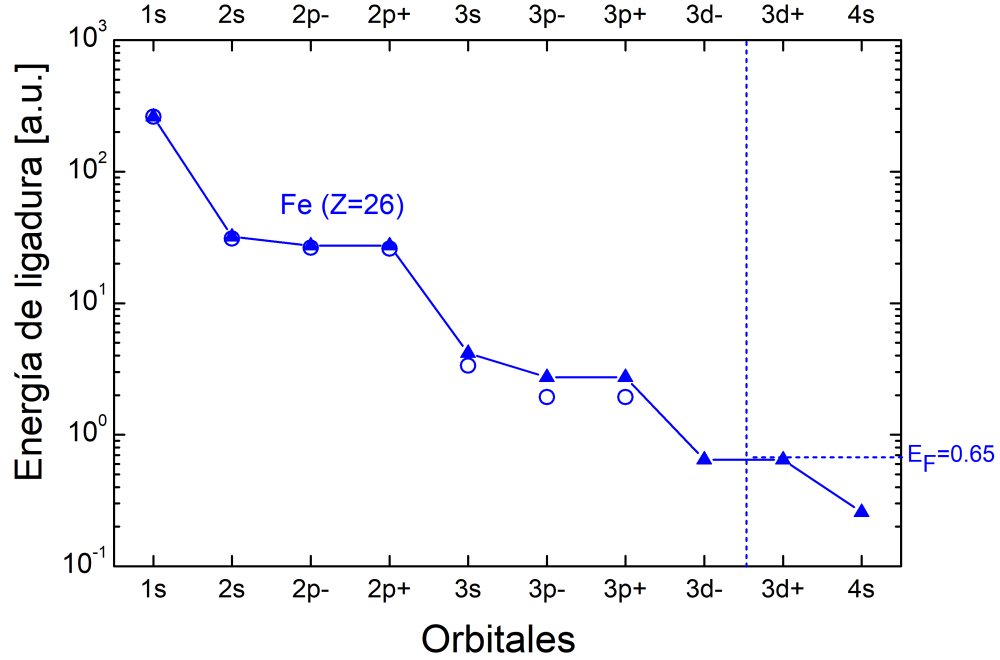


Figura 5.16: Energía de ligadura de Fe. Resultados de Hartree-Fock por Bunge [104], $\blacktriangle$; datos experimentales en sólidos $\circ$ [106]; nivel de energía de Fermi, líneas a trazos horizontales.

Calculamos el poder de frenado de H en Fe considerando las contribuciones independientes de FEG, $3d$ y de las capas internas. En la Figura 5.17, se muestran nuestros resultados para el poder de frenado total en función de la velocidad de impacto iónico para $0 < v \leq 1$. En este rango de velocidades solo las contribuciones del FEG y la capa $3d$ son importantes. Los únicos datos experimentales para protones

en Fe a estas bajas velocidades son las mediciones de Arkhipov y Gott en 1969 [173]. Incluimos también mediciones recientes en acero (eurofer97) [182] basados en que Fe es el componente principal del acero. Comparamos nuestra curva con resultados TDDFT de Zhao et al. [29]. La comparación en la Figura 5.17 es muy buena, tanto con los datos experimentales como con TDDFT. Nuestros resultados sobreestiman ligeramente los valores experimentales a $v < 0.5$ pero están dentro del margen de error de los mismos. Esta figura muestra la importancia de la contribución $3d$ a velocidades muy bajas, ya que si se considerara solamente la contribución del FEG no podrían explicarse los datos experimentales.

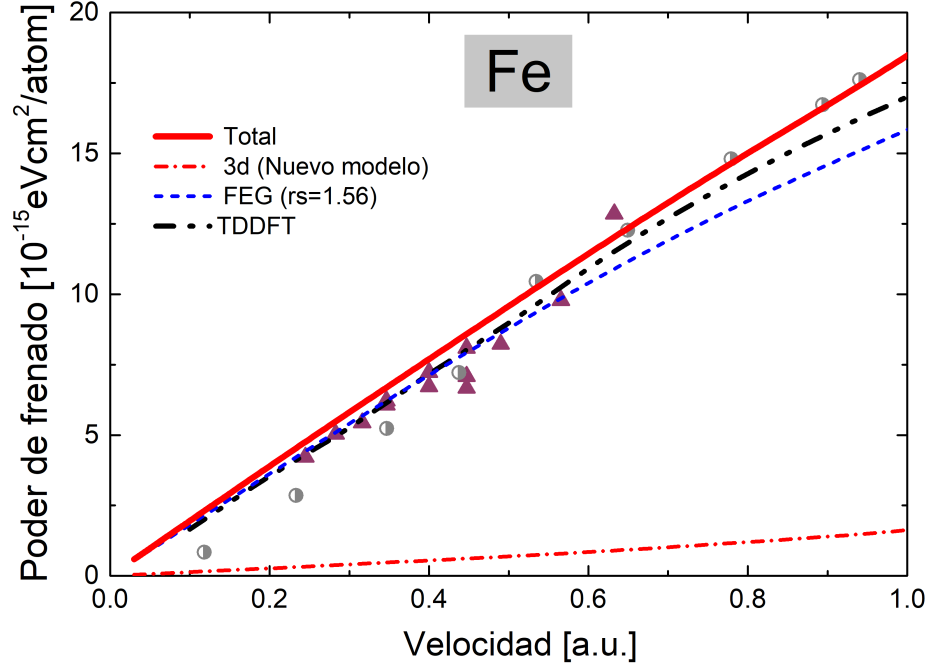


Figura 5.17: Poder de frenado a bajas energías de H en Fe, en función de la velocidad de impacto. Curvas: Poder de frenado total (línea continua roja); modelo actual para las contribuciones de los electrones d (línea discontinua roja); FEG líneas discontinua azul); resultados de TDDFT de Zhao *et al.* [29] (curva discontinua doble negra). Símbolos: llenos en color, datos experimentales de bajas energías posteriores a 1990, ▲ [182] (para eurofer97), semillenos grises, datos a bajas energías previos a 1990, ○ [173].

En la Figura 5.18, evaluamos nuestros resultados en un rango de energía extendido ($10^{-1} - 5 \cdot 10^4$) keV/amu. La importancia de la ionización $1s - 3p$ para la pérdida de energía es notable por encima de 40 keV/u. Los valores totales concuerdan muy bien con los datos experimentales excepto en la región del máximo de frenado. Sólo dos grupos experimentales midieron en esta región de energía, White y Mueller en 1969 [131], obtuvieron el valor más bajo, mientras que Mertens y Krist en 1982 [133, 134] midieron un máximo más alto. A pesar de estar más cerca de [133, 134], nuestros resultados no concuerdan con ninguno de los dos picos. Nuevas mediciones de detención en Fe alrededor del máximo sería valioso. También se incluyen en la Figura 5.18 los resultados de TDDFT de 2024 en la Ref. [29]. Estos cálculos consideran 14 electrones activos, $3p^6 3d^6 4s^2$. Si bien los valores obtenidos son notables a bajas energías, se muestran bajos a altas energías debido a la falta de subcapas más profundas.

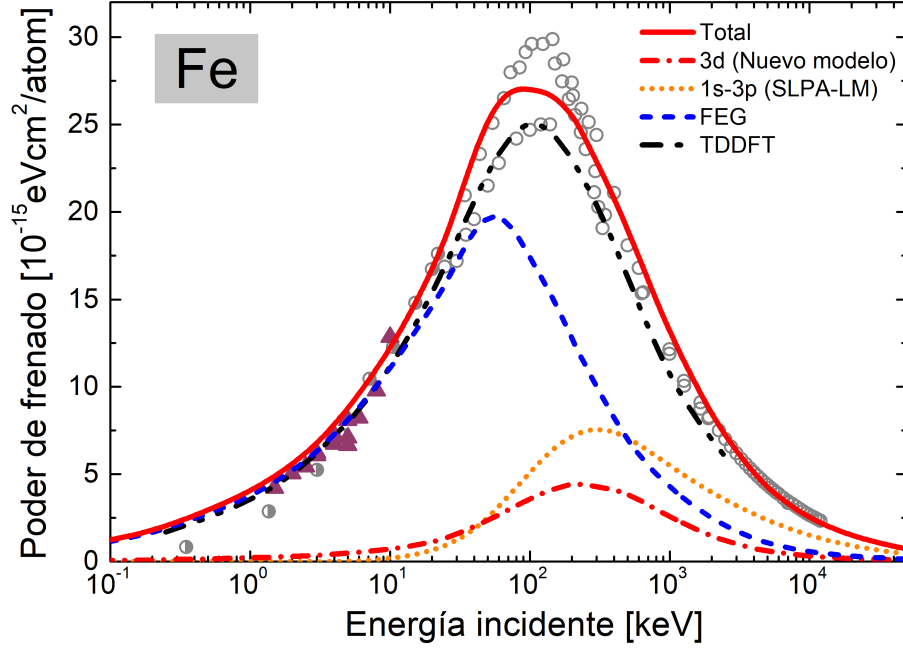


Figura 5.18: Poder de frenado de Fe para H en función de la energía de incidencia. Curvas y símbolos: como en la Fig. 5.17; valores SLPA-LM [81] para las capas internas (curva discontinua naranja); símbolos vacíos grises, datos experimentales de energía media-alta $\circ$ [72] (no se hace distinción de estos debido a la extensa cantidad de datos existente).

Podemos concluir que a pesar de la importancia del Fe, se conoce poco de su pérdida de energía electrónica experimental. Las mediciones experimentales de H en Fe se realizaron hace más de treinta años, con grupos discrepantes de valores alrededor del máximo. La comparación con acero, además de ser los únicos datos recientes, es muy buena, pero no es Fe propiamente.

5.4. Conclusiones

En este capítulo presentamos un nuevo modelo teórico no perturbativo para abordar la contribución de los electrones d al poder de frenado. La presente propuesta

se basa en la función de distribución de momento *inhomogénea* de la subcapa d . La encontramos especialmente adecuada para los metales de transición posteriores cuyos electrones d tienen energías de enlace muy pequeñas. Esta característica permite una promoción parcial a la banda de conducción, lo que hace que los electrones ligados restantes contribuyan a la pérdida de energía a velocidades de impacto muy bajas.

Estudiamos sistemáticamente el poder de frenado de los metales de transición de los grupos 10 y 11: Ni, Cu, Pd, Ag, Pt y Au, y del Fe (grupo 8). Examinamos la dependencia a bajas energías en función de la velocidad de impacto del ion; y el poder de frenado total en una región de energía extendida. Obtuvimos que la contribución d es relevante a velocidades de impacto muy bajas, y tiene una contribución máxima a una velocidad de impacto similar a la velocidad media de los electrones d .

La concordancia general entre nuestros valores y los datos experimentales a bajas energías es muy buena para los metales de transición del grupo 10 y para Fe. Para los elementos del grupo 11, la dispersión de los datos a bajas energías es muy grande y nuestros resultados concuerdan con algunos de los valores experimentales. Obtuvimos una no linealidad suave del poder de frenado a bajas velocidades y no el cambio brusco de pendiente mencionado en trabajos experimentales. La comparación con los cálculos TDDFT es muy buena y nos permite validar y evaluar críticamente los resultados obtenidos por nuestro modelo.

De esta manera, proporcionamos un método teórico capaz de describir el poder de frenado de los metales de transición posteriores en un rango amplio de energías. La capacidad de una descripción no-perturbativa de la capa d posibilita cálculos a muy bajas energías, con resultados comparables con TDDFT. Por otro lado, la inclusión, mediante cálculos perturbativos, de todas las capas internas de electrones, permite describir también los experimentos a altas energías, lo cual es una limitación importante de los cálculos TDDFT más completos.

Conclusiones Generales y perspectivas futuras

En esta tesis estudié la pérdida de energía de protones en blancos metálicos multi-electrónicos, los cuales presentan características especiales debido a su configuración electrónica y sus electrones de conducción. Por otro lado, son elementos con anomalías experimentales no explicadas en los modelos, poco desarrollados debido a su gran número de electrones y la cantidad de estados finales a tomar en cuenta.

Se abordaron por separado las contribuciones de los electrones de valencia y ligados mediante modelos perturbativos y no perturbativos, destacándose: i) el desarrollo de la versión SLPA-Levine-Mermin, que permitió mejorar significativamente la descripción de los datos experimentales para energías altas [81]; ii) el estudio sistemático de los lantánidos cuya capa $4f$ abierta, la necesidad de cálculos completamente relativistas y la promoción de electrones $4f$ a la banda de conducción, introducen complejidades extras [82]; iii) y principalmente, el desarrollo de un nuevo modelo no-perturbativo para la capa d de los metales de transición posteriores [85, 86] en los cuales los electrones d débilmente ligados contribuyen a la pérdida de energía del ion a muy bajas velocidades.

El desarrollo de la SLPA-LM [81] no solo fue mejorar un cálculo, sino hacerlo en base a indagar sobre una descripción física más realista de la respuesta de la nube electrónica. El paso fundamental fue encontrar en la propuesta de Mermin una forma de tomar en cuenta el tiempo finito de decaimiento de las oscilaciones colectivas. Sin el desarrollo y los buenos resultados de la SLPA-LM, el resto de los logros de esta investigación no hubieran sido posible, dada la importancia de las capas internas en

el poder de frenado a energías altas.

El análisis sistemático de los quince lantánidos [82], abordó el rol fundamental de los electrones $4f$. En base a un estudio detallado de la estructura relativista y de la valencia en los lantánidos, se propuso una configuración efectiva de la capa de conducción compuesta por los electrones $6s^2$ y $5d$ (si los hay), más un electrón $4f$ promovido a la banda de conducción para los lantánidos ligeros (Ce a Eu), y ninguno en los lantánidos pesados (Gd a Lu). Los resultados obtenidos, muestran buen acuerdo con los datos experimentales disponibles, al límite del conocimiento y las capacidades teóricas presentes. Esta investigación de los lantánidos me permitió además evaluar los datos experimentales existentes, analizar las predicciones SRIM, notar la necesidad de nuevas mediciones y contribuir a la Ref. [52].

Finalmente, y central en esta Tesis, se propuso un modelo no-perturbativo novedoso para describir la contribución de los electrones d de los metales de transición, el cual se basa en una función de distribución de momento inhomogénea a partir de la función de onda. Este modelo permitió una descripción precisa del poder de frenado total en metales de los grupos 8 a 11 de la tabla periódica (Ni, Cu, Pd, Ag, Pt, Au, Fe) en la región de muy baja velocidad de incidencia del ion, y también en un amplio rango de energías.

Considero que la combinación de todos estos enfoques proporciona una herramienta teórica robusta y coherente para la descripción del poder de frenado electrónico en materiales complejos desde bajas hasta altas energías.

Los resultados obtenidos en este trabajo permiten pensar en una variedad de propuestas para desarrollar a futuro. Algunas de ellas son:

- Extender los cálculos a poder de frenado por impacto de antiprotones, lo cual es un tema bastante desafiante, pero posible a bajas energías mediante cálculos no-perturbativos.
- Calcular el poder de frenado de He en blancos multielectrónicos, lo cual implica estudiar el apantallamiento del He y su estado de carga.
- Aplicar los modelos desarrollados a blancos moleculares. Esto es factible a partir de las densidades electrónicas de sus capas.

Publicaciones relacionadas a esta tesis

Las siguientes publicaciones han sido realizadas durante este doctorado y son parte del mismo:

1. *Stopping power calculations and the Levine-Mermin dielectric function for inner shells*, **J. P. Peralta**, M. Fiori, A. M. P. Mendez, C. C. Montanari, Phys. Rev. A 105, 062814 (2022). <https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.105.062814>
2. *Systematic study of the stopping power of lanthanides, from La to Lu*, **J. P. Peralta**, A. M. P. Mendez, D. M. Mitnik, C. C. Montanari, Phys. Rev. A 107, 052809 (2023); <https://journals.aps.org/pr/abstract/10.1103/PhysRevA.107.052809>
3. *The IAEA electronic stopping power database: modernization, review, and analysis of the existing experimental data*, C. C. Montanari, P. Dimitriou, L. Marian, A.M.P Mendez, **J. P. Peralta**, F. Bivort Haiek, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 551, 165336 (2024) <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2024.165336>
4. *The d-electron contribution to the stopping power of transition metals*, **J. P. Peralta**, A. M. P. Mendez, D. M. Mitnik, C. C. Montanari, Phys. Rev. A 111, 032808 (2025); <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.111.032808>
5. *Stopping power of iron for protons, theoretical calculations from very low to high impact energies*, **J. P. Peralta**, A. M. P. Mendez, D. M. Mitnik, C. C. Montanari, Atoms 13, 22 (2025); <https://doi.org/10.3390/atoms13030022>

Apéndices

Apéndice A. Unidades Atómicas (Sistema de Hartree)

Las **unidades atómicas** (abreviadas como **a.u.**, del inglés *atomic units*), también conocidas como **unidades de Hartree**, constituyen un sistema natural de unidades ampliamente utilizado en mecánica cuántica, física atómica y química computacional. En este sistema, varias constantes físicas fundamentales se definen como igual a uno, lo que permite simplificar notablemente las ecuaciones fundamentales.

En particular, se definen como:

$$\begin{aligned}e &= 1 && \text{(carga elemental)} \\m_e &= 1 && \text{(masa del electrón)} \\\hbar &= 1 && \text{(constante de Planck reducida)} \\\frac{1}{4\pi\epsilon_0} &= 1 && \text{(constante de Coulomb)}\end{aligned}$$

Estas definiciones conducen a unidades derivadas específicas para otras magnitudes físicas, como se resume a continuación:

Tabla 2: Valores de referencia de algunas unidades atómicas

Magnitud	Símbolo	Valor en unidades SI
Longitud (radio de Bohr)	a_0	$5,29177 \times 10^{-11} \text{ m}$
Energía (Hartree)	E_h	$4,35974 \times 10^{-18} \text{ J} = 27.2114 \text{ eV}$
Tiempo	$\hbar/E_h$	$2,41888 \times 10^{-17} \text{ s}$
Carga eléctrica	e	$1,60218 \times 10^{-19} \text{ C}$
Masa	m_e	$9,10938 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Velocidad	αc	$2,18769 \times 10^6 \text{ m/s}$

Ventajas del uso de unidades atómicas:

- Simplifican significativamente las expresiones de las ecuaciones fundamentales, como la ecuación de Schrödinger.
- Eliminan constantes físicas del desarrollo matemático, reduciendo errores de redondeo o conversión.
- Facilitan los cálculos numéricos en simulaciones de estructuras electrónicas (por ejemplo, DFT, Hartree-Fock).

Apéndice B. Desarrollo analítico de la función de distribución en momentos

En el presente modelo, proponemos una función de distribución de momento inhomogénea, $f(p)$, para los electrones d dada por

$$f_{nl}(p) = \frac{(2\pi)^3}{2} |\Phi_{nl}(\vec{p})|^2, \quad (9)$$

con $\Phi_{nl}(p)$ la transformada de Fourier de la función de onda radial $\phi_{nl}(r)$, o $\phi_{nl\pm}(\vec{r})$ para las funciones de onda relativistas, donde nl son los números cuánticos, y en este

caso $l = 2$. Expresamos la función de onda radial en términos de funciones de Slater para tener una expresión analítica de $\Phi_{nl}(p)$.

La función de onda radial puede ser expandida en Slaters como

$$\phi_{nl}(r) = \sum_j C_j R_{n_j l}(r) \quad (10)$$

con

$$R_{n_j l}(r) = N_j r^{(n_j-1)} e^{-\zeta_j r}, \quad (11)$$

y N_j es dado por

$$N_j = (2\zeta_j)^{n_j+1/2} / [(2n_j)!]^{1/2} \quad (12)$$

Los parámetros ζ_j , C_j y n_j son los coeficientes de la expansión en Slater y los números cuánticos principales, respectivamente.

La transformada de Fourier de la función de onda expresada en las Ecs. (10) a (12) es

$$\begin{aligned} \Phi_{nl}(\vec{p}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \phi_{nl}(r) e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} d\vec{r} \\ &= \sum_j A_j \int r^{(n_j-1)} e^{-\zeta_{n_j} r - i\vec{p}\cdot\vec{r}} d\vec{r} \end{aligned} \quad (13)$$

con $A_j = N_j C_j / (2\pi)^{3/2}$. Haciendo uso de Flannery-Levy [170] la solución de esta integral es dada por

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^\beta e^{-\alpha r + i\vec{p}\cdot\vec{r}} d\vec{r} &= \\ 4\pi i^l (\beta - l + 1)! F_l(p) \end{aligned} \quad (14)$$

con

$$F_l(p) = \sum_{q=1}^{q_{\max}} b_q \alpha^{s-l-q} \frac{p^l}{(\alpha^2 + p^2)^s}, \quad (15)$$

$s = \beta + 3 - q$, $q_{\max} = (\beta - l + 2)/2$ ó $(\beta - l + 3)/2$ para $\beta - l$ siendo par o impar, y

$$b_q = (-1)^{q-1} \frac{(s-1)!}{(q-1)!} \frac{2^{s-q}}{(s-l-q)!}$$

Para el caso de las capas d estudiadas aquí, reemplazamos la Ec (14) en la (13), obtenemos

$$\Phi_{nd}(p) = \sum_j (-4\pi) A_j (n-2)! F_2(p). \quad (16)$$

Substituyendo la Ec. (16) en la Ec. (9), y realizando algunos cálculos algebraicos, la función de distribución para el caso de electrones de la capa $3d$ es

$$\begin{aligned} f_{3d}(p) &= \frac{(2\pi)^3}{2} |\Phi_{32}(p)|^2 \\ &= \frac{(2\pi)^3}{2} \frac{N_d}{4\pi} \frac{3^2}{\pi} \frac{2^9}{\pi} \sum_{i=1}^5 \sum_{j=1}^5 \frac{A_i A_j \zeta_i \zeta_j p^4}{(\zeta_i^2 + p^2)^4 (\zeta_j^2 + p^2)^4}, \end{aligned} \quad (17)$$

donde $N_d/4\pi$ viene de la normalización de la función de onda para los electrones $3d$.

Reemplazando la Ec. (17) en la integral $I(v_r)$ de la Ec. (5.8) obtenemos

$$I(v_r) = \frac{(2\pi)^3}{2} \frac{N_d}{4\pi} \frac{3^2}{\pi} \frac{2^9}{\pi} \sum_{i=1}^5 \sum_{j=1}^5 A_i A_j \zeta_i \zeta_j G(v_r) \quad (18)$$

donde

$$G(v_r) = (v_r + v^2) g_5(\zeta_i, \zeta_j, v_r) - g_7(\zeta_i, \zeta_j, v_r) \quad (19)$$

con

$$g_5(\zeta_i, \zeta_j, v_r) = \int_{|v_r-v|}^{v_r+v} \frac{p^5 dp}{(\zeta_i^2 + p^2)^4 (\zeta_j^2 + p^2)^4} \quad (20)$$

y

$$g_7(\zeta_i, \zeta_j, p) = \int_{|v_r-v|}^{v_r+v} \frac{p^7 dp}{(\zeta_i^2 + p^2)^4 (\zeta_j^2 + p^2)^4} \quad (21)$$

Las integrales en Ecs. (20) y (21) son analíticas, entonces la Ec. (5.8) puede ser incluida en la Ec. (5.7) en forma analítica. La integración numérica también es posible, y de hecho, chequeamos ambas.

Analogamente, se pueden obtener las distribuciones $f_{4d}(p)$ y $f_{5d}(p)$. El álgebra sigue los mismos pasos, aunque el cálculo es más pesado en estos casos debido al número de términos a considerar. Mostramos al final de esta sección el programa

de matemática donde desarrollamos las cuentas en el caso de la Ag, capa 4d. Las expresiones analíticas para $f_{4d}(p)$ obtenidas se integraron al código de fortran para resolver la integral 5.1. Vemos que la expresión de $f_{3d}(p)$ dada por la Ec. (17), puede ser generalizada para los distintos números cuánticos principales ($n = 3, 4, 5$). Obtenemos $f_{nd}(p)$ como combinaciones lineales de las funciones $h(a, b, i, j)$ del tipo

$$h(a, b, i, j, p) = \frac{p^4}{(a^2 + p^2)^i (b^2 + p^2)^j}, \quad (22)$$

con $i = j = 4$ para la capa 3d, $i = 4 - 5$ y $j = 4 - 5$ para la 4d, $i = 4 - 6$ y $j = 4 - 6$ en el caso de la capa 5d.

Densidad de electrones por Hartree-Fock

Ag z=47

SILVER, Z=47 [Kr]4d(10)5s(1) 2S

a13d := 0.003198
a23d := 0.127221
a33d := 0.292865
a43d := -0.473484
a14d := 0.081591
a24d := -0.461096
a34d := -0.323613
a44d := -0.089292

B3d[1] := 26.5320
B3d[2] := 14.8584
B3d[3] := 7.4089
B3d[4] := 5.0317
B4d[5] := 11.5827
B4d[6] := 3.6742
B4d[7] := 2.3057
B4d[8] := 1.4594

$$A[1] := a_{13d} * \frac{1}{\sqrt{6!}} (2 * B_{3d}[1])^{7/2}$$
$$A[2] := a_{23d} * \frac{1}{\sqrt{6!}} (2 * B_{3d}[2])^{7/2}$$
$$A[3] := a_{33d} * \frac{1}{\sqrt{6!}} (2 * B_{3d}[3])^{7/2}$$
$$A[4] := a_{43d} * \frac{1}{\sqrt{6!}} (2 * B_{3d}[4])^{7/2}$$
$$A[5] := a_{14d} * \frac{1}{\sqrt{8!}} (2 * B_{4d}[5])^{9/2}$$
$$A[6] := a_{24d} * \frac{1}{\sqrt{8!}} (2 * B_{4d}[6])^{9/2}$$
$$A[7] := a_{34d} * \frac{1}{\sqrt{8!}} (2 * B_{4d}[7])^{9/2}$$
$$A[8] := a_{44d} * \frac{1}{\sqrt{8!}} (2 * B_{4d}[8])^{9/2}$$

```

 $\phi 4d[r\_]:=$ 
  (A[1] * Exp[-B3d[1] * r] + A[2] * Exp[-B3d[2] * r] + A[3] * Exp[-B3d[3] * r] +
    A[4] * Exp[-B3d[4] * r]) * r^2 + (A[5] * Exp[-B4d[5] * r] +
    A[6] * Exp[-B4d[6] * r] + A[7] * Exp[-B4d[7] * r] + A[8] * Exp[-B4d[8] * r]) * r^3;

```

```

***** densidades *****

```

```

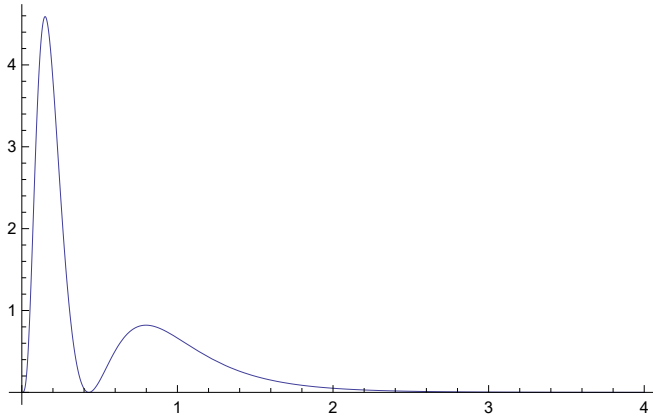
 $\delta 4d[r\_]:=2 * (\phi 4d[r])^2 * \frac{5}{4 \pi};$ 

```

```

Plot[ $\delta 4d[r]$ , {r, 0, 4}, PlotRange -> All]

```



```

NIntegrate[4  $\pi$  * r^2 *  $\delta 4d[r]$  / 10, {r, 0, 20}]

```

```

0.999998

```

```

NIntegrate[4  $\pi$  * r^3 *  $\delta 4d[r]$  / 10, {r, 0, 20}]

```

```

1.3698

```

```

NIntegrate[4  $\pi$  * r^1 *  $\delta 4d[r]$  / 10, {r, 0, 20}]

```

```

NIntegrate[4  $\pi$  * r^4 *  $\delta 4d[r]$  / 10, {r, 0, 20}]

```

```

0.981687

```

```

2.29141

```

```

Expand[ $\delta 4d[r]$ ]

```

```

13391. e-53.064 r r4 + 140034. e-41.3904 r r4 + 28221.3 e-33.9409 r r4 - 11778.2 e-31.5637 r r4 +
366091. e-29.7168 r r4 + 147558. e-22.2673 r r4 - 61583.7 e-19.8901 r r4 + 14868.9 e-14.8178 r r4 -
12411.1 e-12.4406 r r4 + 2589.89 e-10.0634 r r4 + 116277. e-38.1147 r r5 - 3747.41 e-30.2062 r r5 -
323.106 e-28.8377 r r5 - 11.3842 e-27.9914 r r5 + 607968. e-26.4411 r r5 + 122525. e-18.9916 r r5 -
19593.8 e-18.5326 r r5 - 1689.4 e-17.1641 r r5 - 51136. e-16.6144 r r5 - 59.5239 e-16.3178 r r5 -
3948.78 e-11.0831 r r5 - 340.469 e-9.7146 r r5 - 11.996 e-8.8683 r r5 + 1648.03 e-8.7059 r r5 +
142.095 e-7.3374 r r5 + 5.00654 e-6.4911 r r5 + 252413. e-23.1654 r r6 - 16269.7 e-15.2569 r r6 -
1402.8 e-13.8884 r r6 - 49.4257 e-13.0421 r r6 + 262.173 e-7.3484 r r6 + 45.2097 e-5.9799 r r6 +
1.59291 e-5.1336 r r6 + 1.94902 e-4.6114 r r6 + 0.137343 e-3.7651 r r6 + 0.00241955 e-2.9188 r r6

```

$$\text{Cte} = 3 * 2^{9/2} / \sqrt{\pi}$$

$$48 \sqrt{\frac{2}{\pi}}$$

trf[p_] :=

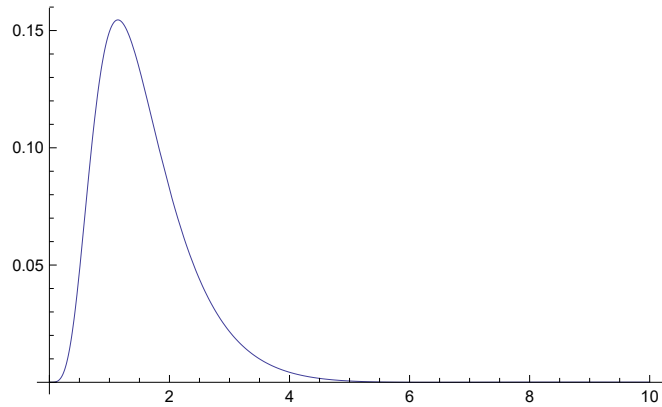
$$\begin{aligned} & \text{Cte} * \left(\left(\left(\frac{A[5] * p^2}{(B4d[5]^2 + p^2)^4} + \frac{A[6] * p^2}{(B4d[6]^2 + p^2)^4} + \frac{A[7] * p^2}{(B4d[7]^2 + p^2)^4} + \frac{A[8] * p^2}{(B4d[8]^2 + p^2)^4} \right) - \right. \\ & (2^{\wedge}3) * \left(\frac{A[5] * (B4d[5])^{\wedge}2 * p^2}{(B4d[5]^2 + p^2)^5} + \frac{A[6] * (B4d[6])^{\wedge}2 * p^2}{(B4d[6]^2 + p^2)^5} + \right. \\ & \left. \left. \frac{A[7] * (B4d[7])^{\wedge}2 * p^2}{(B4d[7]^2 + p^2)^5} + \frac{A[8] * (B4d[8])^{\wedge}2 * p^2}{(B4d[8]^2 + p^2)^5} \right) \right) - \\ & \left(\frac{A[1] * B3d[1] * p^2}{(B3d[1]^2 + p^2)^4} + \frac{A[2] * B3d[2] * p^2}{(B3d[2]^2 + p^2)^4} + \frac{A[3] * B3d[3] * p^2}{(B3d[3]^2 + p^2)^4} + \frac{A[4] * B3d[4] * p^2}{(B3d[4]^2 + p^2)^4} \right) \end{aligned}$$

$$\text{dens}[p_] := 2 * (\text{trf}[p])^2 * \frac{5}{4 \pi};$$

NIntegrate[4 π * p^2 * dens[p], {p, 0, 80}]

9.99998

Plot[dens[p], {p, 0, 10}, PlotRange -> All]



vmed := NIntegrate[4 π * p^3 * dens[p] / 10, {p, 0, 50}];

vmed

2.87576

$$\begin{aligned}
\text{trf2}[p_] := & \\
& \text{Cte}^2 * \left(\left(\left(\frac{A[5] * p^2}{(B4d[5]^2 + p^2)^4} + \frac{A[6] * p^2}{(B4d[6]^2 + p^2)^4} + \frac{A[7] * p^2}{(B4d[7]^2 + p^2)^4} + \frac{A[8] * p^2}{(B4d[8]^2 + p^2)^4} \right) - \right. \\
& (2^3) * \left(\frac{A[5] * (B4d[5])^2 * p^2}{(B4d[5]^2 + p^2)^5} + \frac{A[6] * (B4d[6])^2 * p^2}{(B4d[6]^2 + p^2)^5} + \right. \\
& \left. \frac{A[7] * (B4d[7])^2 * p^2}{(B4d[7]^2 + p^2)^5} + \frac{A[8] * (B4d[8])^2 * p^2}{(B4d[8]^2 + p^2)^5} \right) \left. - \left(\frac{A[1] * B3d[1] * p^2}{(B3d[1]^2 + p^2)^4} + \right. \right. \\
& \left. \frac{A[2] * B3d[2] * p^2}{(B3d[2]^2 + p^2)^4} + \frac{A[3] * B3d[3] * p^2}{(B3d[3]^2 + p^2)^4} + \frac{A[4] * B3d[4] * p^2}{(B3d[4]^2 + p^2)^4} \right) \left. \right)^2 * \frac{10}{4 \pi}
\end{aligned}$$

$$\text{NIntegrate}[4 \pi * p^2 * \text{trf2}[p], \{p, 0, 50\}]$$

9.9999

$$\begin{aligned}
\text{t3d}[i_ , p_] &:= \frac{p^2}{(B3d[i]^2 + p^2)^4} \\
\text{g3d}[i_ , p_] &:= -\text{Cte} * A[i] * B3d[i] * \text{t3d}[i, p]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{t4d1}[j_ , p_] &:= \frac{p^2}{(B4d[j]^2 + p^2)^4} \\
\text{g4d1}[j_ , p_] &:= \text{Cte} * A[j] * \text{t4d1}[j, p]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{t4d2}[j_ , p_] &:= \frac{p^2}{(B4d[j]^2 + p^2)^5} \\
\text{g4d2}[j_ , p_] &:= -\text{Cte} * (2^3) * A[j] * B4d[j]^2 * \text{t4d2}[j, p] \\
\text{g4d}[j_ , p_] &:= \text{g4d1}[j, p] + \text{g4d2}[j, p]
\end{aligned}$$

$$\text{fun1}[p_] := \text{Sum}[\text{g3d}[i, p], \{i, 1, 4\}] + \text{Sum}[\text{g4d}[j, p], \{j, 5, 8\}]$$

$$\text{fun1}[p]$$

$$\begin{aligned}
& \frac{35.9825 p^2}{(2.12985 + p^2)^5} - \frac{2.1118 p^2}{(2.12985 + p^2)^4} + \frac{2549.12 p^2}{(5.31625 + p^2)^5} - \frac{59.9369 p^2}{(5.31625 + p^2)^4} + \\
& \frac{75075. p^2}{(13.4997 + p^2)^5} - \frac{695.152 p^2}{(13.4997 + p^2)^4} + \frac{10993.6 p^2}{(25.318 + p^2)^4} - \frac{38786.4 p^2}{(54.8918 + p^2)^4} - \\
& \frac{2.31501 \times 10^7 p^2}{(134.159 + p^2)^5} + \frac{21569.6 p^2}{(134.159 + p^2)^4} - \frac{385970. p^2}{(220.772 + p^2)^4} - \frac{131815. p^2}{(703.947 + p^2)^4}
\end{aligned}$$

Expand[trf[p]]

$$\begin{aligned} & \frac{35.9825 p^2}{(2.12985 + p^2)^5} - \frac{2.1118 p^2}{(2.12985 + p^2)^4} + \frac{2549.12 p^2}{(5.31625 + p^2)^5} - \frac{59.9369 p^2}{(5.31625 + p^2)^4} + \\ & \frac{75075. p^2}{(13.4997 + p^2)^5} - \frac{695.152 p^2}{(13.4997 + p^2)^4} + \frac{10993.6 p^2}{(25.318 + p^2)^4} - \frac{38786.4 p^2}{(54.8918 + p^2)^4} - \\ & \frac{2.31501 \times 10^7 p^2}{(134.159 + p^2)^5} + \frac{21569.6 p^2}{(134.159 + p^2)^4} - \frac{385970. p^2}{(220.772 + p^2)^4} - \frac{131815. p^2}{(703.947 + p^2)^4} \end{aligned}$$

dens1[p_] := 2 * (fun1[p]) ^2 * $\frac{5}{4 \pi}$;

NIntegrate[4 π * p^2 * dens1[p], {p, 0, 50}]

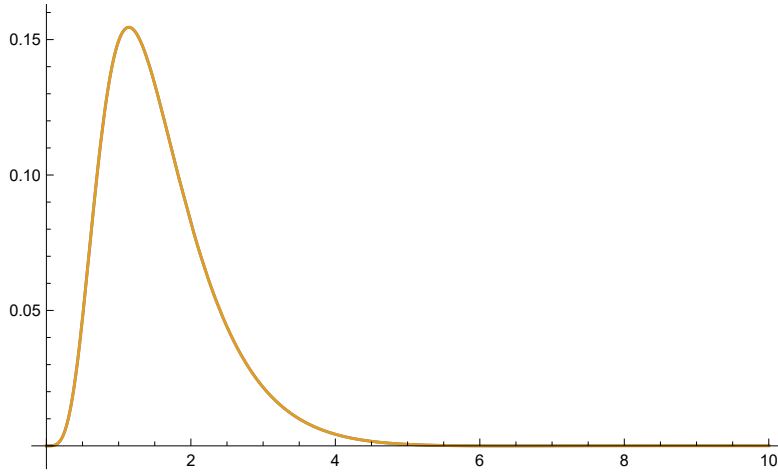
9.9999

9.999904708527758`

fun1[i, j, p_] := Sum[g3d[i, p], {i, 1, 4}] + Sum[g4d[j, p], {j, 5, 8}]

9.9999

Plot[{dens1[p], dens1[p]}, {p, 0, 10}, PlotRange -> All]



**fp4d[p_] := $\frac{10}{4 \pi}$ * (Sum[g3d[i, p], {i, 1, 4}] + Sum[g4d[j, p], {j, 5, 8}]) *
(Sum[g3d[i, p], {i, 1, 4}] + Sum[g4d[j, p], {j, 5, 8}]);**

NIntegrate[4 π * p^2 * fp4d[p], {p, 0, 50}]

9.9999

fp4db[p_] :=

$\frac{10}{4 \pi}$ * (Sum[fun1[p], {i, 1, 4}, {j, 5, 8}] * Sum[fun1[p], {i, 1, 4}, {j, 5, 8}])

FortranForm[fp4d[p]]

```
(5*((35.98253675353071*p**2)/(2.12984836 + p**2)**5 - (2.111801562338146,
- (2549.1193011795913*p**2)/(5.316252489999999 + p**2)**5 -
- (59.936941152967876*p**2)/(5.316252489999999 + p**2)**4 +
- (75075.02971665868*p**2)/(13.499745639999999 + p**2)**5 -
- (695.1522617416024*p**2)/(13.499745639999999 + p**2)**4 +
- (10993.64406684138*p**2)/(25.318004889999997 + p**2)**4 -
- (38786.38524653544*p**2)/(54.89179921 + p**2)**4 -
- (2.3150054210624013e7*p**2)/(134.15893929 + p**2)**5 +
- (21569.615797817343*p**2)/(134.15893929 + p**2)**4 -
- (385969.5523310228*p**2)/(220.77205056 + p**2)**4 - (131814.57802875
- 2)/(2.*Pi)
```

$$\text{fun44}[a_, b_, x_] := \frac{x^4}{(a^2 + x^2)^4 * (b^2 + x^2)^4}$$

$$\text{fun45}[a_, b_, x_] := \frac{x^4}{(a^2 + x^2)^4 * (b^2 + x^2)^5}$$

$$\text{fun55}[a_, b_, x_] := \frac{x^4}{(a^2 + x^2)^5 * (b^2 + x^2)^5}$$

```
ffpp[p_] := Cte^2 *  $\frac{10}{4 \pi}$  * (
  2^0 * Sum[A[i] * B3d[i] * A[j] *
    B3d[j] * fun44[B3d[i], B3d[j], p], {i, 1, 4}, {j, 1, 4}] +
  2^0 * Sum[A[i] * A[j] * fun44[B4d[i], B4d[j], p], {i, 5, 8}, {j, 5, 8}] +
  2^6 * Sum[A[i] * B4d[i]^2 * A[j] * B4d[j]^2 * fun55[B4d[i], B4d[j], p],
    {i, 5, 8}, {j, 5, 8}] -
  2^1 * Sum[A[i] * B3d[i] * A[j] * fun44[B3d[i], B4d[j], p], {i, 1, 4}, {j, 5, 8}] +
  2^4 * Sum[A[i] * B3d[i] * A[j] * B4d[j]^2 * fun45[B3d[i], B4d[j], p],
    {i, 1, 4}, {j, 5, 8}] - 2^4 *
  Sum[A[i] * A[j] * B4d[j]^2 * fun45[B4d[i], B4d[j], p], {i, 5, 8}, {j, 5, 8}])
```

NIntegrate[4 π * p^2 * ffpp[p], {p, 0, 80}]

9.99998

$$\text{int5a}[p_] = \left(\text{Cte}^2 * \frac{10}{4\pi} * \left(\begin{aligned} &2^0 * \text{Sum}[A[i] * B3d[i] * A[j] * \\ &\quad B3d[j] * \text{fun44}[B3d[i], B3d[j], p], \{i, 1, 4\}, \{j, 1, 4\}] + \\ &2^0 * \text{Sum}[A[i] * A[j] * \text{fun44}[B4d[i], B4d[j], p], \{i, 5, 8\}, \{j, 5, 8\}] + \\ &2^6 * \text{Sum}[A[i] * B4d[i]^2 * A[j] * B4d[j]^2 * \text{fun55}[B4d[i], B4d[j], p], \\ &\quad \{i, 5, 8\}, \{j, 5, 8\}] - 2^1 * \\ &\quad \text{Sum}[A[i] * B3d[i] * A[j] * \text{fun44}[B3d[i], B4d[j], p], \{i, 1, 4\}, \{j, 5, 8\}] + \\ &2^4 * \text{Sum}[A[i] * B3d[i] * A[j] * B4d[j]^2 * \text{fun45}[B3d[i], B4d[j], p], \\ &\quad \{i, 1, 4\}, \{j, 5, 8\}] - 2^4 * \text{Sum}[\\ &\quad A[i] * A[j] * B4d[j]^2 * \text{fun45}[B4d[i], B4d[j], p], \{i, 5, 8\}, \{j, 5, 8\}]] \right) * p \end{aligned} \right)$$

$$\text{int7a} = \left(\text{Cte}^2 * \frac{10}{4\pi} * \left(\begin{aligned} &2^0 * \text{Sum}[A[i] * B3d[i] * A[j] * B3d[j] * \\ &\quad \text{fun44}[B3d[i], B3d[j], p], \{i, 1, 4\}, \{j, 1, 4\}] + \\ &2^0 * \text{Sum}[A[i] * A[j] * \text{fun44}[B4d[i], B4d[j], p], \{i, 5, 8\}, \{j, 5, 8\}] + \\ &2^6 * \text{Sum}[A[i] * B4d[i]^2 * A[j] * B4d[j]^2 * \text{fun55}[B4d[i], B4d[j], p], \\ &\quad \{i, 5, 8\}, \{j, 5, 8\}] - 2^1 * \\ &\quad \text{Sum}[A[i] * B3d[i] * A[j] * \text{fun44}[B3d[i], B4d[j], p], \{i, 1, 4\}, \{j, 5, 8\}] + \\ &2^4 * \text{Sum}[A[i] * B3d[i] * A[j] * B4d[j]^2 * \text{fun45}[B3d[i], B4d[j], p], \\ &\quad \{i, 1, 4\}, \{j, 5, 8\}] - 2^4 * \text{Sum}[A[i] * A[j] * B4d[j]^2 * \\ &\quad \text{fun45}[B4d[i], B4d[j], p], \{i, 5, 8\}, \{j, 5, 8\}]] \right) * (p^3) \end{aligned} \right)$$

$$\text{fun544}[a_, b_, x_] := \frac{x^5}{(a^2 + x^2)^4 * (b^2 + x^2)^4}$$

$$\text{fun744}[a_, b_, x_] := \frac{x^7}{(a^2 + x^2)^4 * (b^2 + x^2)^4}$$

$$\text{g544}[a_, b_, \text{xmin}_, \text{xmax}_] := \text{Integrate}[\text{fun544}[a, b, x], \{x, \text{xmin}, \text{xmax}\}];$$

$$\text{g744}[a_, b_, \text{xmin}_, \text{xmax}_] := \text{Integrate}[\text{fun744}[a, b, x], \{x, \text{xmin}, \text{xmax}\}];$$

$$\text{N}[\text{g544}[1, 5, 1, 2]]$$

$$1.17802 \times 10^{-7}$$

N[g744[5, 14, 1, 10]]

4.02639×10^{-11}

$$\text{fun545}[a_ , b_ , x_] := \frac{x^5}{(a^2 + x^2)^4 * (b^2 + x^2)^5}$$

$$\text{fun745}[a_ , b_ , x_] := \frac{x^7}{(a^2 + x^2)^4 * (b^2 + x^2)^5}$$

g545[a_ , b_ , xmin_ , xmax_] := Integrate[fun545[a, b, x] , {x, xmin, xmax}] ;

g745[a_ , b_ , xmin_ , xmax_] := Integrate[fun745[a, b, x] , {x, xmin, xmax}] ;

$$\text{fun755}[a_ , b_ , x_] := \frac{x^5}{(a^2 + x^2)^5 * (b^2 + x^2)^5}$$

$$\text{fun755}[a_ , b_ , x_] := \frac{x^7}{(a^2 + x^2)^5 * (b^2 + x^2)^5}$$

g555[a_ , b_ , xmin_ , xmax_] := Integrate[fun555[a, b, x] , {x, xmin, xmax}] ;

g755[a_ , b_ , xmin_ , xmax_] := Integrate[fun755[a, b, x] , {x, xmin, xmax}] ;

```

I5[pmin_, pmax_] := (
  2^0 * Sum[A[i] * B3d[i] * A[j] * B3d[j] *
    g544[B3d[i], B3d[j], pmin, pmax], {i, 1, 4}, {j, 1, 4}] +
  2^0 * Sum[A[i] * A[j] * g544[B4d[i], B4d[j], pmin, pmax], {i, 5, 8}, {j, 5, 8}] +
  2^6 * Sum[A[i] * B4d[i]^2 * A[j] * B4d[j]^2 * g555[B4d[i], B4d[j], pmin, pmax],
    {i, 5, 8}, {j, 5, 8}] - 2^1 * Sum[
    A[i] * B3d[i] * A[j] * g544[B3d[i], B4d[j], pmin, pmax], {i, 1, 4}, {j, 5, 8}] +
  2^4 * Sum[A[i] * B3d[i] * A[j] * B4d[j]^2 * g545[B3d[i], B4d[j], pmin, pmax],
    {i, 1, 4}, {j, 5, 8}] - 2^4 * Sum[A[i] * A[j] * B4d[j]^2 *
    g545[B4d[i], B4d[j], pmin, pmax], {i, 5, 8}, {j, 5, 8}]);
Expand[I5[pmin_, pmax_]]
I7[pmin_, pmax_] := (
  2^0 * Sum[A[i] * B3d[i] * A[j] * B3d[j] *
    g744[B3d[i], B3d[j], pmin, pmax], {i, 1, 4}, {j, 1, 4}] +
  2^0 * Sum[A[i] * A[j] * g744[B4d[i], B4d[j], pmin, pmax], {i, 5, 8}, {j, 5, 8}] +
  2^6 * Sum[A[i] * B4d[i]^2 * A[j] * B4d[j]^2 * g755[B4d[i], B4d[j], pmin, pmax],
    {i, 5, 8}, {j, 5, 8}] - 2^1 * Sum[
    A[i] * B3d[i] * A[j] * g744[B3d[i], B4d[j], pmin, pmax], {i, 1, 4}, {j, 5, 8}] +
  2^4 * Sum[A[i] * B3d[i] * A[j] * B4d[j]^2 * g745[B3d[i], B4d[j], pmin, pmax],
    {i, 1, 4}, {j, 5, 8}] - 2^4 * Sum[A[i] * A[j] * B4d[j]^2 *
    g745[B4d[i], B4d[j], pmin, pmax], {i, 5, 8}, {j, 5, 8}]);

```

Bibliografía

- [1] P. Sigmund. *Particle Penetration and Radiation Effects, General Aspects and Stopping of Swift Point Charges*, volume 1. Springer, Berlin, Heidelberg, 2006. doi: 10.1007/3-540-31718-X.
- [2] Kai Nordlund, Dage Sundholm, Pekka Pyykkö, Daniel Zambrano, and Flyura Djurabekova. Nuclear stopping power of antiprotons. *Physical Review A*, 96, 10 2017. doi: 10.1103/PhysRevA.96.042717.
- [3] Michael Nastasi, James W Mayer, and Yongqiang Wang. *Ion beam analysis: fundamentals and applications*. CRC Press, 2014.
- [4] Tamon Kusumoto, Yutaka Mori, Masato Kanasaki, Ryunosuke Ikenaga, Keiji Oda, Satoshi Kodaira, Hisashi Kitamura, Rémi Barillon, and Tomoya Yamauchi. Radiation chemical yields for the losses of typical functional groups in padc films for high energy protons registered as unetchable tracks. *Radiation Measurements*, 87:35–42, 2016. ISSN 1350-4487. doi: <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2016.01.029>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1350448716300294>.
- [5] Jila Shams-Latifi, Eduardo Pitthan, and Daniel Primetzhofer. Experimental electronic stopping cross-section of eurofer97 for slow protons, deuterons and helium ions. *Radiation Physics and Chemistry*, 224:112073, 2024. ISSN 0969-806X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2024.112073>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969806X24005656>.

- [6] Zeljko Pastuovic, Stefania Peracchi, and David Cohen. Space radiation testing for materials and devices. URL <https://www.ansto.gov.au/services/research-services/space-radiation-testing-for-materials-and-devices>.
- [7] D. Belkic, editor. *Advances in Quantum Chemistry: Theory of Heavy Ion Collision Physics in Hadron Therapy*, volume 2. Elsevier, New York, 2013. ISBN 978-0-12-396455-7. URL <https://www.sciencedirect.com/bookseries/advances-in-quantum-chemistry/vol/65/suppl/C>.
- [8] Centro argentino de protonterapia. URL <https://www.argentina.gob.ar/cnea/centro-argentino-de-protonterapia/como-actua-la-protonterapia>.
- [9] L.G. Haggmark J.P. Biersack. Trim. *Nuclear Instruments and Methods*, 174: 257–269, 1980. doi: [https://doi.org/10.1016/0029-554X\(80\)90440-1](https://doi.org/10.1016/0029-554X(80)90440-1).
- [10] S. Agostinelli, J. Allison, and et al. Geant4—a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 506(3):250–303, 2003. ISSN 0168-9002. doi: [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168900203013688>.
- [11] Z. Francis, S. Incerti, M. Karamitros, H.N. Tran, and C. Villagrasa. Stopping power and ranges of electrons, protons and alpha particles in liquid water using the Geant4-DNA package. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 269(20):2307–2311, 2011. ISSN 0168-583X. doi: [10.1016/j.nimb.2011.02.031](https://doi.org/10.1016/j.nimb.2011.02.031). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X1100214X>. 12th International Conference on Nuclear Microprobe Technology and Applications.
- [12] J. Medin and P. Andreo. Monte carlo calculated stopping-power ratios, water/air, for clinical proton dosimetry (50-250 mev). *Phys. Med. Biol.*, 42(1): 89–105, 1997. doi: [10.1088/0031-9155/42/1/006](https://doi.org/10.1088/0031-9155/42/1/006).

- [13] C. Champion, A. L'Hoir, M. F. Politis, P. D. Fainstein, R. D. Rivarola, and A. Chetoui. A Monte Carlo Code for the Simulation of Heavy-Ion Tracks in Water. *Radiation Research*, 163(2):222 – 231, 2005. doi: 10.1667/RR3295. URL <https://doi.org/10.1667/RR3295>.
- [14] H. Bethe. Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie. *Annalen der Physik*, 397(3):325–400, 1930. doi: 10.1002/andp.19303970303. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19303970303>.
- [15] M. Stanley Livingston and H. A. Bethe. Nuclear Physics. Nuclear Dynamics, Experimental. *Rev. Mod. Phys.*, 9:245–390, Jul 1937. doi: 10.1103/RevModPhys.9.245. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.9.245>.
- [16] Niels Bohr. *The penetration of atomic particles through matter*. Munksgaard Copenhagen, 1948.
- [17] R. H. Ritchie. Interaction of Charged Particles with a Degenerate Fermi-Dirac Electron Gas. *Phys. Rev.*, 114:644–654, May 1959. doi: 10.1103/PhysRev.114.644. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.114.644>.
- [18] T. L. Ferrell and R. H. Ritchie. Energy losses by slow ions and atoms to electronic excitation in solids. *Phys. Rev. B*, 16:115–123, Jul 1977. doi: 10.1103/PhysRevB.16.115. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.16.115>.
- [19] J. Lindhard and M. Scharff. Energy loss in matter by fast particles of low charge. *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd.*, 27:1–31, 1953.
- [20] N. D. Mermin. Lindhard Dielectric Function in the Relaxation-Time Approximation. *Phys. Rev. B*, 1:2362–2363, Mar 1970. doi: 10.1103/PhysRevB.1.2362. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.1.2362>.

- [21] P. M. Echenique, F. Flores, and R. H. Ritchie. *Dynamic Screening of Ions in Condensed Matter*, volume 43 of *Solid State Physics*, pages 229–308. Academic Press, 1990. doi: 10.1016/S0081-1947(08)60325-2. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0081194708603252>.
- [22] I. Nagy and B. Apagyi. Scattering-theory formulation of stopping powers of a solid target for protons and antiprotons with velocity-dependent screening. *Phys. Rev. A*, 58:R1653–R1656, Sep 1998. doi: 10.1103/PhysRevA.58.R1653. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.58.R1653>.
- [23] R.G. Parr and Y. Weitao. *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*. International Series of Monographs on Chemistry. Oxford University Press, 1994. ISBN 9780195357738. URL <https://books.google.com.ar/books?id=mG0pScSIwU4C>.
- [24] Edwin E. Quashie, Bidhan C. Saha, and Alfredo A. Correa. Electronic band structure effects in the stopping of protons in copper. *Phys. Rev. B*, 94:155403, Oct 2016. doi: 10.1103/PhysRevB.94.155403. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.155403>.
- [25] Edwin E. Quashie and Alfredo A. Correa. Electronic stopping power of protons and alpha particles in nickel. *Phys. Rev. B*, 98:235122, Dec 2018. doi: 10.1103/PhysRevB.98.235122. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.235122>.
- [26] A. A. Correa E. E. Quashie, X. Andrade. Directional dependency of electronic stopping in nickel, projectile’s excited charge state and momentum transfer. *Eur. Phys. J. D*, 75:280, 2021. doi: 10.1140/epjd/s10053-021-00266-6.
- [27] Shi-Ming Li, Fei Mao, Xu-Dong Zhao, Wen-Qi Jin, Wen-Qi Zuo, Bing-Sheng Li, Feng Wang, and Feng-Shou Zhang. Contribution of f -electron excitation to electronic stopping power of platinum for protons. *Phys. Rev. B*, 106:014103, Jul 2022. doi: 10.1103/PhysRevB.106.014103.

- [28] Chang-Kai Li, Xun Guo, Jian-Ming Xue, and Feng-Shou Zhang. Electronic stopping power of protons in platinum: Direct valence and inner-shell-electron excitations from first-principles calculations. *Phys. Rev. A*, 107:052814, May 2023. doi: 10.1103/PhysRevA.107.052814.
- [29] Xu-Dong Zhao, Fei Mao, and Huiqiu Deng. Electronic stopping of iron for protons and helium ions from first-principles calculations. *Phys. Rev. A*, 109:032807, Mar 2024. doi: 10.1103/PhysRevA.109.032807. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.109.032807>.
- [30] M. Ahsan Zeb, J. Kohanoff, D. Sánchez-Portal, A. Arnau, J. I. Juaristi, and Emilio Artacho. Electronic stopping power in gold: The role of *d* electrons and the **H**/He anomaly. *Phys. Rev. Lett.*, 108:225504, May 2012. doi: 10.1103/PhysRevLett.108.225504. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.225504>.
- [31] Ge-Ge Xiong, Wen-Qi Jin, Feng Wang, and Fei Mao. First-principles study of inner-electron excitation of tungsten under proton and helium ion irradiation. *Phys. Rev. B*, 109:174314, May 2024. doi: 10.1103/PhysRevB.109.174314. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.109.174314>.
- [32] C Champion, M A Quinto, J M Monti, M E Galassi, P F Week, O A Fojón, J Hanssen, and R D Rivarola. Water versus dna a new deal for proton transport modeling in biological matter. *Journal of Physics: Conference Series*, 635(3):032064, jul 2015. doi: 10.1088/1742-6596/635/3/032064. URL <https://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/635/3/032064>.
- [33] M.A. Quinto, J.M. Monti, C.A. Tachino, P.F. Weck, O.A. Fojón, C. Champion, and R.D. Rivarola. The physics of irradiation of biological matter by ion beams. *Radiation Physics and Chemistry*, 167:108337, 2020. ISSN 0969-806X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2019.05.027>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969806X18313197>. Special issue dedicated to the 14th International Symposium on Radiation Physics.

- [34] Peter Sigmund and Andreas Schinner. Binary theory of electronic stopping. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 195(1):64–90, 2002. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/S0168-583X(01)01162-4. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X01011624>.
- [35] A. Schinner and P. Sigmund. Expanded PASS stopping code. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 460:19–26, 2019. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/j.nimb.2018.10.047.
- [36] G. Schiwietz and P.L. Grande. Stopping of protons – Improved accuracy of the UCA model. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 273:1–5, 2012. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/j.nimb.2011.07.023. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X11006677>. 20th International Conference on Ion Beam Analysis.
- [37] F. Matias, R. C. Fadanelli, P. L. Grande, N. R. Arista, N. E. Koval, and G. Schiwietz. Stopping power of cluster ions in a free-electron gas from partial-wave analysis. *Phys. Rev. A*, 98:062716, Dec 2018. doi: 10.1103/PhysRevA.98.062716. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.98.062716>.
- [38] P. L. Grande and G. Schiwietz. CasP version 6.0, <http://www.casp-program.org/>, 2021. URL <http://www.casp-program.org/>.
- [39] A. Schinner and P. Sigmund. DPASS21.06, <https://www.sdu.dk/en/dpass>, 2020. URL <https://www.sdu.dk/en/dpass>.
- [40] J. Lindhard. On the properties of a gas of charged particles. *K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd.*, 28:0, 1954.
- [41] J. Lindhard and M. Scharff. Stopping power of heavier substances. *Phys. Rev.*, 85:1058–1059, Mar 1952. doi: 10.1103/PhysRev.85.1058. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.85.1058>.

- [42] C. C. Rousseau, W. K. Chu, and D. Powers. Calculations of stopping cross sections for 0.8- to 2.0-mev alpha particles. *Phys. Rev. A*, 4:1066–1070, Sep 1971. doi: 10.1103/PhysRevA.4.1066. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.4.1066>.
- [43] P. M. Echenique, W. Brandt, and R. H. Ritchie. Self-consistent wake binding energies. *Phys. Rev. B*, 33:43–48, Jan 1986. doi: 10.1103/PhysRevB.33.43. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.33.43>.
- [44] J. D. Fuhr, V. H. Ponce, F. J. García de Abajo, and P. M. Echenique. Dynamic screening of fast ions moving in solids. *Phys. Rev. B*, 57:9329–9335, Apr 1998. doi: 10.1103/PhysRevB.57.9329. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.57.9329>.
- [45] C. C. Montanari and J. E. Miraglia. The dielectric formalism for inelastic processes in high-energy ion–matter collisions. In D. Belkic, editor, *Advances in Quantum Chemistry: Theory of Heavy Ion Collision Physics in Hadron Therapy*, volume 2, chapter 7, pages 165–201. Elsevier, New York, 2013. ISBN 978-0-12-396455-7. doi: 10.1016/B978-0-12-396455-7.00007-8.
- [46] R. Garcia-Molina, I. Abril, I. Kyriakou, and D. Emfietzoglou. Energy loss of swift protons in liquid water: Role of optical data input and extension algorithms. In G. García Gómez-Tejedor and M. Fuss, editors, *Radiation Damage in Biomolecular Systems. Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering*, volume 2, chapter 15, pages 239–261. Springer, Dordrecht, New York, 2012. doi: 10.1007/978-94-007-2564-5_15.
- [47] Pablo de Vera, Isabel Abril, and Rafael Garcia-Molina. Electronic cross section, stopping power and energy-loss straggling of metals for swift protons, alpha particles and electrons. *Frontiers in Materials*, 10, 2023. ISSN 2296-8016. doi: 10.3389/fmats.2023.1249517. URL <https://www.frontiersin.org/journals/materials/articles/10.3389/fmats.2023.1249517>.
- [48] F. Matias, P. L. Grande, N. E. Koval, J. M. B. Shorto, T. F. Silva, and N. R. Arista. Deeper-band electron contributions to stopping power of silicon for

low-energy ions. *The Journal of Chemical Physics*, 161(6):064310, 08 2024. ISSN 0021-9606. doi: 10.1063/5.0218226. URL <https://doi.org/10.1063/5.0218226>.

- [49] P. Sigmund and A. Schinner. Progress in understanding heavy-ion stopping. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 382:15–25, 2016. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/j.nimb.2015.12.041. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X15012872>. The 21st International workshop on Inelastic Ion Surface Collisions (IISC-21).
- [50] C. C. Montanari and P. Dimitriou. The IAEA stopping power database, following the trends in stopping power of ions in matter. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 408:50–55, 2017. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/j.nimb.2017.03.138. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X1730397X>. Proceedings of the 18th International Conference on the Physics of Highly Charged Ions (HCI-2016), Kielce, Poland, 11-16 September 2016.
- [51] T. Materna, E. Berthoumieux, Q. Deshayes, D. Doré, M. Kebbiri, A. Letourneau, L. Thulliez, Y.H. Kim, U. Köster, and X. Ledoux. Stopping power of fission fragments in thin Mylar and nickel foils. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 505:1–16, 2021. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/j.nimb.2021.08.003.
- [52] C.C. Montanari, P. Dimitriou, L. Marian, A.M.P. Mendez, J.P. Peralta, and F. Bivort-Haiek. The iaea electronic stopping power database: Modernization, review, and analysis of the existing experimental data. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 551:165336, 2024. ISSN 0168-583X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2024.165336>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X2400106X>.

- [53] J. F. Ziegler. SRIM, <http://www.srim.org/>, 2013. URL <http://www.srim.org/>.
- [54] James F. Ziegler, M.D. Ziegler, and J.P. Biersack. SRIM – The stopping and range of ions in matter (2010). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 268(11):1818–1823, 2010. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/j.nimb.2010.02.091. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X10001862>. 19th International Conference on Ion Beam Analysis.
- [55] Helmut Paul and Andreas Schinner. MSTAR, 2003. URL <https://www-nds.iaea.org/stopping/mstar>.
- [56] Helmut Paul and Andreas Schinner. Empirical stopping power tables for ions from 3Li to 18Ar and from 0.001 to 1000MeV/nucleon in solids and gases. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 85(2):377–452, 2003. ISSN 0092-640X. doi: 10.1016/j.adt.2003.08.003. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092640X03000688>.
- [57] F. Bivoert Haiek *et al.* ESPNN, 2022. URL <https://pypi.org/project/ESPNN/>.
- [58] F. Bivort Haiek, A. M. P. Mendez, C. C. Montanari, and D. M. Mitnik. ESPNN: A novel electronic stopping power neural-network code built on the IAEA stopping power database. i. atomic targets. *Journal of Applied Physics*, 132(24):245103, 2022. doi: 10.1063/5.0130875. URL <https://doi.org/10.1063/5.0130875>.
- [59] M. J. Berger. PSTAR, ASTAR, 1993. URL <https://physics.nist.gov/PhysRefData/Star/Text/programs.html>.
- [60] Jens Oddershede and John R. Sabin. Bragg rule additivity of bond stopping cross sections. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 42(1):7–10, 1989. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/0168-583X(89)90003-7. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168583X89900037>.

- [61] D. Roth, B. Bruckner, M. V. Moro, S. Gruber, D. Goebel, J. I. Juaristi, M. Alducin, R. Steinberger, J. Duchoslav, D. Primetzhofer, and P. Bauer. Electronic Stopping of Slow Protons in Transition and Rare Earth Metals: Breakdown of the Free Electron Gas Concept. *Phys. Rev. Lett.*, 118:103401, Mar 2017. doi: 10.1103/PhysRevLett.118.103401. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.118.103401>.
- [62] M.V. Moro, P.M. Wolf, B. Bruckner, F. Munnik, R. Heller, P. Bauer, and D. Primetzhofer. Experimental electronic stopping cross section of tungsten for light ions in a large energy interval. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 498: 1–8, 2021. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/j.nimb.2021.04.010.
- [63] M. V. Moro, P. Bauer, and D. Primetzhofer. Experimental electronic stopping cross section of transition metals for light ions: Systematics around the stopping maximum. *Phys. Rev. A*, 102:022808, Aug 2020. doi: 10.1103/PhysRevA.102.022808. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.102.022808>.
- [64] F. F. Selau, H. Trombini, G. G. Marmitt, A. M.H. De Andrade, J. Morais, P. L. Grande, I. Alencar, M. Vos, and R. Heller. Stopping and straggling of 60-250-keV backscattered protons on nanometric Pt films. *Physical Review A*, 102(3):032812, sep 2020. ISSN 24699934. doi: 10.1103/PhysRevA.102.032812. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.102.032812>.
- [65] C.B. Mtshali, Z.M. Khumalo, N Mongwaketsi, K. Segola, K. Lebesana, P. Sechogela, and M. Msimanga. Stopping force of protons in pt, mo, and cr foils at energies between 325 kev and 900 kev using the forward scattering method. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 552:165363, 2024. ISSN 0168-583X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2024.165363>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X24001332>.
- [66] Mario Mery, Claudio González-Fuentes, Cristian Romanque-Albornoz, Carlos García, Andrea M. León, Néstor R. Arista, Vladimir A. Esaulov, and Jorge E.

- Valdés. The free electron model and the electronic energy losses of protons at low velocities interacting with polycrystalline tantalum. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 0(0):1–12, 2022. doi: 10.1080/10420150.2022.2049789. URL <https://doi.org/10.1080/10420150.2022.2049789>.
- [67] M. Brocklebank, S. Dedyulin, and L. Goncharova. Stopping cross sections of protons in ti, tio2 and si using medium energy ionscattering. *The European Physical Journal D*, 70:248, 2016. ISSN 1434-6079. doi: <https://doi.org/10.1140/epjd/e2016-70277-3>. URL <https://doi.org/10.1140/epjd/e2016-70277-3>.
- [68] Cristiano L. Fontana, Chien-Hung Chen, Miguel L. Crespillo, Joseph T. Graham, Haizhou Xue, Yanwen Zhang, and William J. Weber. Stopping power measurements with the time-of-flight (tof) technique. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 366:104–116, 2016. ISSN 0168-583X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2015.10.048>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X15010551>.
- [69] M.K. Linnarsson, S. Khartsev, D. Primetzhofer, G. Possnert, and A. Hallén. Tof-meis stopping measurements in thin sic films. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 332:130–133, 2014. ISSN 0168-583X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2014.02.045>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X14003024>. 21st International Conference on Ion Beam Analysis.
- [70] A. Guesmia, M. Msimanga, C.A. Pineda-Vargas, H. Ammi, A. Dib, and M. Ster. Slowing down of 2–11mev 12c, 16o, 28si and 63cu heavy ions thorough si3n4 thin foil by using time-of-flight spectrometry. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 371:69–75, 2016. ISSN 0168-583X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2015.10.058>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/>

[article/pii/S0168583X15010885](#). The 22nd International Conference on Ion Beam Analysis (IBA 2015).

- [71] N.P. Barradas, A. Bergmaier, K. Mizohata, M. Msimanga, J. Räisänen, T. Sajavaara, and A. Simon. Determination of molecular stopping cross section of ^{12}C , ^{16}O , ^{28}Si , ^{35}Cl , ^{58}Ni , ^{79}Br , and ^{127}I in silicon nitride. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 360:90–96, 2015. ISSN 0168-583X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2015.08.034>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X15007697>.
- [72] IAEA, H. Paul, and C. C. Montanari. Electronic stopping power of matter for ions graphs, data, comments and programs, 1928-2024. URL <https://www-nds.iaea.org/stopping/>.
- [73] S. Rosenblum. Recherches expérimentales sur le passage des rayons travers la matière. *Annales de Physique*, 10(10):408–471, 1928. doi: [10.1051/anphys/192810100408](https://doi.org/10.1051/anphys/192810100408). URL <https://doi.org/10.1051/anphys/192810100408>.
- [74] Eduardo O. Zappettini. Elementos de las tierras raras. panorama general y evaluación del potencial en la república argentina. *Instituto de Geología y Recursos Minerales. Servicio Geológico Minero Argentino. Serie Contribuciones Técnicas. Recursos Minerales*, 48:1–102, 2022. ISSN 2618-5032. URL <https://repositorio.segemar.gov.ar/handle/308849217/4223>.
- [75] Amol S. Patil, Arun V. Patil, Chandrakant G. Dighavkar, Vishnu A. Adole, and Umesh J. Tupe. Synthesis techniques and applications of rare earth metal oxides semiconductors: A review. *Chemical Physics Letters*, 796:139555, 2022. ISSN 0009-2614. doi: [10.1016/j.cplett.2022.139555](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2022.139555). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261422002226>.
- [76] Ran Friedman. Preferential binding of lanthanides to methanol dehydrogenase evaluated with density functional theory. *The Journal of Physical Chemistry B*, 125(9):2251–2257, 2021. doi: [10.1021/acs.jpcb.0c11077](https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.0c11077). URL <https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.0c11077>.

- [77] Andrea Pedrielli, Pablo de Vera, Paolo E. Trevisanutto, Nicola M. Pugno, Rafael Garcia-Molina, Isabel Abril, Simone Taioli, and Maurizio Dapor. Electronic excitation spectra of cerium oxides: from ab initio dielectric response functions to monte carlo electron transport simulations. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23:19173–19187, 2021. doi: 10.1039/D1CP01810H. URL <http://dx.doi.org/10.1039/D1CP01810H>.
- [78] C. C. Montanari and J. E. Miraglia. Stopping power of protons in transition metals of the groups v and vi. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 460:27–29, 2019. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/j.nimb.2018.10.046. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X18306402>.
- [79] C. C. Montanari, C. D. Archubi, D. M. Mitnik, and J. E. Miraglia. Energy loss of protons in Au, Pb, and Bi using relativistic wave functions. *Phys. Rev. A*, 79:032903, Mar 2009. doi: 10.1103/PhysRevA.79.032903. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.79.032903>.
- [80] C. C. Montanari, D. M. Mitnik, C. D. Archubi, and J. E. Miraglia. Energy loss of protons in W using fully relativistic calculations and mean excitation energies of W, Au, Pb, and Bi. *Phys. Rev. A*, 80:012901, Jul 2009. doi: 10.1103/PhysRevA.80.012901. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.80.012901>.
- [81] J. P. Peralta, M. Fiori, A. M. P. Mendez, and C. C. Montanari. Stopping-power calculations and the levine-mermin dielectric function for inner shells. *Phys. Rev. A*, 105:062814, Jun 2022. doi: 10.1103/PhysRevA.105.062814. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.105.062814>.
- [82] J. P. Peralta, A. M. P. Mendez, D. M. Mitnik, and C. C. Montanari. Systematic study of the stopping power of the lanthanides. *Phys. Rev. A*, 107:052809, May 2023. doi: 10.1103/PhysRevA.107.052809. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.107.052809>.

- [83] E. Fermi and E. Teller. The capture of negative mesotrons in matter. *Phys. Rev.*, 72:399–408, Sep 1947. doi: 10.1103/PhysRev.72.399. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.72.399>.
- [84] C. C. Montanari and J. E. Miraglia. Low- and intermediate-energy stopping power of protons and antiprotons in solid targets. *Phys. Rev. A*, 96:012707, Jul 2017. doi: 10.1103/PhysRevA.96.012707. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.96.012707>.
- [85] J. P. Peralta, A. M. P. Mendez, D. M. Mitnik, and C. C. Montanari. *d*-electron contribution to the stopping power of transition metals. *Phys. Rev. A*, 111: 032808, Mar 2025. doi: 10.1103/PhysRevA.111.032808. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.111.032808>.
- [86] J. P. Peralta, A. M. P. Mendez, D. M. Mitnik, and C. C. Montanari. Stopping power of iron for protons: Theoretical calculations from very low to high energies. *Atoms*, 13:22, Feb 2025. doi: 10.3390/atoms13030022. URL <https://www.mdpi.com/2218-2004/13/3/22>.
- [87] M. D. Ziegler J. F. Ziegler, J. P. Biersack. *SRIM - The stopping and range of Ions in Matter*. SRIM Co., 2008. ISBN 0-9654207-1-X.
- [88] C. C. Montanari, J. E. Miraglia, and N. R. Arista. Suppression of projectile-electron excitations in collisions with a free-electron gas of metals. *Phys. Rev. A*, 62:052902, Oct 2000. doi: 10.1103/PhysRevA.62.052902. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.62.052902>.
- [89] Giuseppe Gross and Giuseppe Pastori Parravicini. *Solid State Physics*. Academic Press, Elsevier Ltd., 2000. ISBN 978-0-12-304460-0. URL <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-304460-0.X5000-2>.
- [90] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin. *Solid State Physics*. Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976. URL <https://search.worldcat.org/es/title/934604>.

- [91] J. C. Ashley and P. M. Echenique. Influence of damping in an electron gas on wake binding energies. *Phys. Rev. B*, 31:4655–4656, Apr 1985. doi: 10.1103/PhysRevB.31.4655. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.31.4655>.
- [92] Isabel Abril, Rafael Garcia-Molina, Cristian D. Denton, F. Javier Pérez-Pérez, and Néstor R. Arista. Dielectric description of wakes and stopping powers in solids. *Phys. Rev. A*, 58:357–366, Jul 1998. doi: 10.1103/PhysRevA.58.357. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.58.357>.
- [93] W. S. M. Werner, K. Glantschnig, and C. Ambrosch-Draxl. Optical Constants and Inelastic Electron-Scattering Data for 17 Elemental Metals. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 38(4):1013–1092, 2009. doi: 10.1063/1.3243762. URL <https://doi.org/10.1063/1.3243762>.
- [94] I. Nagy and A. Bergara. A model for the velocity-dependent screening. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 115(1):58–61, 1996. ISSN 0168-583X. doi: [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(96\)01562-5](https://doi.org/10.1016/0168-583X(96)01562-5). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168583X96015625>. Atomic Collisions in Solids.
- [95] C. C. Montanari, D. M. Mitnik, and J. E. Miraglia. A collective model for inner shell ionization of very heavy targets. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 166(5):338–345, 2011. doi: 10.1080/10420150.2011.572284. URL <https://doi.org/10.1080/10420150.2011.572284>.
- [96] J. E. Miraglia and M. S. Gravielle. Ionization of the He, Ne, Ar, Kr, and Xe isoelectronic series by proton impact. *Phys. Rev. A*, 78:052705, Nov 2008. doi: 10.1103/PhysRevA.78.052705. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.78.052705>.
- [97] M. Oswal, Sunil Kumar, Udai Singh, Shashank Singh, G. Singh, K. P. Singh, D. Mehta, A. M. P. Mendez, D. M. Mitnik, C. C. Montanari, D. Mitra, and T. Nandi. Experimental and theoretical L-shell ionization cross sections of heavy atoms by impact of Si ions. *Radiation Physics and Che-*

- mistry*, 176:108809, 2020. ISSN 0969-806X. doi: 10.1016/j.radphyschem.2020.108809. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969806X18309988>.
- [98] C. C. Montanari and J. E. Miraglia. *AIP Conf. Proc.*, chapter 1525, pages 259–268. AIP Publishing LLC., April 2013. doi: 10.1063/1.4802331.
- [99] Zachary H. Levine and Steven G. Louie. New model dielectric function and exchange-correlation potential for semiconductors and insulators. *Phys. Rev. B*, 25:6310–6316, May 1982. doi: 10.1103/PhysRevB.25.6310. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.25.6310>.
- [100] C. C. Montanari, J. E. Miraglia, M. Behar, P. F. Duarte, N. R. Arista, J. C. Eckardt, and G. H. Lantschner. Theoretical and experimental study of energy loss of li ions in zn. *Phys. Rev. A*, 77:042901, Apr 2008. doi: 10.1103/PhysRevA.77.042901. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.77.042901>.
- [101] A. M. P. Mendez, C. C. Montanari, and D. M. Mitnik. Relativistic atomic structure calculations of heavy targets for inelastic collisions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 460:114–118, 2019. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/j.nimb.2019.02.002. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X19300734>.
- [102] C.C. Montanari, S. Segui, A.M.P. Mendez, and D.M. Mitnik. L- and m-subshell ionization cross-sections of heavy atoms by electron and proton impact. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 554:165440, 2024. ISSN 0168-583X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2024.165440>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X24002106>.
- [103] Enrico Clementi and Carla Roetti. Roothaan-hartree-fock atomic wavefunctions: Basis functions and their coefficients for ground and certain excited states of neutral and ionized atoms, z54. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 14(3):177–478, 1974. ISSN 0092-640X. doi: <https://doi.org/10.1016/>

- S0092-640X(74)80016-1. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092640X74800161>.
- [104] C.F. Bunge, J.A. Barrientos, and A.V. Bunge. Roothaan-hartree-fock ground-state atomic wave functions: Slater-type orbital expansions and expectation values for $z = 2-54$. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 53(1):113–162, 1993. ISSN 0092-640X. doi: <https://doi.org/10.1006/adnd.1993.1003>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092640X8371003X>.
- [105] A. Bar-Shalom, M. Klapisch, and J. Oreg. Hullac, an integrated computer package for atomic processes in plasmas. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 71(2):169–188, 2001. ISSN 0022-4073. doi: [https://doi.org/10.1016/S0022-4073\(01\)00066-8](https://doi.org/10.1016/S0022-4073(01)00066-8). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022407301000668>. Radiative Properties of Hot Dense Matter.
- [106] G. P. Williams. *Electron Binding Energies of the Elements*, chapter 10, pages 200–205. CRC Handbook of Chemistry and Physics. CRC Press, 95 edition, 2014. URL https://xdb.lbl.gov/Section1/Sec_1-1.html.
- [107] D. W. Lynch, C. G. Olson, and J. H. Weaver. Optical properties of Ti, Zr, and Hf from 0.15 to 30 eV. *Phys. Rev. B*, 11:3617–3624, May 1975. doi: [10.1103/PhysRevB.11.3617](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.11.3617). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.11.3617>.
- [108] M. Vos and P.L. Grande. Extension schemes of the dielectric function, and their implications for ion stopping calculations. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 133:187–196, 2019. ISSN 0022-3697. doi: [10.1016/j.jpcs.2019.03.010](https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2019.03.010). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022369718333298>.
- [109] Maarten Vos and Pedro L. Grande. How the choice of model dielectric function affects the calculated observables. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 407:97–109,

2017. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/j.nimb.2017.05.064. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X17306638>.
- [110] P. Romaniello, P. L. de Boeij, F. Carbone, and D. van der Marel. Optical properties of bcc transition metals in the range 0 – 40 eV. *Phys. Rev. B*, 73: 075115, Feb 2006. doi: 10.1103/PhysRevB.73.075115. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.075115>.
- [111] E. I. Sirotnin, A. F. Tulinov, V. A. Khodyrev, and V. N. Mizgulin. Proton energy loss in solids. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 4(3):337–345, aug 1984. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/0168-583X(84)90577-9. URL [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(84\)90577-9](https://doi.org/10.1016/0168-583X(84)90577-9).
- [112] C. C. Montanari, P. A. Miranda, E. Alves, A. M. P. Mendez, D. M. Mitnik, J. E. Miraglia, R. Correa, J. Wachter, M. Aguilera, N. Catarino, and R. C. da Silva. Stopping power of hydrogen in hafnium and the importance of relativistic 4f electrons. *Phys. Rev. A*, 101:062701, Jun 2020. doi: 10.1103/PhysRevA.101.062701. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.101.062701>.
- [113] Hans Bischel and Takeshi Hiraoka. Energy loss of 70 MeV protons in elements. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 66(3):345–351, 1992. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/0168-583X(92)95995-4. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168583X92959954>.
- [114] M. Bader, R. E. Pixley, F. S. Mozer, and W. Whaling. Stopping Cross Section of Solids for Protons, 50-600 KeV. *Phys. Rev.*, 103:32–38, Jul 1956. doi: 10.1103/PhysRev.103.32. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.103.32>.
- [115] N. Shiomi-Tsuda, N. Sakamoto, and H. Ogawa. Stopping powers of Ta and Mo for MeV protons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 115(1-4):88–92, jul 1996. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/0168-583X(95)01528-0.

- [116] N. Shiomi-Tsuda, N. Sakamoto, and R. Ishiwari. Stopping powers of Be, Al, Ti, V, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Mo, Rh, Ag, Sn, Ta, Pt and Au for 13 MeV deuterons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 93(4):391–398, sep 1994. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/0168-583X(94)95624-3. URL [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(94\)95624-3](https://doi.org/10.1016/0168-583X(94)95624-3).
- [117] N. Sakamoto, H. Ogawa, M. Mannami, K. Kimura, Y. Susuki, M. Hasegawa, I. Katayama, T. Noro, and H. Ikegami. Stopping powers of metallic elements for high energy ions. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 117(1-3):193–195, 1991. doi: 10.1080/10420159108220612. URL <https://doi.org/10.1080/10420159108220612>.
- [118] E. I. Sirotinin, A. F. Tulinov, A. Fiderkevich, and K. S. Shyshkin. The determination of energy losses from the spectrum of particles scattered by a thick target. *Radiation Effects*, 15(3-4):149–152, aug 1972. ISSN 0033-7579. doi: 10.1080/00337577208234688. URL <https://doi.org/10.1080/00337577208234688>.
- [119] Th. Krist and P. Mertens. Proton energies at the maximum of the electronic stopping cross section in materials with $57 \leq Z \leq 83$. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 218(1):790–794, 1983. ISSN 0167-5087. doi: 10.1016/0167-5087(83)91084-0. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0167508783910840>.
- [120] Th. Krist and P. Mertens. Stopping ratios for 30–330 keV light ions in materials with $57 \leq Z \leq 83$. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 218(1):821–826, 1983. ISSN 0167-5087. doi: 10.1016/0167-5087(83)91090-6. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0167508783910906>.
- [121] R. Behrisch and B.M.U. Scherzer. Rutherford back-scattering as a tool to determine electronic stopping powers in solids. *Thin Solid Films*, 19(2):

- 247–257, 1973. ISSN 0040-6090. doi: [https://doi.org/10.1016/0040-6090\(73\)90060-6](https://doi.org/10.1016/0040-6090(73)90060-6). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0040609073900606>.
- [122] R. Ishiwari, N. Shiomi, S. Shirai, and U. Uemura. Stopping powers of al, ti, fe, cu, mo, ag, sn, ta and au for 7.2 mev protons. *Physics Letters A*, 48(2):96–98, 1974. ISSN 0375-9601. doi: [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(74\)90416-2](https://doi.org/10.1016/0375-9601(74)90416-2). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960174904162>.
- [123] H. H. Andersen, H. Simonsen, H. Sørensen, and P. Vajda. Stopping Power of Zr, Gd, and Ta for 5-12-MeV Protons and Deuterons. Further Evidence of an Oscillatory Behavior of the Excitation Potential. *Phys. Rev.*, 186:372–375, Oct 1969. doi: [10.1103/PhysRev.186.372](https://doi.org/10.1103/PhysRev.186.372). URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.186.372>.
- [124] M. Luomajarvi. Stopping powers of some metals for 0.3–1.5 MeV protons. *Radiation Effects*, 40(3):173–179, 1972. ISSN 00337579. doi: [10.1080/00337577908237920](https://doi.org/10.1080/00337577908237920). URL <http://dx.doi.org/10.1080/00337577908237920>.
- [125] K. Ogino, T. Kiyosawa, and T. Kiuchi. Stopping powers for MeV tritons in solids. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 33(1):155–157, 1988. ISSN 0168-583X. doi: [10.1016/0168-583X\(88\)90535-6](https://doi.org/10.1016/0168-583X(88)90535-6). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168583X88905356>.
- [126] R. Ishiwari, N. Shiomi, and N. Sakamoto. Stopping powers of be, al, ti, v, fe, co, ni, cu, zn, mo, rh, ag, sn, ta, pt and au for 6.75 mev protons. *Physics Letters A*, 75(1):112–114, 1979. ISSN 0375-9601. doi: [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(79\)90295-0](https://doi.org/10.1016/0375-9601(79)90295-0). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375960179902950>.
- [127] Evgeniia Ponomareva, Eduardo Pitthan, Radek Holeňák, Jila Shams-Latifi, Glen Pádraig Kiely, Daniel Primetzhofer, and Andrea E. Sand. Local electronic

- excitations induced by low-velocity light ion stopping in tungsten. *Phys. Rev. B*, 109:165123, Apr 2024. doi: 10.1103/PhysRevB.109.165123. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.109.165123>.
- [128] Jila Shams-Latifi, Eduardo Pitthan, Philipp Mika Wolf, and Daniel Prietzhofer. Experimental electronic stopping cross-section of tungsten bulk and sputter-deposited thin films for slow protons, deuterons and helium ions. *Nuclear Materials and Energy*, 36:101491, 2023. ISSN 2352-1791. doi: 10.1016/j.nme.2023.101491.
- [129] V. Ya Chumanov, Sh Z. Izmailov, G. P. Pokhil, E. I. Sirotinin, and A. F. Tulinov. On the determination of energy losses by charged particles from the backscattered energy spectra. *physica status solidi (a)*, 53(1):51–62, may 1979. ISSN 1521-396X. doi: 10.1002/PSSA.2210530104. URL <https://doi.org/10.1002/pssa.2210530104>.
- [130] Ch. Eppacher and D. Semrad. Dependence of proton and helium energy loss in solids upon plasma properties. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 69(1):33–38, 1992. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/0168-583X(92)95735-A. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168583X9295735A>.
- [131] W. White and R. M. Mueller. Electronic stopping cross sections for ^1H and ^4He particles in cr, mn, co, ni, and cu at energies near 100 kev. *Phys. Rev.*, 187:499–503, Nov 1969. doi: 10.1103/PhysRev.187.499. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.187.499>.
- [132] I. Gertner, M. Meron, and B. Rosner. Electronic energy loss of ions in solids in the energy range $10\text{-}10^4$ kev/nucleon. *Phys. Rev. A*, 18:2022–2029, Nov 1978. doi: 10.1103/PhysRevA.18.2022. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.18.2022>.
- [133] P. Mertens and Th. Krist. Electronic stopping cross sections for 30–300 kev protons in materials with $23 \leq z_2 \leq 30$. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 194(1):57–60, 1982. ISSN 0167-5087. doi: [https://](https://doi.org/10.1016/0167-5087(82)90000-0)

doi.org/10.1016/0029-554X(82)90489-X. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0029554X8290489X>.

- [134] P. Mertens and Th. Krist. Stopping ratios for 30–330 keV ions with $1 \leq z \leq 5$. *Journal of Applied Physics*, 53(11):7343–7349, 11 1982. ISSN 0021-8979. doi: 10.1063/1.330142. URL <https://doi.org/10.1063/1.330142>.
- [135] H. H. Andersen, C. C. Hanke, H. Simonsen, H. Sørensen, and P. Vajda. Stopping power of the elements $z = 20$ through $z = 30$ for 5-12-MeV protons and deuterons. *Phys. Rev.*, 175:389–395, Nov 1968. doi: 10.1103/PhysRev.175.389. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.175.389>.
- [136] M. V. Moro, T. F. Silva, A. Mangiarotti, Z. O. Guimarães-Filho, M. A. Rizzutto, N. Added, and M. H. Tabacniks. Traceable stopping cross sections of Al and Mo elemental targets for 0.9-3.6-MeV protons. *Physical Review A*, 93(2):022704, feb 2016. ISSN 24699934. doi: 10.1103/PhysRevA.93.022704/FIGURES/8/MEDIUM. URL <https://journals.aps.org/prabstract/10.1103/PhysRevA.93.022704>.
- [137] N. Shiomi-Tsuda, N. Sakamoto, H. Ogawa, and U. Kitoba. Stopping powers of Al and Mo for protons from 0.3 to 3.0 MeV. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 159(3):123–132, nov 1999. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/S0168-583X(99)00532-7.
- [138] Sh.Z. Izmailov, E.I. Sirotinin, and A.F. Tulinov. Energy loss of protons in Si, Ge and Mo. *Nuclear Instruments and Methods*, 168(1):81–84, 1980. ISSN 0029-554X. doi: [https://doi.org/10.1016/0029-554X\(80\)91235-5](https://doi.org/10.1016/0029-554X(80)91235-5). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0029554X80912355>.
- [139] C. Kratochwil, F.L. Giesel, M. Eder, A. Afshar-Roomier, M. Benešová, W. Mier, K. Kopka and U. Haberkorn. ^{177}Lu Lutetium-labelled PSMA ligand-induced remission in a patient with metastatic prostate cancer. *European Journal of Nuclear Medicine and Molecular Imaging*, 42:987–988,

2015. doi: 10.1007/s00259-014-2978-1. URL <https://doi.org/10.1007/s00259-014-2978-1>.
- [140] Ellis Kennedy, Christina Choi, and M. C. Scott. Comparative analysis for meaningful interpretation of rare-earth oxide $m_{4,5}$ energy loss edges. *arXiv*, 2021. doi: 10.48550/arxiv.2101.06794. URL <https://arxiv.org/abs/2101.06794>.
- [141] C. Colliex, M. Gasgnier, and P. Trebbia. Analysis of the electron excitation spectra in heavy rare earth metals, hydrides and oxides. *J. Phys. France*, 37(4):397–406, 1976. doi: 10.1051/jphys:01976003704039700. URL <https://doi.org/10.1051/jphys:01976003704039700>.
- [142] L. Ward. Optical constants of eight rare earth elements: (ce), (sm), (gd), (tb), (dy), (er), (tm), and (yb). In Edward D. Palik, editor, *Handbook of Optical Constants of Solids*, pages 287–340. Academic Press, Burlington, 1997. ISBN 978-0-12-544415-6. doi: 10.1016/B978-012544415-6.50105-9. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780125444156501059>.
- [143] J. A. Bearden and A. F. Burr. Reevaluation of X-Ray Atomic Energy Levels. *Reviews of Modern Physics*, 39(1):125, jan 1967. ISSN 00346861. doi: 10.1103/RevModPhys.39.125. URL <https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.39.125>.
- [144] E. Puppín, I. Lindau, and I. Abbati. Photoemission core level shifts in Gd silicides. *Solid State Communications*, 77(12):983–986, 1991. ISSN 0038-1098. doi: 10.1016/0038-1098(91)90358-3. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0038109891903583>.
- [145] S. Cotton. *Electronic and Magnetic Properties of the Lanthanides*, chapter 5, pages 61–87. John Wiley & Sons, Ltd, 2006. ISBN 9780470010082. doi: 10.1002/0470010088.ch5. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/0470010088.ch5>.

- [146] Nargizyan, A. G. and Uspenskii, Yu. A. Characteristic fast-energy losses in rare-earth metals. *J. Exp. Theor. Phys*, 76(3):530–533, 1993. doi: 1063-7761/93/030530-04. URL <http://jetp.ras.ru/cgi-bin/e/index/e/76/3/p530?a=list>.
- [147] H. Knudsen, H.H. Andersen, and V. Martini. Hydrogen and helium stopping powers of rare-earth metals. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 168(1):41–50, 1980. ISSN 0029-554X. doi: 10.1016/0029-554X(80)91229-X. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0029554X8091229X>.
- [148] Sunil Kumar and P. K. Diwan. Energy loss and range of α -particles in different metallic foils. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 173:970–997, 2018. doi: 10.1080/10420150.2018.1513002.
- [149] J. C. Oberlin, A. Amokrane, H. Beaumevieille, J. P. Stoquert, and R. Perrier de la Bathie. Stopping power and straggling of 0.2-2.0 mev protons and 0.3-3.1 mev 4he ions in erbium. *J. Phys. France*, 43:485–491, 1982. doi: 10.1051/jphys:01982004303048500.
- [150] Robert A. Langley and Robert S. Blewer. Measurement of the stopping cross sections for protons and 4He ions in erbium and erbium oxide: A test of Bragg’s rule. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 132:109–117, 1976. doi: 10.1016/0029-554X(76)90719-9.
- [151] W. H. Trzaska, G. N. Knyazheva, J. Perkowski, J. Andrzejewski, S. V. Khlebnikov, E. M. Kozulin, T. Malkiewicz, M. Mutterer, and E. O. Savelieva. New experimental stopping power data of 4He, 16O, 40Ar, 48Ca and 84Kr projectiles in different solid materials. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 418:1–12, 2018. doi: 10.1016/j.nimb.2017.12.025.
- [152] G. J. Leigh, editor. *Principles of Chemical Nomenclature A Guide to IUPAC*

Recommendations. RSC Publishing, 2011. ISBN 978-1-84973-007-5. URL <https://iupac.org/what-we-do/books/principles/>.

- [153] J. E. Valdés, P. Vargas, and V. A. Esaulov. Energy losses of slow ions travelling through crystalline solids and scattered on crystalline surfaces. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 171(1-2):60–76, 2016. doi: 10.1080/10420150.2015.1131687. URL <https://doi.org/10.1080/10420150.2015.1131687>.
- [154] S. N. Markin, D. Primetzhofer, M. Spitz, and P. Bauer. Electronic stopping of low-energy h and he in cu and au investigated by time-of-flight low-energy ion scattering. *Phys. Rev. B*, 80:205105, Nov 2009. doi: 10.1103/PhysRevB.80.205105. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.205105>.
- [155] E. D. Cantero, G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, and N. R. Arista. Velocity dependence of the energy loss of very slow proton and deuteron beams in cu and ag. *Phys. Rev. A*, 80:032904, Sep 2009. doi: 10.1103/PhysRevA.80.032904. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.80.032904>.
- [156] J. E. Valdés, J. C. Eckardt, G. H. Lantschner, and N. R. Arista. Energy loss of slow protons in solids: Deviation from the proportionality with projectile velocity. *Phys. Rev. A*, 49:1083–1088, Feb 1994. doi: 10.1103/PhysRevA.49.1083. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.49.1083>.
- [157] S. N. Markin, D. Primetzhofer, S. Prusa, M. Brunmayr, G. Kowarik, F. Aumayr, and P. Bauer. Electronic interaction of very slow light ions in au: Electronic stopping and electron emission. *Phys. Rev. B*, 78:195122, Nov 2008. doi: 10.1103/PhysRevB.78.195122. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.195122>.
- [158] D. Roth, C.E. Celedon, D. Goebel, E.A. Sanchez, B. Bruckner, R. Steinberger, J. Guimpel, N.R. Arista, and P. Bauer. Systematic analysis of different experimental approaches to measure electronic stopping of very slow hydrogen ions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 437:1–7, 2018. ISSN

- 0168-583X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2018.09.028>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X18305615>.
- [159] J.E. Valdés, G. aMartínez Tamayo, G.H. Lantschner, J.C. Eckardt, and N.R. Arista. Electronic energy loss of low velocity h^+ beams in al, ag, sb, au and bi. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 73(3):313–318, 1993. ISSN 0168-583X. doi: [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(93\)95744-P](https://doi.org/10.1016/0168-583X(93)95744-P). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168583X9395744P>.
- [160] D. Goebel, D. Roth, and P. Bauer. Role of d electrons in electronic stopping of slow light ions. *Phys. Rev. A*, 87:062903, Jun 2013. doi: 10.1103/PhysRevA.87.062903. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.87.062903>.
- [161] C. Celedón, E. A. Sánchez, M. S. Moreno, N. R. Arista, J. D. Uribe, M. Mery, J. E. Valdés, and P. Vargas. Energy loss of protons and deuterons at low energies in pd polycrystalline thin films. *Phys. Rev. A*, 88:012903, Jul 2013. doi: 10.1103/PhysRevA.88.012903. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.88.012903>.
- [162] C. E. Celedón, E. A. Sánchez, L.ón@, J. Guimpel, A. Cortés, P. Vargas, and N. R. Arista. Band structure effects in the energy loss of low-energy protons and deuterons in thin films of Pt. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 360:103–110, oct 2015. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/J.NIMB.2015.08.018. URL <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2015.08.018>.
- [163] S. P. Möller, A. Csete, T. Ichioka, H. Knudsen, U. I. Uggerhøj, and H. H. Andersen. Antiproton Stopping at Low Energies: Confirmation of Velocity-Proportional Stopping Power. *Phys. Rev. Lett.*, 88:193201, Apr 2002. doi: 10.1103/PhysRevLett.88.193201.
- [164] B. Bruckner, D. Roth, D. Goebel, P. Bauer, and D. Primetzhofer. A note on extracting electronic stopping from energy spectra of backscattered slow ions applying Bragg’s rule. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*

Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 423:82–86, 2018. ISSN 0168-583X. doi: 10.1016/j.nimb.2018.02.005.

- [165] J.E. Valdés, C. Agurto, F. Ortega, P. Vargas, R. Labbé, and N.R. Arista. Energy loss of protons at low velocities in pd and au polycrystalline thin films. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 164-165:268–271, 2000. ISSN 0168-583X. doi: [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(99\)01090-3](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(99)01090-3). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0168583X99010903>.
- [166] D. Primetzhofer. Inelastic energy loss of medium energy h and he ions in au and pt: Deviations from velocity proportionality. *Phys. Rev. B*, 86:094102, Sep 2012. doi: 10.1103/PhysRevB.86.094102. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.094102>.
- [167] Cristian D. Denton, Isabel Abril, Juan Carlos Moreno-Marín, Santiago Heredia-Avalos, and Rafael Garcia-Molina. Energy loss of swift h and he projectiles in al, si, ni and cu targets. *physica status solidi (b)*, 245(8):1498–1504, 2008. doi: <https://doi.org/10.1002/pssb.200743283>. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/pssb.200743283>.
- [168] Isabel Abril, Pablo de Vera, and Rafael Garcia-Molina. Calculated energy loss of swift light ions in platinum and gold: importance of the target electronic excitation spectrum. *Journal of Physics: Conference Series*, 2326(1):012016, oct 2022. doi: 10.1088/1742-6596/2326/1/012016. URL <https://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/2326/1/012016>.
- [169] Erich Runge and E. K. U. Gross. Density-functional theory for time-dependent systems. *Phys. Rev. Lett.*, 52:997–1000, Mar 1984. doi: 10.1103/PhysRevLett.52.997. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.52.997>.
- [170] M. R. Flannery and II Levy, H. Simple Analytic Expression for General Two-Center Coulomb Integrals. *The Journal of Chemical Physics*, 50(7):2938–2940, 04 1969. ISSN 0021-9606. doi: 10.1063/1.1671488. URL <https://doi.org/10.1063/1.1671488>.

- [171] N.R. Badnell. A Breit–Pauli distorted wave implementation for autostructure. *Computer Physics Communications*, 182(7):1528–1535, jul 2011. ISSN 0010-4655. doi: 10.1016/J.CPC.2011.03.023. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010465511001160?via%3Dihub>.
- [172] Zhibin Lin, Leonid V. Zhigilei, and Vittorio Celli. Electron-phonon coupling and electron heat capacity of metals under conditions of strong electron-phonon nonequilibrium. *Phys. Rev. B*, 77:075133, Feb 2008. doi: 10.1103/PhysRevB.77.075133. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.075133>.
- [173] E. P. Arkhipov and Yu. V. Gott. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 29:615, 1969.
- [174] A Nomura and S Kiyono. Stopping powers of copper, silver and gold for protons and helium ions of low energy. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 8(13): 1551, sep 1975. doi: 10.1088/0022-3727/8/13/017. URL <https://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/8/13/017>.
- [175] R. L. Hines. Ranges of 5- to 27-kev deuterons in aluminum, copper, and gold. *Phys. Rev.*, 132:701–706, Oct 1963. doi: 10.1103/PhysRev.132.701. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.132.701>.
- [176] Kenji Morita, Hideo Akimune, and Tokuo Suita. Energy loss of low energy protons and deuterons in evaporated metallic films. *Journal of the Physical Society of Japan*, 25(6):1525–1532, 1968. doi: 10.1143/JPSJ.25.1525. URL <https://doi.org/10.1143/JPSJ.25.1525>.
- [177] Heinrich Bätzner. Über die geschwindigkeitsabnahme von h-kanalstrahlen in metallen. *Annalen der Physik*, 417(3):233–262, 1936. doi: <https://doi.org/10.1002/andp.19364170307>. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.19364170307>.
- [178] Kenji Morita, Hideo Akimune, and Tokuo Suita. Energy loss of low energy protons and deuterons in evaporated metallic films. *Journal of the Physical Society of Japan*, 25(6):1525–1532, 1968. doi: 10.1143/JPSJ.25.1525. URL <https://doi.org/10.1143/JPSJ.25.1525>.

- [179] G. Martínez-Tamayo, J. C. Eckardt, G. H. Lantschner, and N. R. Arista. Energy loss of h^+ and he^+ in al, zn, and au in the very low- to intermediate-energy range. *Phys. Rev. A*, 54:3131–3138, Oct 1996. doi: 10.1103/PhysRevA.54.3131. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.54.3131>.
- [180] D. Semrad, P. Mertens, and P. Bauer. Reference proton stopping cross sections for five elements around the maximum. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 15(1):86–90, 1986. ISSN 0168-583X. doi: [https://doi.org/10.1016/0168-583X\(86\)90259-4](https://doi.org/10.1016/0168-583X(86)90259-4). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0168583X86902594>.
- [181] Xu-Dong Zhao, Fei Mao, Shi-Ming Li, Bing-Sheng Li, Hong Mao, Feng Wang, and Feng-Shou Zhang. First-principles study of semicore electron excitation in the electronic energy loss of ZnO for protons. *Phys. Rev. A*, 104:032801, Sep 2021. doi: 10.1103/PhysRevA.104.032801. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.104.032801>.
- [182] Jila Shams-Latifi, Eduardo Pitthan, and Daniel Primetzhofer. Experimental electronic stopping cross-section of eurofer97 for slow protons, deuterons and helium ions. *Radiation Physics and Chemistry*, 224:112073, 2024. ISSN 0969-806X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2024.112073>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0969806X24005656>.