

Modelo unificado de paquete de onda para pérdida de energía de partículas en blancos fríos y calientes

- Claudio Archubi,¹ Nestor Arista²

¹Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET- UBA, Buenos Aires, Argentina

²Centro Atómico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica

Proponemos un modelo unificado -UWPM- para evaluar procesos de interacción electrónica de partículas cargadas con la materia condensada caliente, incluyendo pérdida de energía, camino libre medio, straggling y rangos de termalización de iones desnudos y partículas más livianas tales como positrones y electrones. Formulamos nuestro método introduciendo modificaciones al método del modelo de paquete de onda extendido para haces de protones. Este modelo fue propuesto en su forma inicial -WPM- para stopping de protones incidentes en blancos fríos en una serie de papers por T. Kaneko [1-3], y fue modificado recientemente por nosotros en otra serie de papers introduciendo primero el efecto del gap de energía -EWPM- [4-5] y posteriormente los efectos de la temperatura en el stopping -UWPM-[6] y más recientemente, modificaciones cuánticas específicas para el resto de los momentos y para incluir los casos de positrones y electrones en blancos calientes. El punto de partida es la aproximación por paquetes de onda gaussianos de los estados electrónicos del blanco, teniendo en cuenta el gap de energía y el estado de ionización en el caso de orbitales ligados, y el aumento de la densidad electrónica en el caso del gas caliente de electrones libres como consecuencia de la ionización. Se deduce una función dieléctrica específica, en cada uno de estos dos casos, para dichos paquetes. En caso de blancos fríos, dicha deducción resulta de aplicar el método de Levine y Louie [7-8] a la función dieléctrica deducida por Kaneko mediante teoría cuántica de perturbaciones de segundo orden en el modelo WPM. En el caso de blancos calientes, se introducen modificaciones heurísticas que incorporan los efectos de la ionización y de la temperatura comparando nuestro modelo con el modelo de Arista-Brandt [9]. Nuestro modelo permite describir y evaluar los efectos de la ionización y los cambios en la temperatura y en la densidad del blanco. La ionización del blanco conduce a la formación de un plasma denso y caliente alrededor con propiedades de absorción de energía específicas. Usamos nuestro método unificado para evaluar las contribuciones de los orbitales internos y de los electrones libres producidos por la ionización a la pérdida de energía de protones en Si, C y Fe en un extenso rango de energías con densidades y temperaturas que van desde condiciones normales de laboratorio hasta muy altos valores, tales como aquellos de interés para la fusión nuclear y en estudios de astrofísica.

Referencias:

- [1] T. Kaneko, *Wave packet theory of bond electrons*, Phys. Rev. A **40**, 2188 (1989).
- [2] T. Kaneko, *Partial and total electronic stoppings of solids and atoms for energetic ions*, Phys. Status Solidi B **156**, 49 (1989).
- [3] T. Kaneko, *Partial and total electronic stopping cross sections of atoms and solids for protons*, At. Data Nucl. Data Tables **53**, 271 (1993).
- [4] C. D. Archubi and N. R. Arista, *Extended wave-packet model to calculate energy-loss moments of protons in matter*, Phys. Rev. A **96**, 062701 (2017).
- [5] C. D. Archubi and N. R. Arista, *Studies of threshold effects in the interaction of protons, electrons and positrons in matter using dielectric models*, in *Rufus Ritchie, A Gentleman and A Scholar, Advances in Quantum Chemistry*, edited by J. Sabin and J. Oddershede (Academic Press, New York, 2019), Vol. **80**, Chap. 10, pp. 247–269.
- [6] C. D. Archubi and N. R. Arista, *Unified description in the interaction and energy loss of particles with dense matter and plasmas*, Phys. Rev. A **102**, 052811 (2020).
- [7] Z. H. Levine and S. G. Louie, *New model dielectric function and exchange-correlation potential for semiconductors and insulators*, Phys. Rev. B **25**, 6310 (1982).

- [8] C. C. Montanari and J. E. Miraglia, *The dielectric formalism for inelastic processes in high-energy ion-matter collisions*, *Adv. Quantum Chem.* **65**, 165 (2013).
- [9] N. R. Arista and W. Brandt, *Dielectric response of quantum plasmas in thermal equilibrium*, *Phys. Rev. A* **29**, 1471 (1984).