

Máster Universitario en Física y Matemáticas. Trabajo de Fín de Máster



**VNiVERSiDAD
D SALAMANCA**

Interacción de haces de iones ultracortos con la materia

Interaction of ultrashort ion beams with matter

Autor:

Carlos Sánchez Sánchez

Supervisado por:

Dr. Alessandro Curcio
Prof. Luca Volpe
Dr. Mario Amado Montero

22 de Mayo de 2022

Máster Universitario en Física y Matemáticas. Trabajo de Fín de Máster



VNiVERSIDAD
D SALAMANCA

Interacción de haces de iones ultracortos con la materia

Interaction of ultrashort ion beams with matter

Autor:

Carlos Sánchez Sánchez:

Supervisado por:

Dr. Alessandro Curcio:

Prof. Luca Volpe:

Firmado por VOLPE LUCA -
****3097* el día

Dr. Mario Amado Montero:

AMADO MONTERO Digitally signed by AMADO
MONTERO MARIO - 14307293M
MARIO - 14307293M Date: 2022.07.06 16:32:21 +02'00'

Resumen

Durante los últimos años, el número de instalaciones de láseres ultraintensos se ha extendido por todo el mundo^{1,2}. Los láseres de pulso corto e intensidades superiores a 10^{18} W/cm^2 se han utilizado ampliamente para generar fuentes concentradas de radiación y partículas.

Las fuentes de iones, debido a la deposición controlada de energía en la materia a una profundidad determinada por su pico de Bragg, las hace interesantes en campos de la física, la química y la ciencia de los materiales, así como en la biología, la medicina y el patrimonio cultural³.

Debido a los avances en la generación de pulsos de iones ultracortos por interacción láser-plasma, se requiere un nuevo estudio de la teoría del poder de frenado que tenga en cuenta el efecto colectivo de los iones que componen el haz. Estudios previos⁴ han demostrado que bajo ciertas condiciones, los efectos colectivos de la materia se deben tener en cuenta, suponiendo correcciones a la fórmula del poder de frenado de Bethe-Bloch empleada habitualmente.

Palabras clave:

Ecuación de Bethe-Bloch, poder de frenado, absorción coherente, efecto de densidad, aceleración de partículas, interacción láser-plasma, haces ultracortos de iones, interacción de la radiación con la materia, interacción coulombiana.

Abstract

Over the past few years, the number of ultra-intense laser installations has increased around the world^{1,2}. Short-pulse lasers with intensities greater than 10^{18} W/cm^2 have been widely used to generate concentrated sources of radiation and particles.

Ion sources, because of the controlled deposition of energy in matter at a depth determined by their Bragg peak, make them of interest in fields of physics, chemistry and materials science, as well as in biology, medicine and cultural heritage³.

Due to the progress in the generation of ultrashort ion pulses by laser-plasma interaction, a new study of the stopping power theory that takes into account the collective effect of the ions composing the beam is required. Previous studies⁴ have shown that under certain conditions, the collective effects of matter must be taken into account, assuming corrections to the Bethe-Bloch stopping power formula usually employed.

Keywords:

Bethe-Bloch equation, stopping power, coherent absorption, density effect, particle acceleration, laser-plasma interaction, ultrashort ion beams, interaction of radiation with matter, Coulomb interaction.

Índice

1. Introducción	1
1.1. Interacción de partículas cargadas con la materia . .	1
1.2. Aceleración de iones por interacción láser-plasma . .	3
2. Objetivos	4
3. Desarrollo teórico	5
3.1. Campos y potenciales electromagnéticos en el dominio de frecuencias	5
3.1.1. Ecuaciones de Maxwell en función de los potenciales	5
3.1.2. Transformada de Fourier y expresiones de los campos y potenciales en el dominio de frecuencias	7
3.2. Análisis del poder de frenado de un ión individual . .	9
3.2.1. Campos electromagnéticos de un ión individual en el dominio de frecuencias	9
3.2.2. Componentes y módulo del campo en el dominio $\mathbf{r}$, ω	11
3.2.3. Energía perdida mediante interacción coulombiana ión-átomo	14
3.2.4. Deducción de la fórmula del poder de frenado del ión individual	16
3.2.5. Límite de Bethe	19
3.3. Análisis del poder de frenado de un haz de iones . . .	22

3.3.1.	Campos electromagnéticos de un haz de iones en el dominio de frecuencias	22
3.3.2.	Deducción de la fórmula del poder de frenado de un haz de iones	23
3.3.3.	Distribución de carga en el espacio de fre- cuencias	24
4.	Simulaciones	27
4.1.	Análisis del poder de frenado de un haz de protones en agua	31
4.1.1.	Dependencia del poder de frenado con la carga del haz	31
4.1.2.	Dependencia del poder de frenado con la longitud del haz	33
4.1.3.	Dependencia del poder de frenado con la sección transversal del haz	35
4.2.	Análisis del poder de frenado de un haz de partículas alfa en agua	37
4.2.1.	Dependencia del poder de frenado con la carga del haz	37
4.2.2.	Dependencia del poder de frenado con la longitud del haz	39
4.2.3.	Dependencia del poder de frenado con la sección transversal del haz	41
5.	Resultados y discusión	44
6.	Conclusiones	45
	Apéndices	49
A.	Caso particular: Campos de un ión en reposo	49

B. Momento máximo intercambiado en una colisión ión-electrón	50
C. Código <i>Mathematica</i> empleado para las resoluciones numéricas	51

1. Introducción

1.1. Interacción de partículas cargadas con la materia

El frenado de partículas cargadas en la materia ha sido objeto de estudio desde el descubrimiento de la emisión de partículas energéticas por los elementos radiactivos⁵. Los primeros intentos por desarrollar una teoría que explicase las pérdidas de energía de estas partículas fueron insatisfactorias debido a que no existía todavía un modelo preciso del átomo. En la primera década del siglo XX, se obtuvo suficiente evidencia experimental de la interacción de partículas radiactivas en la materia como para hacer de la teoría del poder de frenado un tema central en el desarrollo del modelo atómico.

Las características esenciales del poder de frenado, es decir, de las pérdidas energéticas por unidad de longitud recorrida por una partícula en un medio material, fueron descritas por primera vez por Bohr en términos de una teoría clásica. Analizó el comportamiento de iones rápidos en la materia, donde los electrones de los átomos del material cercanos al ión proyectil son tratados como osciladores clásicos que se ponen en movimiento por el campo eléctrico de dicho ión, perdiendo este una energía igual a la adquirida por los electrones. Además, introdujo conceptos de su teoría de la estructura atómica, dándole a los electrones las frecuencias orbitales obtenidas de su espectro óptico.

Una de las conclusiones a las que Bohr llegó fue a que, si el ión proyectil es lo suficientemente rápido, teniendo en cuenta las masas relativas del núcleo y los electrones del átomo, las pérdidas energéticas por interacción con el núcleo son despreciables con respecto a las pérdidas con los electrones del material.

Con el desarrollo de la mecánica cuántica, la teoría del poder de frenado pudo ser analizada mediante otro enfoque. No era posible un desarrollo cuántico directo de la teoría de Bohr debido a que esta empleaba el parámetro de impacto para analizar el choque entre el ión proyectil y el electrón objetivo, y la mecánica cuántica prohíbe que una partícula con momento bien definido esté localizada espacialmente, por lo que no era posible encontrar soluciones cuantizadas para colisiones cercanas con el enfoque de Bohr.

Bethe presentó la primera solución completa para el poder de frenado en partículas de alta velocidad empleando la primera aproximación de Born, donde todo el sistema se considera cuantizado, definiendo el poder de frenado en términos de la transferencia de momento. Su teoría fue extendida después incluyendo correcciones relativistas.

Posteriormente, Bloch evaluó las diferencias entre ambos modelos cuántico, desarrollado por Bethe, y clásico, dado por Bohr. Bloch encontró que el enfoque de Bohr era válido para parámetros de impacto mucho más grandes que el tamaño orbital, donde era correcta la aproximación dipolar necesaria para eliminar el problema de la localización espacial.

Para distancias cercanas entre ión y átomo, Bloch encontró que si la transferencia de momento era baja, la aproximación cuántica de Bethe era correcta. En cambio, para transferencias de momento elevadas el paquete de ondas de los electrones atómicos sufría scattering clásico y de nuevo el enfoque de Bohr era adecuado.

Así, Bloch encontró el nexo de unión entre el enfoque clásico de Bohr y cuántico de Bethe. El resultado de su estudio es la conocida fórmula de Bethe-Bloch, que en su versión relativista en el sistema de unidades gaussiano es:

$$S = \frac{4\pi e^4 Z_2}{m_e v^2} Z_1^2 \left[\ln \frac{2m_e v^2}{\langle I \rangle} - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 + \Psi \right] \quad (1)$$

donde las variables involucradas son

S	Poder de frenado de la partícula incidente
Z_1	Número atómico de la partícula
v	Velocidad de la partícula
Z_2	Número atómico del material
$\langle I \rangle$	Energía media de ionización del material
e	Carga del electrón
m_e	Masa del electrón
β	Velocidad relativa de la partícula v/c

Los primeros dos sumandos dentro de los corchetes en la ecuación (1) son los términos principales del poder de frenado. Mediante el uso de la energía de ionización media, se corrige la cuantización de los niveles atómicos del material. El tercer sumando, β^2 , corresponde a correcciones relativistas de la fórmula debido a la interacción de spin. El último término, Ψ , abarca otras correcciones aplicables.

Un estudio posterior realizado por Fano resumió la mayor parte del trabajo teórico realizado en los cincuenta años anteriores. En su enfoque, describió la versión relativista de la ecuación de Bethe-Bloch incluyendo dos términos en Ψ . Estos son el llamado *shell correction term*, $-C/Z_2$, y el *density effect correction term*, $-\delta/2$.

El primer término, $-C/Z_2$, corrige la suposición de que la velocidad del ión es mucho mayor que la de los electrones atómicos, y supone una corrección del poder de frenado de hasta un 10 %, que se da para las energías más bajas ($\sim 1MeV$), donde la fórmula deja de ser válida para electrones ligeros (H, He) debido a la neutralización del haz por absorción de los electrones del material.

La segunda corrección, $-\delta/2$, se debe al estudio realizado por Fermi en el que analizó la respuesta colectiva del material al campo del ión incidente. Demostró que, para velocidades relativistas del ión, la polarización del material es apreciable, y el campo electromagnético se ve entonces reducido por la constante dieléctrica del medio, disminuyendo notablemente el poder de frenado para velocidades suficientemente elevadas.⁴

1.2. Aceleración de iones por interacción láser-plasma

En 1957, Veksler introdujo el concepto de *aceleración coherente* de partículas, como un mecanismo por el cual el campo acelerador de cada partícula era proporcional al número de partículas aceleradas. La previsión de Veksler para los aceleradores de partículas del futuro incluía la sincronización automática entre las partículas y el campo acelerador, la localización de dicho campo dentro de la región donde se encuentran las partículas y la producción de grupos casi neutros con un gran número de partículas energéticas.⁶

Estas características se cumplen hoy en día en los aceleradores de iones de plasmas producidos por pulsos láser ultraintensos. En ellos, el desplazamiento colectivo gran cantidad de electrones genera un campo eléctrico muy intenso que acelera los iones hasta que se consigue la neutralidad de carga y electrones e iones se mueven juntos en una trayectoria balística.

Hasta el año 2000, la aceleración de partículas mediante este método producía emisión de iones altamente isótropos, con poca luminosidad, lo que lo hacía poco atractivo para el uso en aplicaciones de los aceleradores de partículas convencionales. En 2000, sin embargo, tres experimentos (Clark et al., 2000; Maksimchuk et al., 2000; Snavely et al., 2000) reportaron de forma independiente la observación de una intensa emisión de protones bastante colimados de varios MeV y varias micras de espesor, emitidos desde objetivos sólidos irradiados por pulsos láser de alta intensidad.

Era conocido que dichos protones tenían su origen en impurificaciones que normalmente están depositadas de manera natural en la superficie de las láminas objetivo, como finas capas de agua condensada o hidrocarburos. Dichos protones eran emitidos desde el lado contrario al de la radiación láser, y su origen fue interpretado en términos de la aceleración durante la expansión de plasma caliente generado en el lado irradiado de la lámina objetivo (en la Figura 1 se muestra esquemáticamente el proceso).

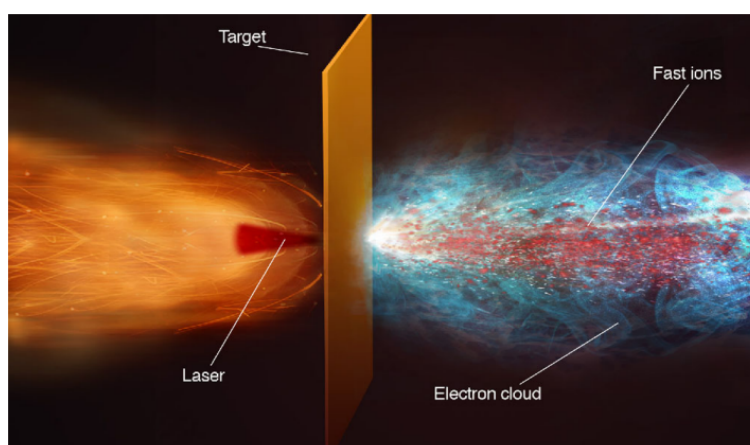


Figura 1: Visión artística del proceso de aceleración láser-plasma.

El alto grado de colimación y laminaridad de los haces de iones generados los hace interesantes para fines tanto científicos como civiles, en campos de la física, la química y la ciencia

de los materiales, así como en la biología, la medicina y el patrimonio cultural³. Posibles aplicaciones pueden ser la terapia de protones^{7,8}, el estudio de ecuaciones de estado, medidas del poder de frenado en iones (*ion stopping power*) en la materia, fusión nuclear, nuevas fuentes de neutrones rápidas, el calentamiento isocórico inducido por iones en la materia⁹⁻¹², radiografía de protones^{13,14}, calentamiento de partículas alfa en fusión por confinamiento inercial (ICF)^{15,16}, el enfoque de encendido rápido de protones de ICF¹⁷, y la fusión de iones pesados^{18,19}. Para muchas de estas aplicaciones, es requerido un incremento de la energía por nucleón hasta cientos de MeV en adelante, que se podría conseguir con la próxima generación de instalaciones láser.

2. Objetivos

En este trabajo se va a deducir desde un enfoque del electromagnetismo clásico la ecuación general del poder de frenado de un haz de iones. Para ello, partiremos de las ecuaciones de Maxwell en medios materiales, obteniendo los campos electromagnéticos en función de la distribución de carga en el espacio de frecuencias.

La fórmula hallada para el campo magnético podrá ser útil en futuros trabajos donde se estudien regímenes de altas energías cinéticas de los iones. No obstante, en este trabajo estudiaremos el poder de frenado para iones de bajas energías (10 MeV - 100 MeV), rango dentro del cual actualmente se producen en el Centro de Láseres Pulsados (CLPU) en Villamayor, Salamanca²⁰ (Figura 2). En este rango de energías, las contribuciones al poder de frenado debidas al campo magnético son despreciables, por lo que se desarrollará el estudio únicamente de pérdidas producidas por el campo eléctrico.

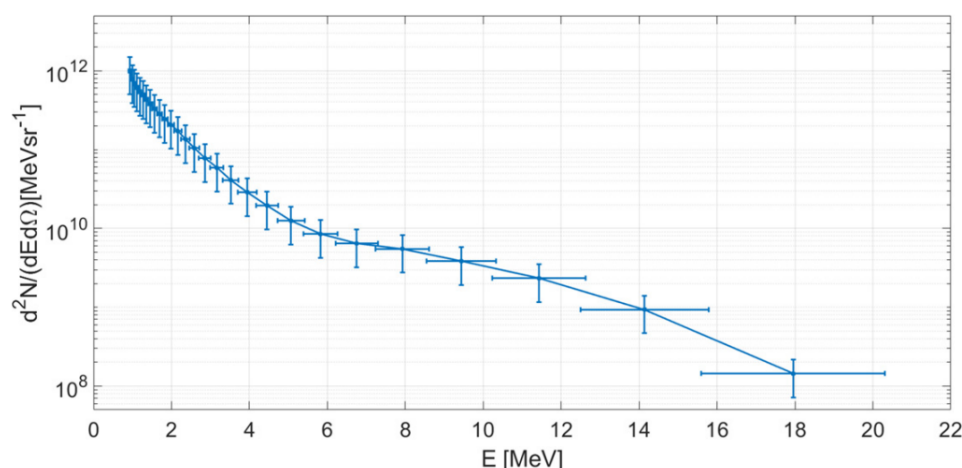


Figura 2: El espectro de protones recuperado de la señal sin procesar recopilada durante un disparo realizado en una lámina de aluminio de 3 μm (CLPU).

Para componentes frecuenciales bajas del campo eléctrico, donde la longitud de onda es comparable a la longitud del haz, se mostrará la existencia de un efecto colectivo de los iones incidentes, donde el campo eléctrico de cada ión interfiere coherentemente con el del resto, aumentando la posibilidad de interacción con la materia, incrementando así el poder de frenado total y reduciendo la profundidad de penetración (absorción coherente). La fórmula del poder de frenado incoherente, es decir, que no tiene en cuenta la interacción entre los iones proyectil (Bethe-Bloch), debe ser corregida por tanto para bajas frecuencias.

Posteriormente, se analizará el poder de frenado de haces de iones ligeros (H, He) mediante la resolución numérica para bajas frecuencias de la ecuación de frenado deducida anteriormente, donde se tendrá en cuenta la absorción coherente; para el resto de frecuencias se empleará la ecuación de Bethe-Bloch, que tendrá en cuenta las pérdidas por ionización del material, las cuales suponen la principal pérdida energética incoherente.

Sumando ambas contribuciones, obtendremos el poder de frenado total para estos haces de iones ultracortos. Una comparación posterior entre los resultados de H y He, y entre estos y los datos experimentales del poder de frenado de iones individuales (incoherente) del *National Institute of Standards and Technology* (NIST), nos mostrará hasta que punto la absorción coherente influye en el poder de frenado total.

3. Desarrollo teórico

3.1. Campos y potenciales electromagnéticos en el dominio de frecuencias

3.1.1. Ecuaciones de Maxwell en función de los potenciales

Partimos de las ecuaciones de Maxwell en el sistema internacional de unidades:

$$\begin{aligned}
 \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} && \text{(Ley de Faraday – Lenz)} \\
 \nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) && \text{(Ley de Ampere – Maxwell)} \\
 \nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) &= \rho(\mathbf{r}, t) && \text{(Ley de Gauss)} \\
 \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= 0 && \text{(Ley de Gauss para el magnetismo)}
 \end{aligned} \tag{2}$$

y de las definiciones del potencial vector magnético y del potencial eléctrico:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A} \\
 \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \Phi
 \end{aligned} \tag{3}$$

Las ecuaciones de Maxwell se pueden reescribir en términos de los potenciales. En efecto, a partir de la definición de campo eléctrico en (3) y de la Ley de Gauss en (2):

$$\nabla \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot (\varepsilon \mathbf{E}) = (\nabla \varepsilon) \cdot \mathbf{E} + \varepsilon (\nabla \cdot \mathbf{E}) = (\nabla \varepsilon) \cdot \mathbf{E} - \varepsilon \nabla^2 \Phi - \varepsilon \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{A}) = \rho(\mathbf{r}, t)$$

Asumiendo medios lineales, isótropos y homogéneos, donde $\varepsilon = \varepsilon(\omega)$ sea un escalar que solo dependa de la frecuencia, entonces se tiene que $\nabla \varepsilon = 0$, por tanto:

$$\nabla^2 \Phi + \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{A}) = -\frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\varepsilon(\omega)} \quad (4)$$

Por otro lado, a partir de la definición del campo magnético en (3) y de la Ley de Ampère-Maxwell en (2) para medios con μ independiente de la posición:

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} = \nabla \times \mu \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \mu \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mu \mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$$

Si ahora aplicamos la igualdad $\mathbf{D} = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}$, teniendo en cuenta la ecuación (3) para el campo eléctrico:

$$\begin{aligned} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} &= \mu \varepsilon(\omega) \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \Phi \right) + \mu \mathbf{J} = -\mu \varepsilon(\omega) \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \mu \varepsilon(\omega) \nabla \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \mu \mathbf{J} \\ \nabla^2 \mathbf{A} - \mu \varepsilon(\omega) \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{A} + \mu \varepsilon(\omega) \frac{\partial \Phi}{\partial t} \right) &= -\mu \mathbf{J} \end{aligned} \quad (5)$$

Las fórmulas así obtenidas, (4) y (5), son las ecuaciones de Maxwell en función de los potenciales $\mathbf{A}$ y Φ .

Si ahora aplicamos el Gauge de Lorenz:

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \mu \varepsilon(\omega) \frac{\partial \Phi}{\partial t} = 0$$

obtenemos las ecuaciones de Maxwell en función de los potenciales expresadas en su forma de ecuaciones de onda no homogéneas:

$$\begin{aligned} \left(\mu_0 \varepsilon(\omega) \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \Phi(\mathbf{r}, t) &= \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\varepsilon(\omega)} \\ \left(\mu_0 \varepsilon(\omega) \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 \right) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \mu_0 \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v} \end{aligned} \quad (6)$$

Nótese que en la última ecuación en (6) hemos despreciado la magnetización del medio ($\mu = \mu_0$). También hemos hecho la sustitución $\mathbf{J} = \rho \mathbf{v}$, donde ρ es la densidad de carga y $\mathbf{v}$ la velocidad de la carga.

3.1.2. Transformada de Fourier y expresiones de los campos y potenciales en el dominio de frecuencias

Una función $f(\mathbf{r}, t)$ se puede expresar en el dominio de frecuencias espaciales y temporales mediante la transformada de Fourier inversa:

$$f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega F(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} \quad (7)$$

donde $F(\mathbf{k}, \omega) \equiv \mathbb{F}[f(\mathbf{r}, t)]$ es la transformada de Fourier de la función $f(\mathbf{r}, t)$.

A continuación se demuestran algunas de sus propiedades que se emplearán en el posterior desarrollo matemático:

$$\boxed{\mathbb{F}\left[\frac{d^n f(\mathbf{r}, t)}{dt^n}\right] = (-i\omega)^n F(\mathbf{k}, \omega)} \quad (8)$$

Demostración:

$$\frac{d^n f(\mathbf{r}, t)}{dt^n} = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega \mathbb{F}\left[\frac{d^n f(\mathbf{r}, t)}{dt^n}\right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^n f(\mathbf{r}, t)}{dt^n} &= \frac{d^n}{dt^n} \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega F(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega F(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{d^n}{dt^n} e^{-i\omega t} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega (-i\omega)^n F(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} \end{aligned} \quad (10)$$

Se obtiene (8) igualando los integrandos en (9) y (10).

$$\boxed{\mathbb{F}[\nabla f(\mathbf{r}, t)] = i\mathbf{k} F(\mathbf{k}, \omega)} \quad (11)$$

Demostración:

$$\nabla f(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega \mathbb{F}[\nabla f(\mathbf{r}, t)] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \nabla f(\mathbf{r}, t) &= \nabla \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega F(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) \nabla e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\omega t} = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega i\mathbf{k} F(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} \end{aligned} \quad (13)$$

Se obtiene (11) igualando los integrandos en (12) y (13).

$$\boxed{\mathbb{F}[\nabla \times \mathbf{f}(\mathbf{r}, t)] = i\mathbf{k} \times \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega)} \quad (14)$$

Demostración:

$$\nabla \times \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega \mathbb{F}[\nabla \times \mathbf{f}(\mathbf{r}, t)] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{f}(\mathbf{r}, t) &= \nabla \times \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega \nabla e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \times \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\omega t} = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^3k \int d\omega i\mathbf{k} \times \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-i\omega t} \end{aligned} \quad (16)$$

Se obtiene (14) igualando los integrandos en (15) y (16).

Si aplicamos las propiedades (8), (11) y (14) a las ecuaciones (3), se obtienen los campos eléctrico y magnético en función de los potenciales en el dominio de frecuencias espaciales y temporales:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \longrightarrow \mathbf{B}(\mathbf{k}, \omega) = i\mathbf{k} \times \mathbf{A}(\mathbf{k}, \omega) \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \nabla \Phi(\mathbf{r}, t) \longrightarrow \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = i\omega \mathbf{A}(\mathbf{k}, \omega) - i\mathbf{k} \Phi(\mathbf{k}, \omega) \end{aligned} \quad (17)$$

De la misma manera, aplicando dichas propiedades a las ecuaciones (6) halladas anteriormente, se obtienen las expresiones de los potenciales en el dominio de frecuencias espaciales y temporales:

$$\begin{aligned}
 \left[k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} \right] \Phi(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \rho(\mathbf{k}, \omega) \longrightarrow \Phi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\rho(\mathbf{k}, \omega)}{\varepsilon(\omega) \left[k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} \right]} \\
 \left[k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} \right] \mathbf{A}(\mathbf{k}, \omega) &= \mu_0 \mathbf{v} \rho(\mathbf{k}, \omega) \longrightarrow \mathbf{A}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\mu_0 \mathbf{v} \rho(\mathbf{k}, \omega)}{k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}}
 \end{aligned} \tag{18}$$

donde se ha hecho el cambio $\mu_0 \varepsilon(\omega) = \varepsilon_r(\omega) \frac{1}{c^2}$, con $\varepsilon_r(\omega)$ la permitividad eléctrica relativa.

Expresar los campos electromagnéticos en el dominio de frecuencias nos ayuda a visualizar el campo eléctrico como una distribución de fotones virtuales de frecuencia temporal ω y espacial $\mathbf{k}$ emitidos por la fuente en el contexto de la física de partículas.

3.2. Análisis del poder de frenado de un ión individual

En esta sección calculamos, mediante una interpretación clásica de la dinámica de partículas, el poder de frenado de un ión debido a la interacción coulombiana con los electrones de un átomo, esto es, la pérdida de energía cinética por unidad de distancia recorrida. El valor obtenido será el correspondiente a las pérdidas totales con el átomo, puesto que, como se ha comentado con anterioridad, las pérdidas debido a la interacción con el núcleo atómico son despreciables frente a las anteriores.

Se parte de la expresión obtenida en secciones anteriores para el campo eléctrico, que se utilizará para conocer la fuerza ejercida por el ión sobre los electrones atómicos, y calcular así el trabajo realizado.

3.2.1. Campos electromagnéticos de un ión individual en el dominio de frecuencias

Las densidades de carga y de corriente de un ión, tratado como una partícula puntual con carga q y velocidad constante $\mathbf{v}$, son las siguientes:

$$\begin{aligned}
 \rho(\mathbf{r}, t) &= q \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}t) \\
 \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{v} \rho(\mathbf{r}, t) = \mathbf{v} q \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)
 \end{aligned} \tag{19}$$

En el dominio de frecuencias espaciales y temporales, estas magnitudes vendrán dadas por la transformada de Fourier de las expresiones anteriores:

$$\begin{aligned}\rho(\mathbf{k}, \omega) &= \int d^3r \int dt \rho(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\omega t} = q \int d^3r \int dt \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}t) e^{i(\omega t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r})} = \\ &= q \int dt e^{i(\omega - \mathbf{k}\cdot\mathbf{v})t} = 2\pi q \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})\end{aligned}\quad (20)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{k}, \omega) = \mathbf{v} \rho(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi q \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v}$$

Cabe mencionar que, en la última igualdad en la expresión de la densidad de carga, se ha empleado la siguiente propiedad de la función Delta de Dirac:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{ixt} \quad (21)$$

Sustituyendo los valores de las ecuaciones (20) en las expresiones de los potenciales (18), se obtienen los potenciales en el dominio de frecuencias espaciales y temporales generados por el ión:

$$\Phi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2\pi q \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})}{\varepsilon(\omega) \left(k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} \right)} \quad (22)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\mu_0 2\pi q \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v}}{k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}} = \mu_0 \varepsilon(\omega) \Phi(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{v} = \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \Phi(\mathbf{k}, \omega) \mathbf{v} \quad (23)$$

A partir de estas expresiones de los potenciales, podemos calcular los campos eléctrico y magnético empleando las ecuaciones (17), que resultan:

$$\mathbf{B}(\mathbf{k}, \omega) = i\mathbf{k} \times \mathbf{A}(\mathbf{k}, \omega) = i\Phi(\mathbf{k}, \omega) \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \mathbf{k} \times \mathbf{v} = i \frac{\mu_0 2\pi q \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})}{k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}} \mathbf{k} \times \mathbf{v} \quad (24)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) &= i\omega \mathbf{A}(\mathbf{k}, \omega) - i\mathbf{k} \Phi(\mathbf{k}, \omega) = i\Phi(\mathbf{k}, \omega) \left(\frac{\varepsilon_r(\omega) \omega}{c^2} \mathbf{v} - \mathbf{k} \right) = \\ &= i \frac{2\pi q \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})}{k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}} \left(\mu_0 \omega \mathbf{v} - \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \mathbf{k} \right)\end{aligned}\quad (25)$$

Las dos ecuaciones anteriores se analizan en el Anexo A para el caso particular electrostático ($\mathbf{v} = 0$), obteniendo la conocida Ley de Coulomb.

3.2.2. Componentes y módulo del campo en el dominio $\mathbf{r}, \omega$

Resulta interesante desarrollar la ecuación (25) en función de $\mathbf{r}, \omega$. Por simplicidad, consideraremos un ión con velocidad constante en el eje Z, $\mathbf{v} = (0, 0, v)$. Aplicando la transformada inversa de Fourier sobre el espacio de las $\mathbf{k}$, el campo eléctrico puede ser expresado como:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3k = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int i \frac{2\pi q \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})}{k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}} \left(\mu_0 \omega \mathbf{v} - \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \mathbf{k} \right) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3k = \\ &= \frac{-iq}{(2\pi)^2} \int \frac{\mathbf{k} - \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \omega \mathbf{v}}{\varepsilon(\omega) \left(k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} \right)} \delta(\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3k \end{aligned} \quad (26)$$

Para hallar las componentes longitudinal y radial del campo eléctrico (con respecto a la dirección de movimiento del ión), expresamos la posición en coordenadas cilíndricas

$$\mathbf{r} = \{\varrho \cos \varphi', \varrho \sin \varphi', z\} \quad (27)$$

y el vector $\mathbf{k}$ en coordenadas esféricas

$$\mathbf{k} = k \{\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta\} \quad (28)$$

El producto $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$ puede ser expresado entonces del siguiente modo:

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = k (z \cos \theta + \varrho \sin \theta \cos \varphi' \cos \varphi + \varrho \sin \theta \sin \varphi' \sin \varphi) \quad (29)$$

Teniendo esto en cuenta, la componente longitudinal del campo eléctrico se calcula como sigue:

$$\begin{aligned}
 E_z(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{-iq}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{k \cos \theta - \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \omega v}{\varepsilon(\omega) \left(k^2 - \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \omega^2 \right)} . \\
 \delta(\omega - kv \cos \theta) e^{ik(z \cos \theta + \varrho \sin \theta \cos(\varphi' - \varphi))} &= \frac{-2iq\omega e^{i\frac{\omega z}{v}}}{(2\pi)^2 v^2 \varepsilon_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_r(\omega)} - \frac{v^2}{c^2} \right) . \\
 \int_0^\infty dk k \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{1}{k^2 - \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \omega^2} e^{ik\varrho \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{k^2 v^2}} \cos(\varphi' - \varphi)} &= \\
 = \frac{-iq\omega e^{i\frac{\omega z}{v}}}{\pi v^2 \varepsilon_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_r(\omega)} - \frac{v^2}{c^2} \right) \int_0^\infty dk k \frac{J_0 \left(k\varrho \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{k^2 v^2}} \right)}{k^2 - \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \omega^2} = \\
 = \frac{-iq\omega e^{i\frac{\omega z}{v}}}{\pi v^2 \varepsilon(\omega)} \left(1 - \varepsilon_r(\omega) \frac{v^2}{c^2} \right) K_0 \left(\frac{\omega}{v} \varrho \sqrt{1 - \varepsilon_r(\omega) \frac{v^2}{c^2}} \right)
 \end{aligned} \tag{30}$$

La componente radial será entonces:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}_\varrho(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{-iq}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{k \sin \theta \{ \cos \varphi', \sin \varphi', 0 \}}{\varepsilon(\omega) \left(k^2 - \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \omega^2 \right)} . \\
 \delta(\omega - kv \cos \theta) e^{ik(z \cos \theta + \varrho \sin \theta \cos(\varphi' - \varphi))} &= \frac{-2iq e^{i\frac{\omega z}{v}}}{(2\pi)^2 \varepsilon(\omega) v} . \\
 \int_0^\infty dk k^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \{ \cos \varphi', \sin \varphi', 0 \} \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{k^2 v^2}} \frac{e^{ik\varrho \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{k^2 v^2}} \cos(\varphi' - \varphi)}}{k^2 - \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \omega^2} &= \\
 = \frac{q e^{i\frac{\omega z}{v}} \{ \cos \varphi, \sin \varphi, 0 \}}{\pi \varepsilon(\omega) v} \int_0^\infty dk k^2 \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{k^2 v^2}} \frac{J_1 \left(k\varrho \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{k^2 v^2}} \right)}{k^2 - \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \omega^2} = \\
 = \frac{-q e^{i\frac{\omega z}{v}} \{ \cos \varphi, \sin \varphi, 0 \}}{\pi \varepsilon(\omega) v} \frac{\partial}{\partial \varrho} \left[\int_0^\infty dk k \frac{J_0 \left(k\varrho \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{k^2 v^2}} \right)}{k^2 - \frac{\varepsilon_r(\omega)}{c^2} \omega^2} \right] = \\
 = \frac{q\omega e^{i\frac{\omega z}{v}}}{\pi v^2 \varepsilon(\omega)} \sqrt{1 - \varepsilon_r(\omega) \frac{v^2}{c^2}} K_1 \left(\frac{\omega}{v} \varrho \sqrt{1 - \varepsilon_r(\omega) \frac{v^2}{c^2}} \right) \{ \cos \varphi, \sin \varphi, 0 \}
 \end{aligned} \tag{31}$$

donde K_0 y K_1 son las funciones modificadas de Bessel de segunda especie de orden cero y uno, respectivamente.

El módulo al cuadrado del campo eléctrico será la suma de los módulos al cuadrado de sus componentes:

$$|\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)|^2 = |E_x|^2 + |E_y|^2 + |E_z|^2 = |\mathbf{E}_\varrho|^2 + |E_z|^2 \tag{32}$$

Definiendo los valores $\beta = \frac{v}{c}$, y $\gamma(\omega) = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2 \varepsilon_r(\omega)}}$, los módulos al cuadrado de cada componente del campo son:

$$|E_z|^2 = \frac{q^2 \omega^2}{\pi^2 v^4 |\varepsilon(\omega)|^2} \frac{1}{|\gamma(\omega)|^4} \left| K_0 \left(\frac{\omega \varrho}{v \gamma(\omega)} \right) \right|^2$$

$$|\mathbf{E}_\varrho|^2 = \frac{q^2 \omega^2}{\pi^2 v^4 |\varepsilon(\omega)|^2} \frac{1}{|\gamma(\omega)|^2} \left| K_1 \left(\frac{\omega \varrho}{v \gamma(\omega)} \right) \right|^2$$

Por lo tanto, sustituyendo en (32) se tiene:

$$|\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)|^2 = \frac{q^2 \omega^2}{\pi^2 v^4 |\varepsilon(\omega)|^2} \frac{1}{|\gamma(\omega)|^4} |K_0|^2 + \frac{q^2 \omega^2}{\pi^2 v^4 |\varepsilon(\omega)|^2} \frac{1}{|\gamma(\omega)|^2} |K_1|^2 =$$

$$= \frac{q^2 \omega^2}{\pi^2 v^4 |\varepsilon(\omega)|^2} \frac{1}{|\gamma(\omega)|^2} \left(\frac{|K_0|^2}{|\gamma(\omega)|^2} + |K_1|^2 \right) \quad (33)$$

con K_0, K_1 con argumento $\frac{\omega}{v} \frac{\varrho}{\gamma(\omega)}$. Como podemos ver, el módulo del campo depende únicamente de la distancia radial ϱ para ambas componentes. Para iones con velocidades suficientemente bajas, como los que estamos estudiando, $\beta \ll 1$ y $\gamma(\omega) \rightarrow 1$, por lo que las funciones de Bessel anteriores son:

$$K_0 \left(\frac{\omega \varrho}{v \gamma(\omega)} \right) \simeq K_0 \left(\frac{\omega \varrho}{v} \right) = K_0 \left(\frac{\varrho}{\varrho_c} \right) \quad (34)$$

$$K_1 \left(\frac{\omega \varrho}{v \gamma(\omega)} \right) \simeq K_1 \left(\frac{\omega \varrho}{v} \right) = K_1 \left(\frac{\varrho}{\varrho_c} \right) \quad (35)$$

El valor $\varrho_c = \frac{v}{\omega}$ es la distancia radial crítica, que es el valor de la variable ϱ al cual el argumento de las funciones de Bessel es la unidad. Es un valor que indica el alcance del campo eléctrico, ya que el valor de K_0, K_1 decae fuertemente para argumentos mayores a la unidad, como se puede ver en la Figura 5.

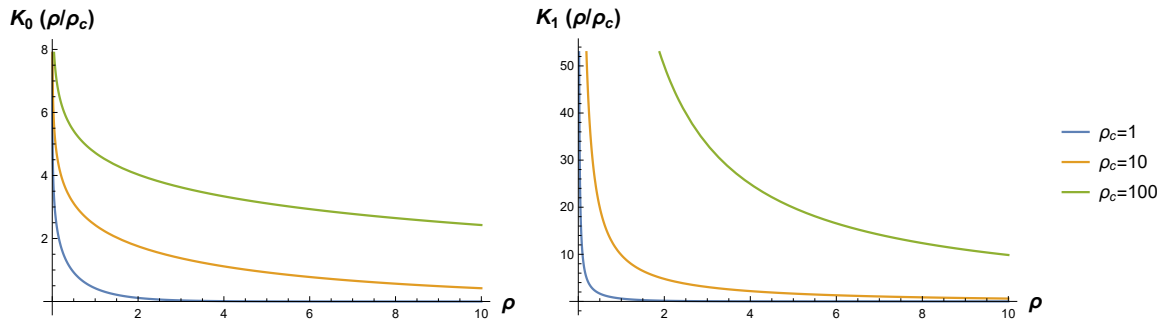


Figura 3: Funciones de Bessel modificadas de segunda especie de orden 0 y 1.

El valor de ρ_c aumenta con la velocidad del ión y disminuye con la frecuencia. Por tanto, las componentes de frecuencias bajas alcanzan mayores distancias que las de frecuencias altas. Además, cualquier frecuencia alcanza mayores distancias cuanto mayor es la velocidad del ión.

Este comportamiento predice resultados de la teoría dieléctrica (Figura 4). En efecto, a frecuencias elevadas el campo alcanza solo unos pocos átomos del material, (los más cercanos a la fuente) por lo que la respuesta del material es débil, lo que causa que la permitividad se acerque a la unidad. Para frecuencias más bajas, el alcance del campo es mayor, abarcando una mayor cantidad de átomos del material, por lo que ejercen una mayor respuesta al campo y la permitividad es mayor.

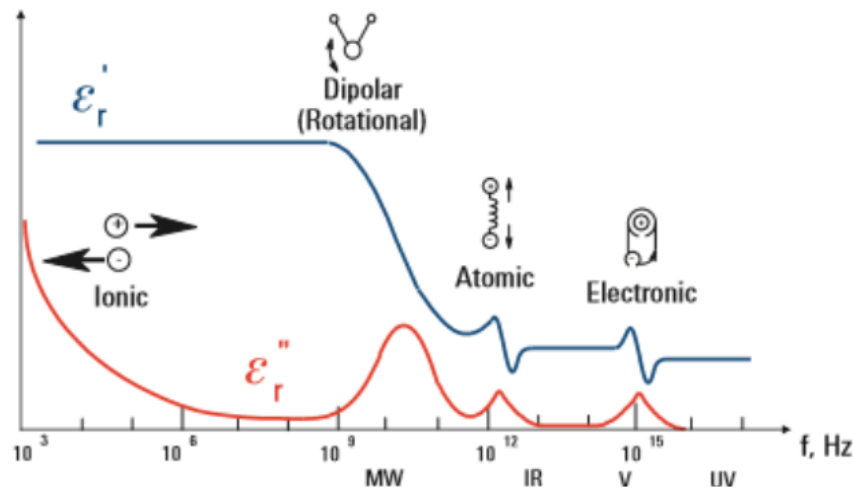


Figura 4: Respuesta frecuencial de la permitividad.

3.2.3. Energía perdida mediante interacción coulombiana ión-átomo

A continuación se deduce la ecuación de la energía perdida por un ión debido a la interacción coulombiana con un átomo el material que atraviesa.

La energía perdida por dicho ión debido a la interacción de su campo eléctrico con un electrón atómico es:

$$\Delta E = - \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = - \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} dt = e \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) dt \quad (36)$$

donde $\mathbf{r}$ y $\mathbf{v}$ son la posición y velocidad del electrón con respecto al núcleo atómico. El trabajo realizado por el campo eléctrico $\mathbf{E}$ del ión sobre dicho electrón es igual a la energía cinética perdida por el primero.

Las expresiones del campo eléctrico y la velocidad anteriores se pueden reescribir en términos de la transformada inversa de Fourier de las funciones en el dominio de frecuencias:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \mathbf{v}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} (-i\omega) \mathbf{r}(\omega) \\ \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i\omega' t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega') \end{aligned} \quad (37)$$

Sustituyendo estas expresiones en la ecuación (36), obtenemos:

$$\begin{aligned} \Delta E &= e \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) dt = -\frac{e}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' i\omega \mathbf{r}(\omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega') e^{-i\omega t} e^{-i\omega' t} = \\ &= -\frac{2\pi e}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' i\omega \mathbf{r}(\omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega') \delta(\omega + \omega') = -\frac{e}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega i\omega \mathbf{r}(\omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, -\omega) = \\ &= -\frac{e}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{\infty} d\omega i\omega \mathbf{r}(\omega) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, -\omega) \right\} = -\frac{e}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{\infty} d\omega i\omega \mathbf{r}(\omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) \right\} \end{aligned} \quad (38)$$

donde se ha tenido en cuenta la paridad del integrando para eliminar las frecuencias negativas del dominio de integración multiplicando por un factor 2.

La sustitución $\mathbf{E}(\mathbf{r}, -\omega) = \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega)$ en la ecuación (38) se demuestra como sigue:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, -\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \right)^* = \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) \quad (39)$$

Si consideramos ahora la interacción del ión incidente con todos los electrones del átomo, y suponemos que la energía total perdida es la suma de las contribuciones de cada electrón:

$$\Delta E = - \sum_j^Z f_j \frac{e}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^{\infty} d\omega i\omega \mathbf{r}_j(\omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) \right\} \quad (40)$$

con Z el número atómico del átomo. Puesto que no todos los electrones interactuarán con el ión incidente con la misma probabilidad, se introduce el factor f_j , que es la probabilidad de que la interacción se de con el electrón j del átomo.

Si introducimos el momento dipolar $\mathbf{p} = -\sum_j f_j e \mathbf{r}_j$ formado por núcleo y los electrones del átomo, y tenemos en cuenta que la polarización de un material viene definida en el caso homogéneo por $\mathbf{P}(\omega) = n_a \mathbf{p}(\omega) = \varepsilon_0(\varepsilon_r(\omega) - 1)\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$, con n_a la densidad de átomos del material, podemos estudiar la interacción con el material macroscópicamente, como un medio continuo. La ecuación (40) resulta entonces:

$$\begin{aligned}\Delta E &= -\sum_j^Z f_j \frac{e}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^\infty d\omega i\omega \mathbf{r}_j(\omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) \right\} = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^\infty d\omega i\omega \mathbf{p}(\omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) \right\} = \\ &= \frac{\varepsilon_0}{\pi n_a} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^\infty d\omega i\omega (\varepsilon_r(\omega) - 1) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega) \right\} = \\ &= \frac{\varepsilon_0}{\pi n_a} \operatorname{Re} \left\{ \int_0^\infty d\omega i\omega ([\operatorname{Re} \varepsilon_r(\omega) + i \operatorname{Im} \varepsilon_r(\omega)] - 1) |\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)|^2 \right\} = \\ &= -\frac{\varepsilon_0}{\pi n_a} \int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{Im}\{\varepsilon_r(\omega)\} |\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)|^2\end{aligned}\tag{41}$$

La ecuación anterior expresa la energía perdida por el ión debido a la interacción ión-electrón con un átomo del material situado en la posición $\mathbf{r}$ respecto a dicho ión.

Debido a que el núcleo del átomo es mucho más pesado que los electrones, su reacción al campo producido por un ión suficientemente rápido es más lenta que estos últimos, y la energía que adquiere en comparación es despreciable. Por tanto, la energía que pierde un ión en la interacción con un átomo es prácticamente la debida a la interacción con sus electrones, que es la que acabamos de calcular.

3.2.4. Deducción de la fórmula del poder de frenado del ión individual

Para calcular la energía total perdida debido a la interacción del ión con todos los átomos, integramos a todo el volumen del material la energía perdida por átomo multiplicada por la densidad atómica. En coordenadas cilíndricas, $\mathbf{r} = \{\varrho \cos \varphi', \varrho \sin \varphi', z\}$, dicha integral resulta:

$$\Delta E_{TOT} = \int \Delta E n_a d^3r = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \Delta E n_a dz d\varphi' \varrho d\varrho = 2\pi n_a \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \Delta E dz \varrho d\varrho \tag{42}$$

Cabe mencionar que, por la simetría del problema, la energía perdida, ΔE , no depende de la variable φ' sino únicamente de la coordenada radial, ϱ , por lo que se ha podido integrar sobre φ' en la ecuación anterior.

El poder de frenado es la energía perdida por unidad de distancia recorrida, y viene dado por el valor $\frac{dE}{dz} = \frac{d(\Delta E_{TOT})}{dz}$, que a partir de la ecuación anterior se puede obtener de manera inmediata:

$$\frac{dE}{dz} = 2\pi n_a \int_0^\infty \Delta E \varrho d\varrho \quad (43)$$

Sustituyendo la última expresión de (41) en (43), obtenemos:

$$\frac{dE}{dz} = -2\varepsilon_0 \int_0^\infty \int_0^\infty \text{Im}\{\varepsilon_r(\omega)\} |\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)|^2 \omega \varrho d\omega d\varrho \quad (44)$$

Para obtener la expresión del poder de frenado para un ión individual, podemos emplear la expresión de $|\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)|^2$ de la ecuación (33) y sustituir en (44). De esta manera, el poder de frenado resulta:

$$\frac{dE}{dz} = -\frac{2\varepsilon_0 q^2}{\pi^2 v^4} \lim_{a \rightarrow 0} \left[\int_a^\infty d\varrho \int_0^\infty d\omega \varrho \omega^3 \frac{\text{Im}\{\varepsilon_r(\omega)\}}{|\varepsilon(\omega)|^2 |\gamma(\omega)|^2} \left(\frac{|K_0|^2}{|\gamma(\omega)|^2} + |K_1|^2 \right) \right] \quad (45)$$

Tenemos que calcular el límite para $a \rightarrow 0$ ya que las funciones de Bessel divergen en 0. No obstante, este límite resulta difícil de calcular. Es más sencillo expresar (44) en función de $|\mathbf{E}(k_x, k_y, z, \omega)|$, y posteriormente desarrollar el campo eléctrico de la ecuación (25) para obtener el campo en función de estas variables y sustituir finalmente en la ecuación del poder de frenado, tal como se realiza a continuación:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dz} &= -2\varepsilon_0 \int_0^\infty \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im}\{\varepsilon_r(\omega)\} |\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)|^2 \varrho d\varrho = \\ &= -2\varepsilon_0 \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im}\{\varepsilon_r(\omega)\} |\mathbf{E}(\varrho, \varphi', z, \omega)|^2 \varrho d\varrho \frac{d\varphi'}{2\pi} = \\ &= -\frac{\varepsilon_0}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im}\{\varepsilon_r(\omega)\} |\mathbf{E}(x, y, z, \omega)|^2 dx dy = \\ &= -\frac{\varepsilon_0}{\pi(2\pi)^2} \int_{-\infty}^\infty \int_{-\infty}^\infty \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im}\{\varepsilon_r(\omega)\} |\mathbf{E}(k_x, k_y, z, \omega)|^2 dk_x dk_y = \\ &= -\frac{\varepsilon_0}{\pi(2\pi)^2} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im}\{\varepsilon_r(\omega)\} |\mathbf{E}(k_\varrho, \varphi, z, \omega)|^2 d\varphi k_\varrho dk_\varrho \end{aligned} \quad (46)$$

con las variables del espacio recíproco expresadas en coordenadas polares, $\{k_x, k_y\} = \{k_\varrho, \varphi\}$.

Por simplicidad suponemos que el ión se desplaza con velocidad constante $\mathbf{v} = \{0, 0, v\}$. El campo eléctrico es:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(k_x, k_y, z, \omega) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{ik_z z} \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = iq \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{ik_z z} \delta(\omega - k_z v) \frac{\mu_0 \omega \mathbf{v} - \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \mathbf{k}}{k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}} = \\ &= i \frac{q}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{ik_z z} \delta\left(k_z - \frac{\omega}{v}\right) \frac{\mu_0 \omega \mathbf{v} - \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \mathbf{k}}{k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}} = \\ &= i \frac{q}{v} e^{i \frac{z\omega}{v}} \frac{\mu_0 \omega \{0, 0, v\} - \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \{k_x, k_y, \omega/v\}}{k_x^2 + k_y^2 + \frac{\omega^2}{v^2} - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}}\end{aligned}\quad (47)$$

Si ahora definimos las cantidades $\beta = \frac{v}{c}$, y $\gamma(\omega) = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2 \varepsilon_r(\omega)}}$, y expresamos el espacio recíproco en coordenadas polares:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(k_\varrho, \varphi, z, \omega) &= i \frac{q}{v} e^{i \frac{z\omega}{v}} \frac{\mu_0 \omega \{0, 0, v\} - \frac{1}{\varepsilon(\omega)} \{k_\varrho \cos \varphi, k_\varrho \sin \varphi, \omega/v\}}{k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{\gamma^2(\omega)}} = \\ &= i \frac{q}{v} e^{i \frac{z\omega}{v}} \frac{\mu_0 \varepsilon(\omega) \omega \{0, 0, v\} - \{k_\varrho \cos \varphi, k_\varrho \sin \varphi, \omega/v\}}{\varepsilon(\omega) \left[k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{\gamma^2(\omega)} \right]} = \\ &= -i \frac{q}{v} e^{i \frac{z\omega}{v}} \frac{1}{\varepsilon(\omega) \left[k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{\gamma^2(\omega)} \right]} \left\{ k_\varrho \cos \varphi, k_\varrho \sin \varphi, \frac{\omega}{v} (1 - \varepsilon_r(\omega) \beta^2) \right\} = \\ &= -i \frac{q}{v} e^{i \frac{z\omega}{v}} \frac{1}{\varepsilon(\omega) \left[k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{\gamma^2(\omega)} \right]} \left\{ k_\varrho \cos \varphi, k_\varrho \sin \varphi, \frac{\omega}{v \gamma(\omega)^2} \right\}\end{aligned}\quad (48)$$

donde se ha empleado la relación $\frac{1}{c^2} = \mu_0 \varepsilon_0$.

Su módulo al cuadrado será entonces:

$$\begin{aligned}|\mathbf{E}(k_\varrho, \varphi, z, \omega)|^2 &= \frac{q^2}{v^2} \frac{1}{|\varepsilon(\omega)|^2 \left| k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{\gamma^2(\omega)} \right|^2} \left| \left\{ k_\varrho \cos \varphi, k_\varrho \sin \varphi, \frac{\omega}{v \gamma^2(\omega)} \right\} \right|^2 = \\ &= \frac{q^2}{v^2} \frac{1}{|\varepsilon(\omega)|^2 \left| k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{\gamma^2(\omega)} \right|^2} \left(k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{v^2 |\gamma^2(\omega)|^2} \right)\end{aligned}\quad (49)$$

Finalmente, sustituyendo (49) en (46), el poder de frenado de un ión individual resulta:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dz} &= -\frac{\varepsilon_0}{\pi(2\pi)^2} \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im}(\varepsilon_r(\omega)) \cdot \\ &\int_0^{2\pi} \int_0^{k_{\varrho, \max}} \frac{q^2}{v^2} \frac{1}{|\varepsilon(\omega)|^2 \left| k_{\varrho}^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{\gamma^2(\omega)} \right|^2} \left(k_{\varrho}^2 + \frac{\omega^2}{v^2 |\gamma^2(\omega)|^2} \right) k_{\varrho} dk_{\varrho} d\varphi = \\ &= -\frac{\varepsilon_0}{2\pi^2} \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im}(\varepsilon_r(\omega)) \int_0^{k_{\varrho, \max}} \frac{q^2}{v^2} \frac{1}{|\varepsilon(\omega)|^2 \left| k_{\varrho}^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{\gamma^2(\omega)} \right|^2} \left(k_{\varrho}^2 + \frac{\omega^2}{v^2 |\gamma^2(\omega)|^2} \right) k_{\varrho} dk_{\varrho} \end{aligned} \quad (50)$$

3.2.5. Límite de Bethe

En el límite de Bethe se estudian los iones con velocidades suficientemente bajas para que $\beta \ll 1$ y $\gamma(\omega) \rightarrow 1$, y frecuencias ω tales que $\varrho \gg \varrho_c = \frac{v}{\omega}$ y a lo sumo el ión interactúe con un átomo (el más cercano), de acuerdo con lo comentado para las funciones de Bessel (34) y (35). Por tanto, en este caso tenemos:

$$|\mathbf{E}(k_{\varrho}, \varphi, z, \omega)|^2 = \frac{q^2}{v^2} \frac{1}{|\varepsilon(\omega)|^2 \left| k_{\varrho}^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \right|^2} \left(k_{\varrho}^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \right) \quad (51)$$

Sustituyendo (51) en (46), tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dz} &= -\frac{\varepsilon_0}{\pi(2\pi)^2} \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im}(\varepsilon_r(\omega)) \int_0^{2\pi} \int_0^{k_{\varrho, \max}} \frac{q^2}{v^2} \frac{1}{|\varepsilon(\omega)|^2 \left| k_{\varrho}^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \right|^2} \left(k_{\varrho}^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \right) k_{\varrho} dk_{\varrho} d\varphi = \\ &= -\frac{1}{2\pi^2 \varepsilon_0} \frac{q^2}{v^2} \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im}(\varepsilon_r(\omega)) \int_0^{k_{\varrho, \max}} \frac{1}{|\varepsilon_r(\omega)|^2 \left(k_{\varrho}^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \right)} k_{\varrho} dk_{\varrho} = \\ &= \frac{1}{2\pi^2 \varepsilon_0} \frac{q^2}{v^2} \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon_r(\omega)} \right) \int_0^{k_{\varrho, \max}} \frac{1}{\left(k_{\varrho}^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \right)} k_{\varrho} dk_{\varrho} \end{aligned} \quad (52)$$

Para resolver la integral anterior, primero deducimos la expresión de $\text{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon_r(\omega)} \right)$. En términos generales, la función dieléctrica $\varepsilon_r(\omega)$ puede expresarse como:²¹

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \omega_p^2 \sum_j^Z \frac{f_j}{\omega^2 - \omega_j^2 + i\omega\nu_j} \quad (53)$$

donde ω_j es la frecuencia de ionización del nivel del electrón j , ω_p es la frecuencia de plasma y ν_j es la anchura de la línea espectral de absorción del átomo j .

El conjugado de (53) será entonces:

$$\varepsilon_r^*(\omega) = \left(1 - \omega_p^2 \sum_j \frac{f_j}{\omega^2 - \omega_j^2 + i\omega\nu_j} \right)^* = 1 - \sum_j f_j \omega_p^2 \frac{\omega^2 - \omega_j^2 + i\omega\nu_j}{(\omega^2 - \omega_j^2)^2 + \omega^2 \nu_j^2} \quad (54)$$

Tenemos también que $|\varepsilon_r(\omega)|^2 \simeq 1$ ya que en esta aproximación se consideran solo las frecuencias tan elevadas que interactúan solo con el átomo más cercano, y el resto de átomos no responden al campo. Por tanto, el inverso de la parte imaginaria de la ecuación anterior es:

$$\text{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon_r(\omega)} \right) = \text{Im} \left(\frac{\varepsilon_r^*(\omega)}{|\varepsilon_r(\omega)|^2} \right) \simeq \text{Im} (\varepsilon_r^*(\omega)) = - \sum_j f_j \omega_p^2 \frac{\omega \nu_j}{(\omega^2 - \omega_j^2)^2 + \omega^2 \nu_j^2} \quad (55)$$

que se denomina función de pérdida energética.

Para líneas espectrales suficientemente estrechas, la ecuación anterior vendrá dada por el límite $\omega \nu_j \rightarrow 0$, que se cumple en materia de estado sólido generalmente para condiciones de presión y temperaturas normales. Los sumandos de la ecuación (55) son del tipo función delta naciente, por lo que con el límite se obtendrá una función delta de Dirac:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} = \pi \delta(x) \quad (56)$$

Aplicado esto a la ecuación (55), obtenemos:

$$\text{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon_r(\omega)} \right) \simeq -\pi \sum_j f_j \omega_p^2 \delta(\omega^2 - \omega_j^2) = -\frac{\pi}{2} \sum_j f_j \frac{\omega_p^2}{\omega_j} \delta(\omega - \omega_j) \quad (57)$$

donde se ha empleado la propiedad de la función delta de Dirac $\delta(\omega^2 - \omega_j^2) = \delta(\omega - \omega_j)/2\omega_j$. Aplicando esto a la fórmula del poder de frenado (52), tenemos:

$$\frac{dE}{dz} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{q^2}{v^2} \int_0^\infty d\omega \omega \sum_j f_j \frac{\omega_p^2}{\omega_j} \delta(\omega - \omega_j) \int_0^{k_{\theta, \max}} \frac{1}{\left(k_{\theta}^2 + \frac{\omega^2}{v^2}\right)} k_{\theta} dk_{\theta} \quad (58)$$

La integral sobre dk_ρ queda:

$$\begin{aligned} \int_0^{k_{\rho, \max}} \frac{1}{k_\rho^2 + \frac{\omega^2}{v^2}} k_\rho dk_\rho &= \frac{1}{2} \log \left(\frac{k_\rho^2 v^2 + \omega^2}{v^2} \right) \Big|_0^{k_{\rho, \max}} = \\ &= \frac{1}{2} \log \left(\frac{k_{\max}^2 v^2 + \omega^2}{\omega^2} \right) \approx \frac{1}{2} \log \left(\frac{k_{\max}^2 v^2}{\omega^2} \right) = \log \left(\frac{k_{\max} v}{\omega} \right) \end{aligned} \quad (59)$$

donde se ha asumido $k_{\max}^2 v^2 \gg \omega^2$, ya que el intercambio de momento máximo $p_{\max} = \hbar k_{\max}$ entre el electrón y el ión es mucho mayor que el momento intercambiado por la ionización del electrón.

De esta manera, la fórmula del poder de frenado (58) queda:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dz} &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{v^2} \int_0^\infty d\omega \omega \sum_j^Z f_j \frac{\omega_p^2}{\omega_j} \delta(\omega - \omega_j) \log \left(\frac{k_{\max} v}{\omega} \right) = \\ &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{v^2} \sum_j^Z \int_0^\infty d\omega \omega f_j \frac{\omega_p^2}{\omega_j} \delta(\omega - \omega_j) \log \left(\frac{k_{\max} v}{\omega} \right) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{v^2} \omega_p^2 \sum_j^Z f_j \log \left(\frac{k_{\max} v}{\omega_j} \right) = \\ &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{v^2} \omega_p^2 \left[\log(k_{\max} v) \sum_j^Z f_j - \sum_j^Z f_j \log(\omega_j) \right] = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{v^2} \omega_p^2 [Z \log(k_{\max} v) - Z \log(\bar{\omega})] = \\ &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{v^2} \omega_p^2 Z \log \left(\frac{k_{\max} v}{\bar{\omega}} \right) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{v^2} \omega_p^2 Z \log \left(\frac{\hbar k_{\max} v}{\hbar \bar{\omega}} \right) = \\ &= -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{v^2} \omega_p^2 Z \log \left(\frac{2mv^2}{\hbar \bar{\omega}} \right) \end{aligned} \quad (60)$$

donde hemos definido $\bar{\omega}$ tal que $Z \log(\bar{\omega}) = \sum_j^Z f_j \log(\omega_j)$, y hemos reemplazado $\hbar k_{\max}$ por el momento máximo intercambiado entre el ión y el electrón atómico, cuyo cálculo se muestra en el Anexo B.

La fórmula (60) obtenida es la fórmula de Bethe-Bloch (1) mencionada al principio del trabajo, expresada ahora en el sistema internacional, con $\langle I \rangle = \hbar \bar{\omega}$, y para velocidades suficientemente bajas como para despreciar todos los términos salvo el primero.

3.3. Análisis del poder de frenado de un haz de iones

3.3.1. Campos electromagnéticos de un haz de iones en el dominio de frecuencias

Consideremos ahora un haz de iones de densidad de carga $\rho(\mathbf{r}, t)$. Podemos expresar el potencial creado por el haz con la primera de las ecuaciones (18):

$$\Phi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{\rho(\mathbf{k}, \omega)}{\varepsilon(\omega) \left(k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} \right)}$$

El campo eléctrico creado por el haz será entonces:

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = i\Phi(\mathbf{k}, \omega) \left(\frac{\varepsilon_r(\omega) \omega}{c^2} \mathbf{v} - \mathbf{k} \right) = i \frac{\rho(\mathbf{k}, \omega)}{\varepsilon(\omega) \left(k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} \right)} \left(\frac{\varepsilon_r(\omega) \omega}{c^2} \mathbf{v} - \mathbf{k} \right)$$

Para el caso de un haz que se mueve con velocidad de grupo v constante en el eje Z, y conserva su carga, la distribución de carga será:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho(x, y, z - vt) = \rho(x, y, \zeta) \quad (61)$$

Expresada en el dominio de frecuencias, la distribución de carga será:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{k}, \omega) &= \int d\mathbf{r} dt e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} + i\omega t} \rho(x, y, z - vt) = \int d\mathbf{r} dt e^{-i(k_x x + k_y y + k_z z) + i\omega t} \rho(x, y, z - vt) = \\ &= \int d\mathbf{r} dt e^{-i(k_x x + k_y y + k_z \zeta) - i k_z vt + i\omega t} \rho(x, y, \zeta) = 2\pi \delta(\omega - k_z v) \int d\mathbf{r} e^{-i(k_x x + k_y y + k_z \zeta)} \rho(x, y, \zeta) = \\ &= 2\pi \delta(\omega - k_z v) \rho(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (62)$$

donde $\zeta = z - vt$ y $\rho(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} e^{-i(k_x x + k_y y + k_z \zeta)} \rho(x, y, \zeta)$.

El campo eléctrico en el espacio recíproco es entonces:

$$\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = i \frac{2\pi \delta(\omega - k_z v) \rho(\mathbf{k})}{\varepsilon(\omega) \left(k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2} \right)} \left(\frac{\varepsilon_r(\omega) \omega}{c^2} \mathbf{v} - \mathbf{k} \right) \quad (63)$$

Y pasando la coordenada longitudinal al espacio real, se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}(k_\varrho, \varphi, z, \omega) &= \frac{1}{2\pi} \int dk_z e^{ik_z z} i \frac{2\pi \delta(\omega - k_z v) \rho(\mathbf{k})}{\varepsilon(\omega) \left(k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}\right)} \left(\frac{\varepsilon_r(\omega) \omega}{c^2} \mathbf{v} - \mathbf{k} \right) = \\
 &= i \frac{1}{v} \int dk_z e^{ik_z z} \frac{\delta(k_z - \frac{\omega}{v}) \rho(k_\varrho, \varphi, k_z)}{\varepsilon(\omega) \left(k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2}\right)} \left(\frac{\varepsilon_r(\omega) \omega}{c^2} \mathbf{v} - \mathbf{k} \right) = \\
 &= i \frac{1}{v} e^{i \frac{\omega}{v} z} \frac{\rho(k_\varrho, \varphi, \frac{\omega}{v})}{\varepsilon(\omega) \left(k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{\gamma^2(\omega) v^2}\right)} \left\{ -k_\varrho \cos \varphi, -k_\varrho \sin \varphi, \frac{\varepsilon_r(\omega) \omega}{c^2} v - \frac{\omega}{v} \right\}
 \end{aligned} \tag{64}$$

donde se ha empleado la propiedad de la función Delta de Dirac $\delta(\omega - k_z v) = \delta(k_z v - \omega) = \frac{1}{|v|} \delta(k_z - \frac{\omega}{v})$.

3.3.2. Deducción de la fórmula del poder de frenado de un haz de iones

El poder de frenado para un ión en este caso se calcula dividiendo el poder de frenado para todo el haz dividido entre el número de iones, N:

$$\frac{dE}{dz} = -\frac{1}{N} \frac{\varepsilon_0}{\pi(2\pi)^2} \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im}(\varepsilon_r(\omega)) \int_0^{2\pi} \int_0^\infty |\mathbf{E}(k_\varrho, \varphi, z, \omega)|^2 k_\varrho dk_\varrho d\varphi \tag{65}$$

En este caso el dominio de integración en k_ϱ es $[0, \infty]$ porque la expresión de la densidad de carga del campo eléctrico decae a 0 para altas k_ϱ y no hay problemas de divergencia. Partiendo de la ecuación (64), el módulo del campo eléctrico será:

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{E}(k_\varrho, \varphi, z, \omega)|^2 &= \left| i \frac{1}{v} e^{i \frac{\omega}{v} z} \frac{\rho(k_\varrho, \varphi, \frac{\omega}{v})}{\varepsilon(\omega) \left(k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{\gamma^2(\omega) v^2}\right)} \left\{ -k_\varrho \cos \varphi, -k_\varrho \sin \varphi, \frac{\varepsilon_r(\omega) \omega}{c^2} v - \frac{\omega}{v} \right\} \right|^2 = \\
 &= \frac{1}{v^2} \frac{|\rho(k_\varrho, \varphi, \frac{\omega}{v})|^2}{|\varepsilon(\omega)|^2 \left| k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{\gamma^2(\omega) v^2} \right|^2} \left(k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{|\gamma(\omega)|^2} \right)
 \end{aligned} \tag{66}$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación (65), obtenemos:

$$\begin{aligned}
 \frac{dE}{dz} &= -\frac{1}{N} \frac{\varepsilon_0}{\pi(2\pi)^2} \int_0^\infty d\omega \omega \text{Im}(\varepsilon_r(\omega)) \cdot \\
 &\quad \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \frac{1}{v^2} \frac{|\rho(k_\varrho, \varphi, \frac{\omega}{v})|^2}{|\varepsilon(\omega)|^2 \left| k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{\gamma^2(\omega) v^2} \right|^2} \left(k_\varrho^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{|\gamma(\omega)|^2} \right) k_\varrho dk_\varrho d\varphi
 \end{aligned} \tag{67}$$

Integrando la anterior ecuación sobre φ y simplificando términos, se obtiene la ecuación general del poder de frenado por ión para un haz de iones:

$$\frac{dE}{dz} = \frac{1}{N} \frac{1}{\varepsilon_0 2\pi^2 v^2} \int_0^\infty d\omega \omega \operatorname{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon_r(\omega)} \right) \int_0^\infty \frac{|\rho(k_\perp, \frac{\omega}{v})|^2}{\left| k_\perp^2 + \frac{\omega^2}{\gamma^2(\omega) v^2} \right|^2} \left(k_\perp^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{|\gamma(\omega)|^2} \right) k_\perp dk_\perp \quad (68)$$

donde el módulo de la distribución no depende de la variable φ del espacio recíproco.

3.3.3. Distribución de carga en el espacio de frecuencias

En esta sección se va a hallar de forma genérica la expresión de $\rho(k_\perp, \frac{\omega}{v})$ para haces de iones muy estrechos longitudinalmente, y se va a discutir la fórmula obtenida.

Mediante una interpretación cuántica, podemos definir la densidad de iones en el espacio real como sigue:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum |\Psi_i(\mathbf{r})|^2 \simeq \sum \delta(z - z_i) \rho(\mathbf{r}_\perp) \quad (69)$$

donde suponemos un haz de iones suficientemente estrecho como para que la componente longitudinal de la función de onda se pueda aproximar a una función Delta de Dirac.

La expresión anterior en el espacio recíproco será:

$$\rho(\mathbf{k}) = \int \rho(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3r = \int \rho(\mathbf{r}_\perp, z) e^{-i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} e^{-ik_z z} d^2r_\perp dz \quad (70)$$

Teniendo en cuenta (69), la anterior ecuación queda:

$$\rho(\mathbf{k}) = \sum \rho_\perp(\mathbf{k}_\perp) e^{-ik_z z_i} = \rho_\perp(\mathbf{k}_\perp) \quad (71)$$

Y el módulo resulta:

$$|\rho(\mathbf{k})|^2 = |\rho_\perp(\mathbf{k})|^2 F_i(\varrho) \cdot F_j^*(\varrho) = |\rho_\perp(\mathbf{k})|^2 [N + (N-1)N|\rho_z(k_z)|^2] \quad (72)$$

con $F_i(\varrho) = \sum e^{-ik_z z_i}$. El primer término corresponde a los términos diagonales de la multiplicación de sumatorios, mientras que el segundo son los no diagonales.

Por tanto, finalmente tenemos:

$$\left| \rho \left(k_{\varrho}, \frac{\omega}{v} \right) \right|^2 = |\rho_{\perp}(\mathbf{k})|^2 N \left[1 + (N-1) \rho_z \left(\frac{\omega}{v} \right) \right] \quad (73)$$

Si aproximamos la distribución en el eje z a una gaussiana

$$\left| \rho \left(k_{\varrho}, \frac{\omega}{v} \right) \right|^2 = |\rho_{\perp}(\mathbf{k})|^2 N \left[1 + (N-1) e^{-k_z^2 \sigma_z^2} \right] = |\rho_{\perp}(\mathbf{k})|^2 N \left[1 + (N-1) e^{-\frac{\omega^2 \sigma_z^2}{v^2}} \right] \quad (74)$$

y teniendo en cuenta las ecuaciones (33), (34), (35) y (74), podemos encontrar cuatro regiones para los posibles valores de ω con comportamientos diferentes del poder de frenado. Sea a el radio atómico, v la velocidad del ión y σ_z una medida estadística de la longitud del haz, entonces:

ω	Región
$\gg \frac{v}{a}$	El campo se anula para distancias del orden del radio atómico y como mucho interacciona con el átomo más cercano: $\varepsilon_r \rightarrow 1$
$\ll \frac{v}{a}$	El campo llega suficientemente lejos como para interactuar con varios átomos del material, lo que produce una respuesta colectiva del material al campo aplicado: $\varepsilon_r \neq 1$
$\ll \frac{v}{\sigma_z}$	Absorción coherente: El haz es lo suficientemente pequeño como para que la absorción de energía de un ión esté influenciada por la presencia del resto de iones del haz. $\rho \propto N$. Normalmente $\sigma_z \gg a$, lo que implica que en esta región también haya interacción con varios átomos del material.
$\gg \frac{v}{\sigma_z}$	Absorción incoherente: La absorción de energía de un ión no está influenciado por la presencia de los demás protones. $\rho \propto \sqrt{N}$

Con la reducción del tamaño de los haces de iones generados mediante interacción láser-plasma, el valor de σ_z ha disminuido y la absorción coherente ha ido manifestándose a frecuencias cada vez mayores. Esta es la contribución que queremos estudiar en el presente trabajo, por lo que nos limitaremos a estudiar rangos de frecuencias donde aparezca este tipo de absorción energética.

Como se puede ver en la ecuación (74), en la absorción incoherente el valor de la exponencial es muy pequeño y se puede despreciar, y entonces la expresión se puede aproximar por:

$$\left| \rho \left(k_{\varrho}, \frac{\omega}{v} \right) \right|^2 \simeq |\rho_{\perp}(\mathbf{k})|^2 N \quad (75)$$

Por lo que el poder de frenado de la ecuación (68) es:

$$\frac{dE}{dz} \propto \frac{1}{N} \cdot \left| \rho \left(k_{\varrho}, \frac{\omega}{v} \right) \right|^2 = \frac{N}{N} |\rho_{\perp}(\mathbf{k})|^2 = |\rho_{\perp}(\mathbf{k})|^2 \quad (76)$$

Y se comprueba que el poder de frenado (de cada ión) para la absorción incoherente no depende del número de iones del haz, ya que estos están demasiado separados y no interactúan constructivamente en el campo con el que interaccionan con el material.

Sin embargo, en la absorción coherente el término exponencial de la distribución no se anula, y normalmente el número de iones en el haz es elevado, por lo que se puede realizar la aproximación:

$$\left| \rho \left(k_{\varrho}, \frac{\omega}{v} \right) \right|^2 \simeq |\rho_{\perp}(\mathbf{k})|^2 N^2 e^{-\frac{\omega^2 \sigma_z^2}{v^2}} \quad (77)$$

Por lo que el poder de frenado resulta:

$$\frac{dE}{dz} \propto \frac{1}{N} \cdot \left| \rho \left(k_{\varrho}, \frac{\omega}{v} \right) \right|^2 = \frac{N^2}{N} |\rho_{\perp}(\mathbf{k})|^2 = N |\rho_{\perp}(\mathbf{k})|^2 \quad (78)$$

Como se puede ver, en la absorción coherente el poder de frenado es directamente proporcional al número de iones del haz. Esto quiere decir que, aunque a priori las pérdidas energéticas incoherentes sean mayores, ya que abarcan frecuencias mayores donde se encuentran los picos de absorción por ionización del material (que son la principal pérdida energética incoherente), eventualmente el número de iones del haz puede ser tan grande como para que la contribución coherente sea del mismo orden, y haya que tenerla en cuenta.

4. Simulaciones

En esta sección se muestran las soluciones obtenidas tras la resolución numérica de la fórmula de Bethe-Bloch para altas frecuencias (para bajas frecuencias las pérdidas dadas por dicha ecuación son despreciables), añadiendo la contribución de pérdidas coherentes para bajas frecuencias deducida anteriormente (68).

Ambas ecuaciones se han resuelto para un haz de protones y un haz de partículas alfa, en ambos casos con una distribución gaussiana tanto longitudinal como transversal, y circulando a través de agua.

La densidad de carga del haz es en este caso:

$$\rho(x, y, z) = Nq \frac{e^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \frac{e^{-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma_y^2}} \frac{e^{-\frac{(z-vt)^2}{2\sigma_z^2}}}{\sqrt{2\pi\sigma_z^2}} \quad (79)$$

Si el número de iones es elevado, se podrá realizar la misma aproximación vista en la ecuación (77), y la densidad en el espacio recíproco será entonces:

$$\rho(\mathbf{k}) = Nq e^{-\frac{\sigma_x^2 k_x^2}{2}} e^{-\frac{\sigma_y^2 k_y^2}{2}} e^{-\frac{\sigma_z^2 k_z^2}{2}} = Nq e^{-\frac{\sigma_\rho^2 k_\rho^2}{2}} e^{-\frac{\sigma_z^2 k_z^2}{2}} \quad (80)$$

donde $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_\rho$.

Por tanto, el valor de $|\rho(k_\rho, \frac{\omega}{v})|^2$ es:

$$\left| \rho\left(k_\rho, \frac{\omega}{v}\right) \right|^2 = N^2 q^2 e^{-\sigma_\rho^2 k_\rho^2} e^{-\frac{\sigma_z^2 \omega^2}{v^2}} \quad (81)$$

y sustituyendo en la ecuación (68), el poder de frenado queda:

$$\frac{dE}{dz} = \frac{Nq^2}{\varepsilon_0 2\pi^2 v^2} \int_0^\infty d\omega \omega e^{-\frac{\sigma_z^2 \omega^2}{v^2}} \text{Im} \left(\frac{1}{\varepsilon_r(\omega)} \right) \int_0^\infty \frac{e^{-\sigma_\rho^2 k_\rho^2}}{\left| k_\rho^2 + \frac{\omega^2}{\gamma^2(\omega)v^2} \right|^2} \left(k_\rho^2 + \frac{\omega^2}{v^2} \frac{1}{|\gamma(\omega)|^2} \right) k_\rho dk_\rho \quad (82)$$

Finalmente, para poder calcular numéricamente la ecuación anterior se ha empleado una tabla de datos experimentales con los valores de la parte real e imaginaria de la permitividad relativa, $\varepsilon_r(\omega)$, en función de la frecuencia para el intervalo de frecuencias donde se da la absorción coherente. Esta tabla se ha obtenido a partir de los valores experimentales del índice

de refracción en función de la frecuencia:

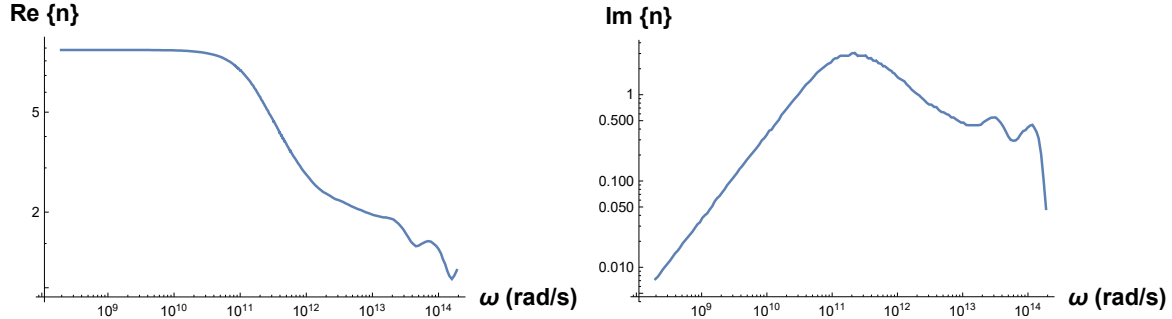


Figura 5: Parte real e imaginaria del índice de refracción del agua en función de la frecuencia.

A los cuales se han aplicado las fórmulas que relacionan el índice de refracción con la permitividad:

$$Re\{\varepsilon_r\} = Re\{n\}^2 - Im\{n\}^2 \quad (83)$$

$$Im\{\varepsilon_r\} = 2 \cdot Re\{n\} \cdot Im\{n\} \quad (84)$$

A partir del poder de frenado, se han obtenido diferentes datos relativos al comportamiento del haz en el material, como el poder de frenado en función de la distancia recorrida y de la velocidad de los iones, la profundidad máxima de penetración o la energía cinética de los iones en función de la distancia recorrida.

La resolución numérica de (82) ha devuelto una tabla con los valores del poder de frenado respecto a la velocidad de cada ión, desde la velocidad inicial hasta una velocidad próxima a cero. Aplicando la relación:

$$\frac{dE}{dz} = \frac{d}{dz} [mc^2(\gamma - 1)] = ma\gamma^3 \quad (85)$$

con $a = dv/dt$. Por tanto:

$$z = \int v \cdot dt = \int \frac{v}{a} dv = \int \frac{m\gamma^3 v}{m\gamma^3 a} dv = \int \frac{m\gamma^3 v}{dE/dz} dv \quad (86)$$

Con esta ecuación, se ha podido relacionar v con z y hallar el poder de frenado en función de la profundidad de penetración. El valor de z correspondiente a la velocidad más baja ha

sido tomado como la profundidad máxima de penetración. Para obtener la energía en función de z , simplemente hemos integrado numéricamente $\int dE/dz dz$, donde dz ha sido tomado como la diferencia entre dos valores consecutivos de z .

Estas simulaciones se han realizado para diferentes valores de la carga del haz, Q , y del radio y longitud estadísticamente significativas, σ_ρ y T (esta última expresada en unidades de tiempo, donde $T = \sigma_z/v_0$), para observar la influencia de cada uno de estos parámetros en los resultados.

El intervalo de valores estudiado para estos parámetros ha sido el que se encuentra en haces ultracortos de iones o se espera encontrar para las próximas generaciones de láseres:

- $E \in [10, 100]$ MeV
- $Q \in [300, 900]$ pC
- $T \in [30, 90]$ fs
- $\sigma_\rho \in [30, 90]$ μm

Para estos valores, el intervalo de frecuencias donde se da la absorción coherente es $\omega/2\pi < 5,3 THz \rightarrow \lambda > 56 \mu\text{m}$. En este trabajo se ha estudiado el rango $\omega/2\pi \in [30 MHz, 30 THz]$. Como se puede ver en la Figura 6,²² el intervalo de frecuencias está por debajo de las pérdidas por ionización en el agua, por lo que las pérdidas por ionización, que suponen la mayor parte de las pérdidas de energía, serán incoherentes.

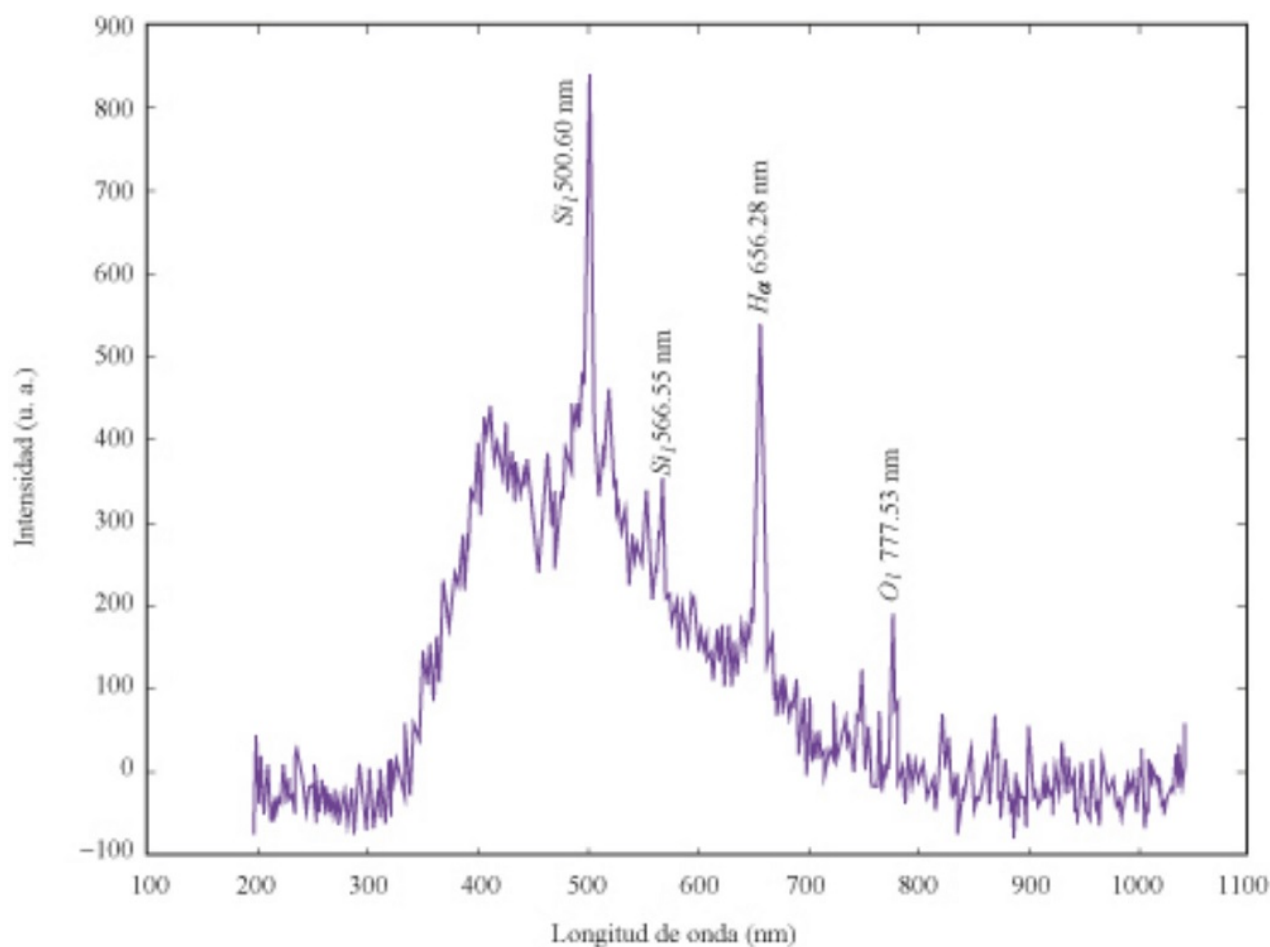


Figura 6: Espectro obtenido de una muestra de agua destilada en un recipiente de vidrio.

Los resultados se representan gráficamente a continuación, así como los datos experimentales obtenidos del *National Institute of Standards and Technology*²³ (NIST) para el poder de frenado y la profundidad de penetración de protones y partículas alfa en agua.

Estos datos experimentales corresponden a pérdidas incoherentes, por lo que están en concordancia con la teoría de Bethe-Bloch. La diferencia entre los datos experimentales y los obtenidos mediante las simulaciones mostrarán la influencia de las pérdidas coherentes en el poder de frenado total del haz.

4.1. Análisis del poder de frenado de un haz de protones en agua

4.1.1. Dependencia del poder de frenado con la carga del haz

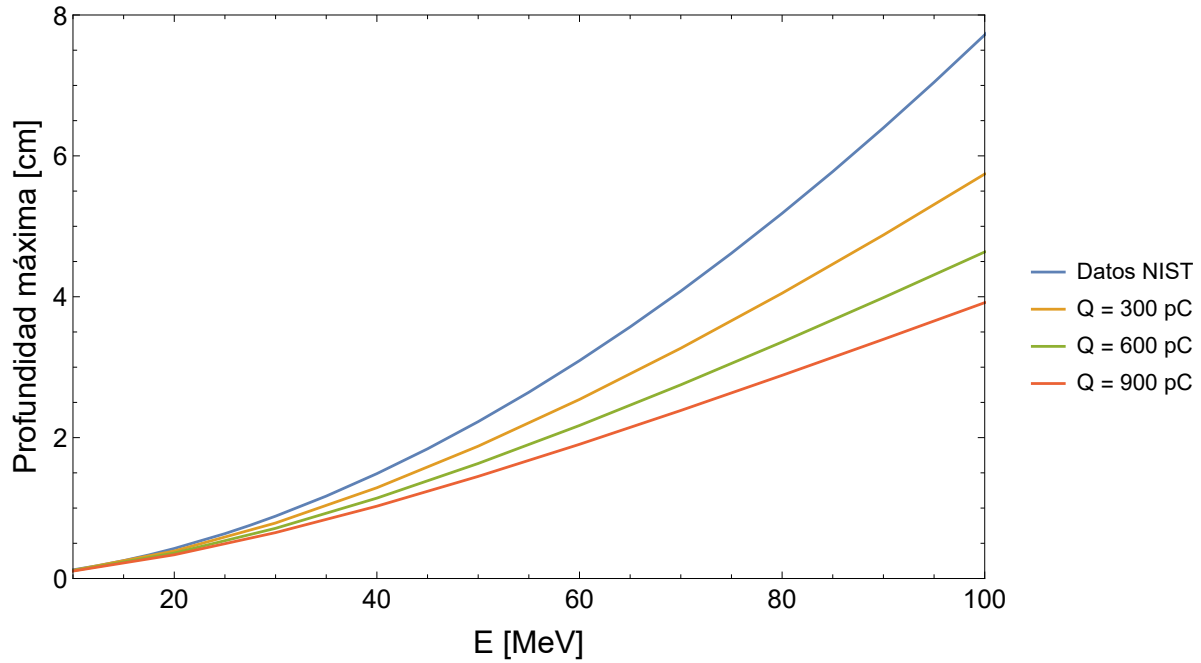


Figura 7: Profundidad de penetración de los protones en función de su energía cinética inicial, para distintos valores de carga eléctrica del haz, con $T_{ini} = 30$ fs, $\sigma_r = 30$ μ m.

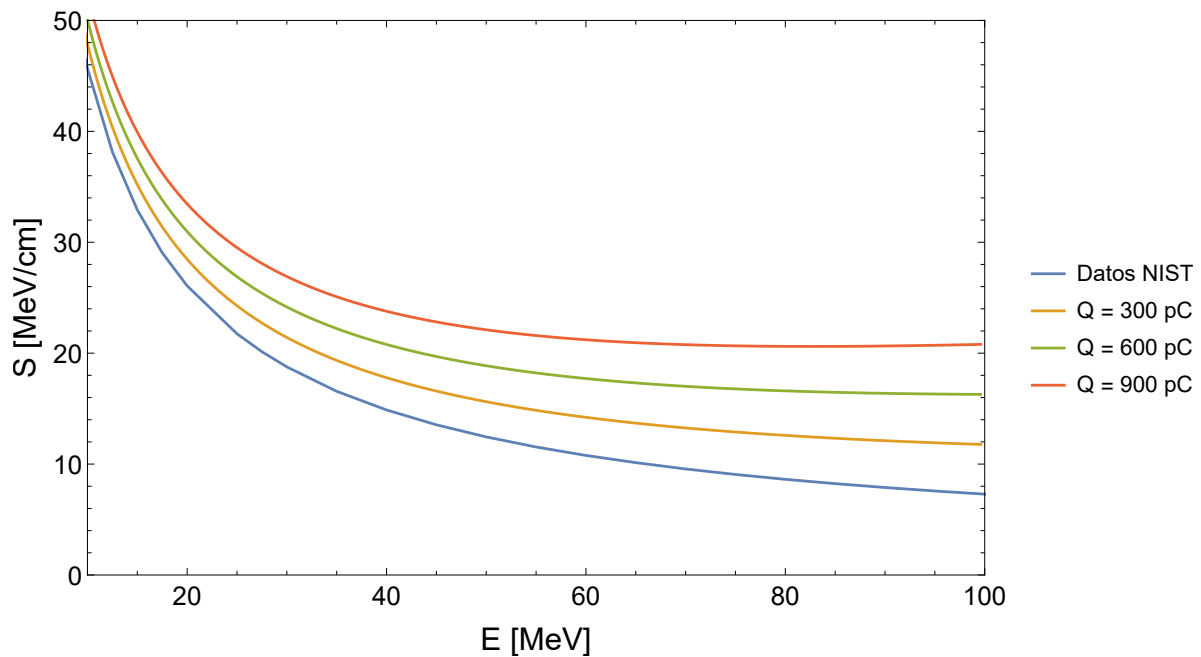


Figura 8: Poder de frenado de los protones en función de su energía cinética, para distintos valores de carga eléctrica del haz, con $T_{ini} = 30$ fs, $\sigma_r = 30$ μ m.

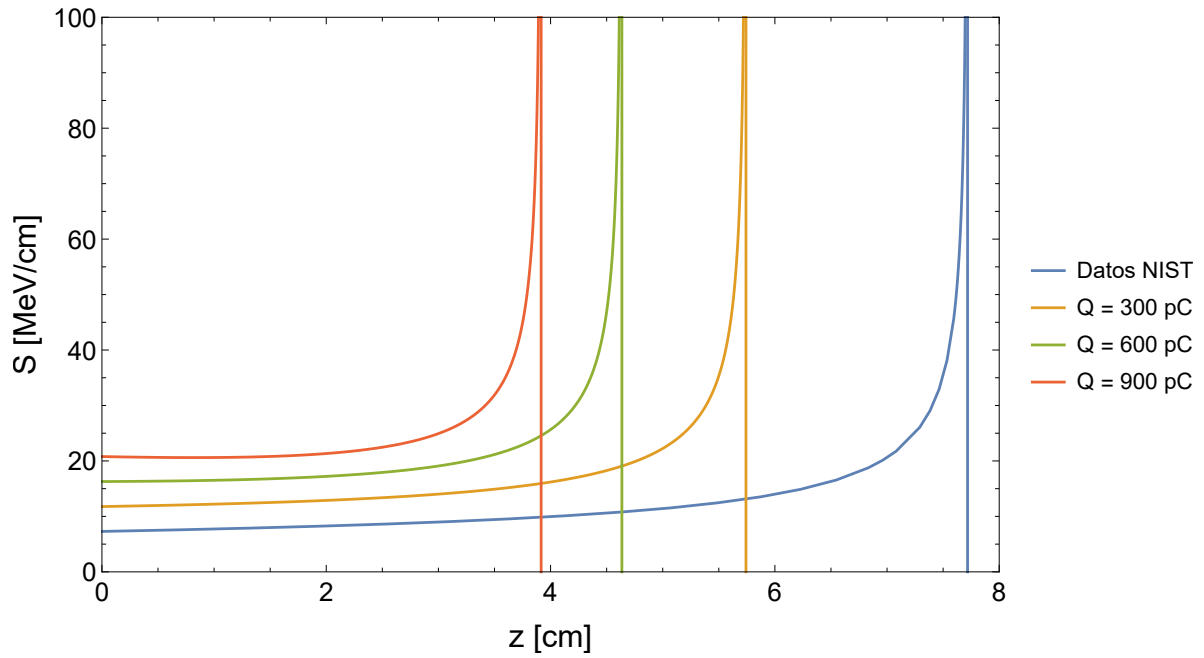


Figura 9: Poder de frenado de los protones en función de la distancia recorrida, para distintos valores de carga eléctrica del haz, con $T_{ini} = 30$ fs, $\sigma_r = 30$ μ m.

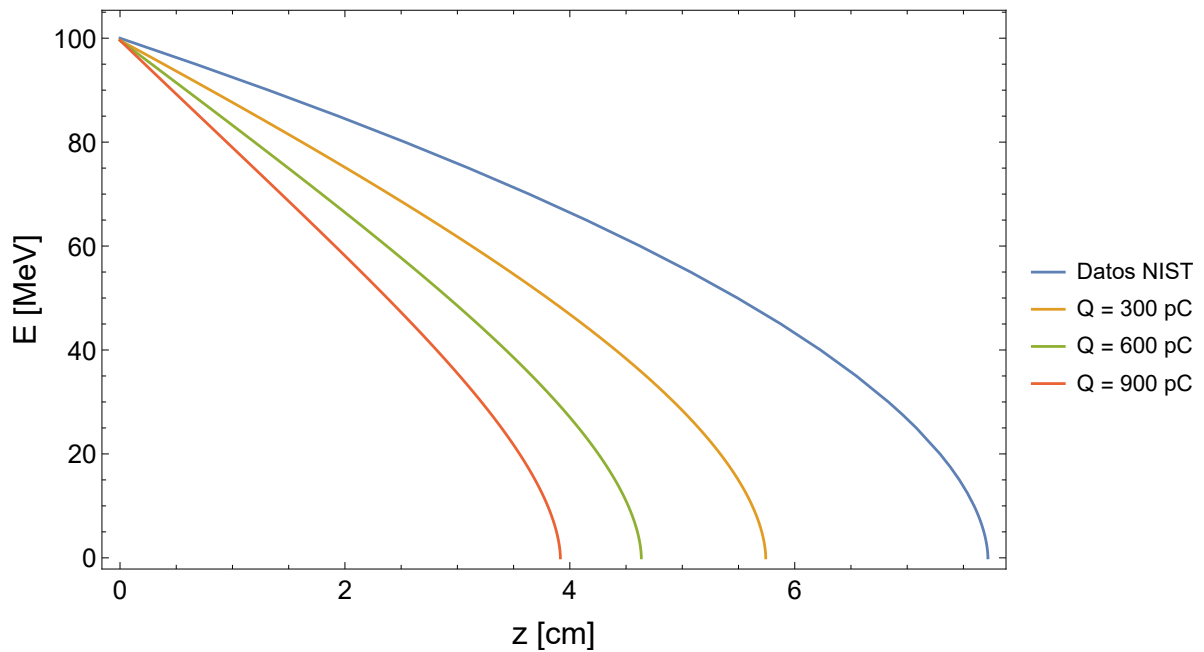


Figura 10: Energía cinética de los protones en función de la distancia recorrida, para distintos valores de carga eléctrica del haz, con $T_{ini} = 30$ fs, $\sigma_r = 30$ μ m.

4.1.2. Dependencia del poder de frenado con la longitud del haz

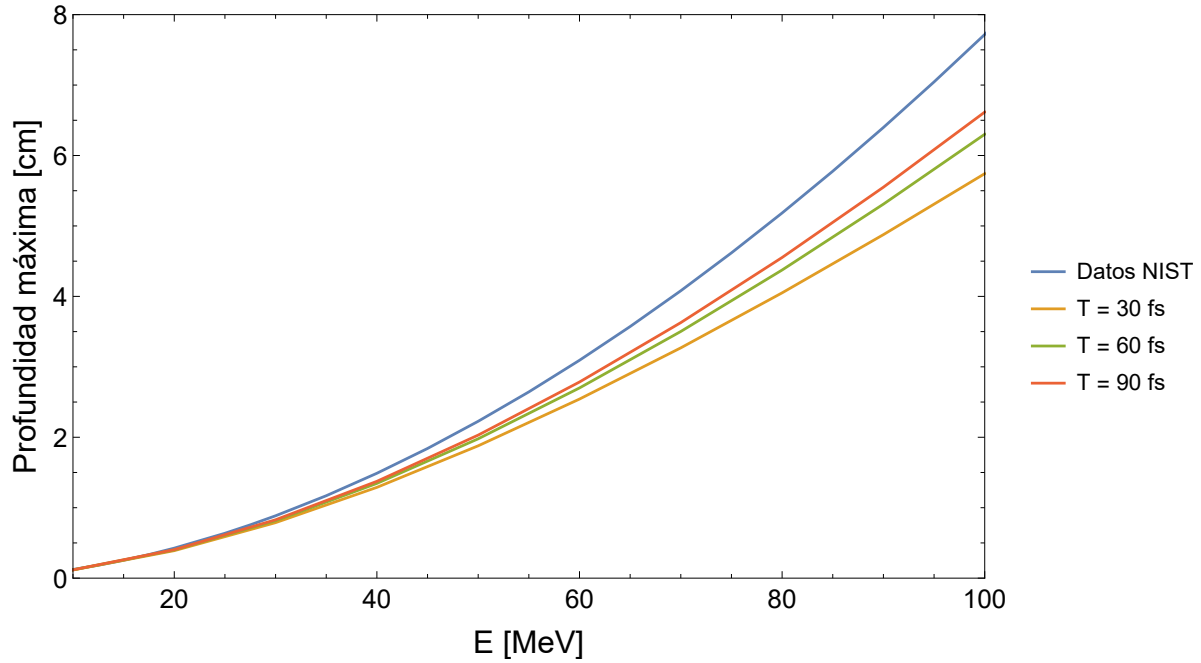


Figura 11: Profundidad de penetración de los protones en función de su energía cinética inicial, para distintas longitudes del haz (en fs), con $Q = 300 \text{ pC}$, $\sigma_r = 30 \text{ }\mu\text{m}$.

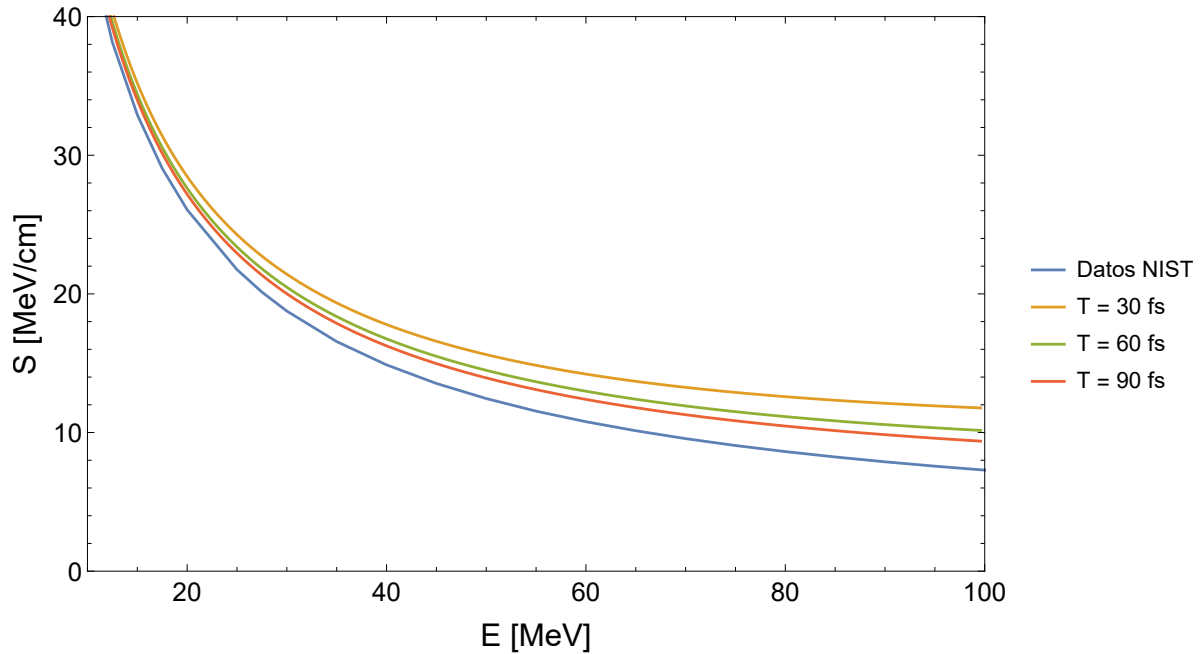


Figura 12: Poder de frenado de los protones en función de su energía cinética, para distintas longitudes del haz (en fs), con $Q = 300 \text{ pC}$, $\sigma_r = 30 \text{ }\mu\text{m}$.

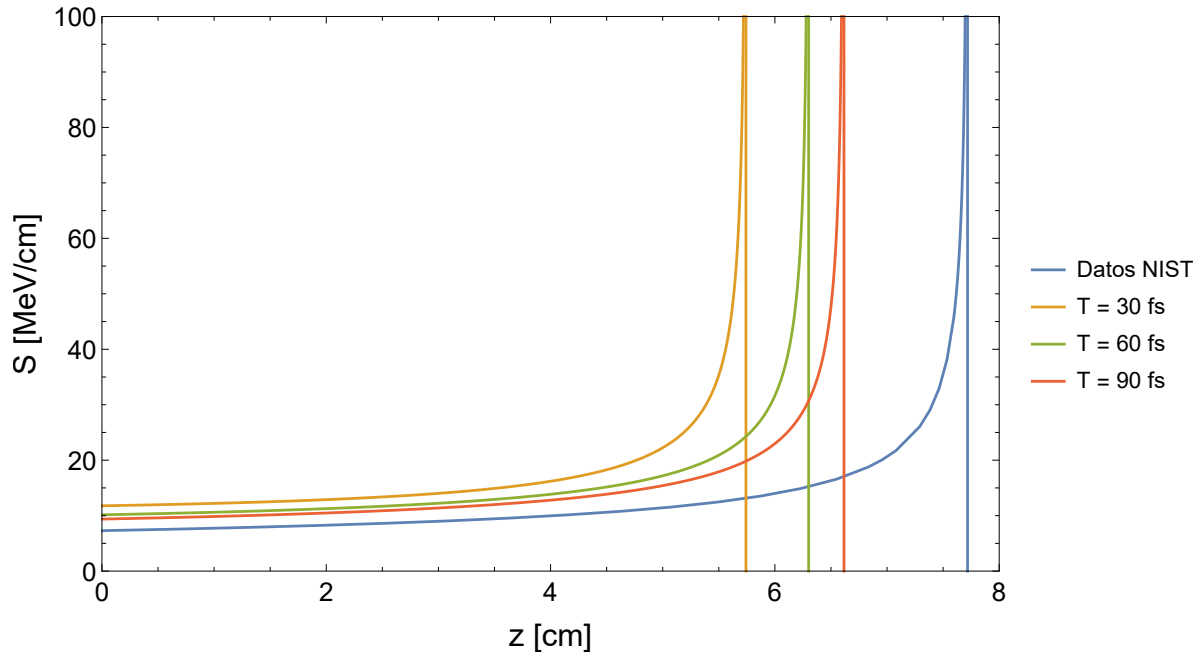


Figura 13: Poder de frenado de los protones en función de la distancia recorrida, para distintas longitudes del haz (en fs), con $Q = 300 \text{ pC}$, $\sigma_r = 30 \mu\text{m}$.

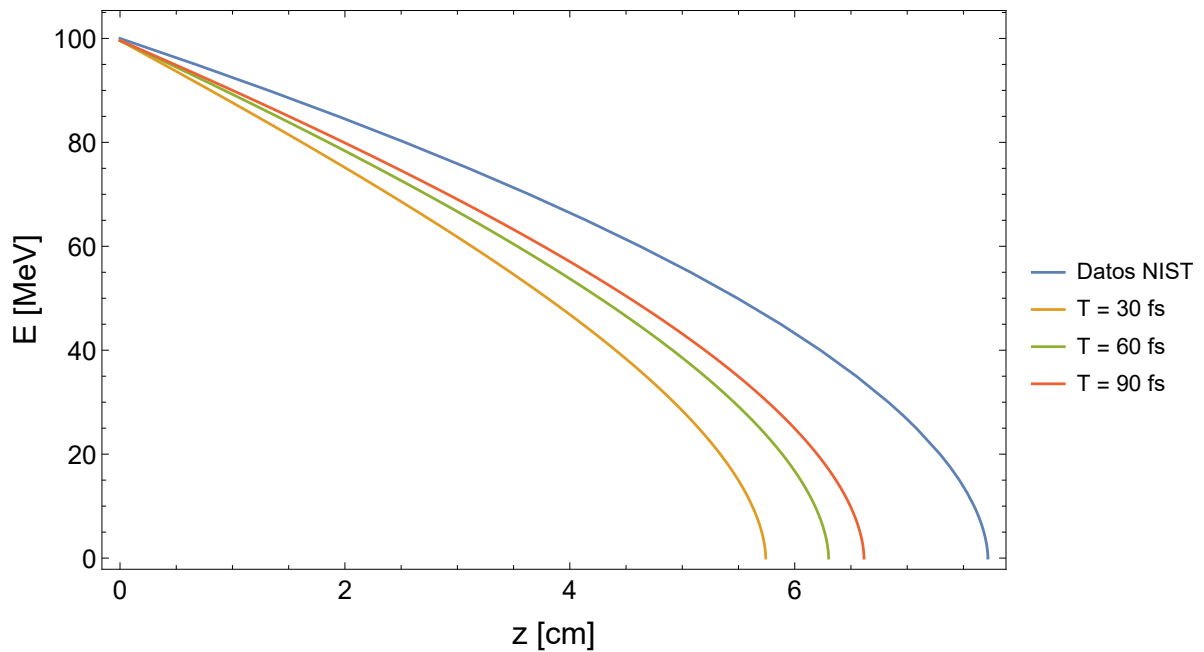


Figura 14: Energía cinética de los protones en función de la distancia recorrida, para distintas longitudes del haz (en fs), con $Q = 300 \text{ pC}$, $\sigma_r = 30 \mu\text{m}$.

4.1.3. Dependencia del poder de frenado con la sección transversal del haz

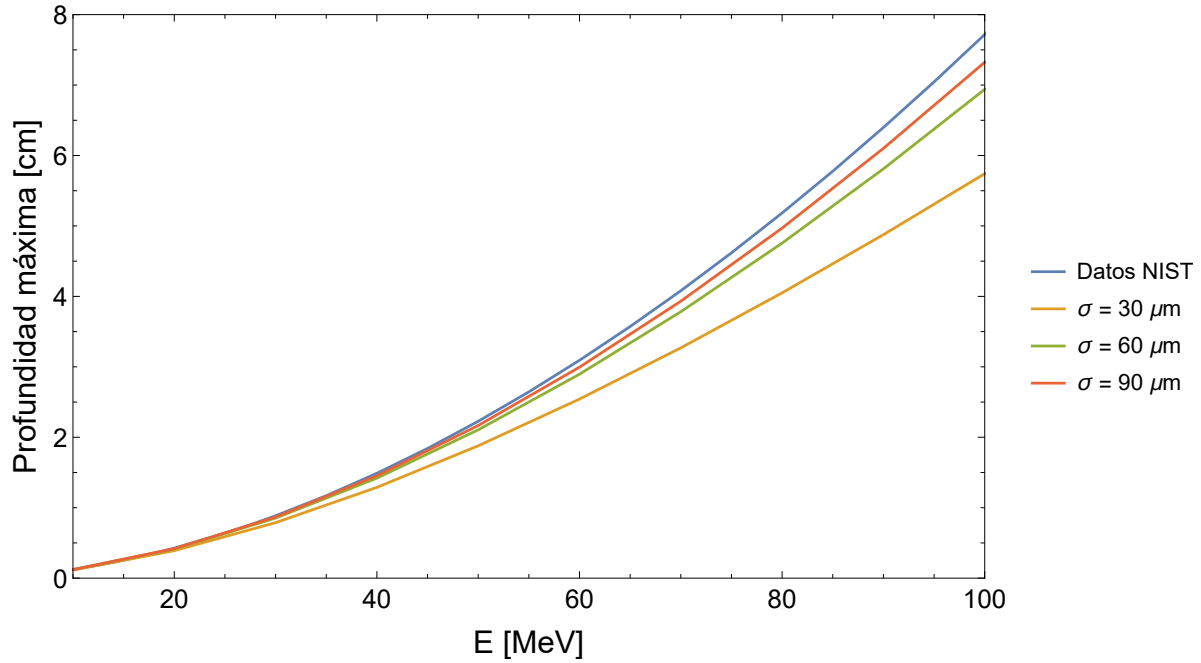


Figura 15: Profundidad de penetración de los protones en función de su energía cinética inicial, para distintos radios de la sección transversal del haz, con $Q = 300 pC$, $T_{ini} = 30 fs$.

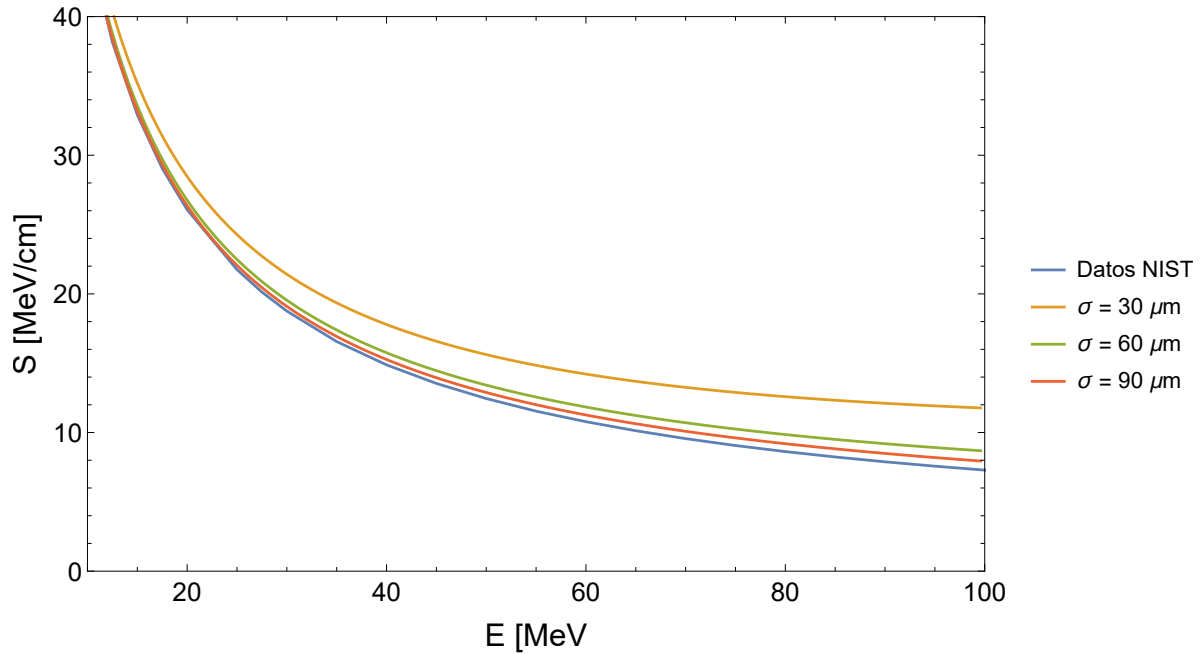


Figura 16: Poder de frenado de los protones en función de su energía cinética, para distintos radios de la sección transversal del haz, con $Q = 300 pC$, $T_{ini} = 30 fs$.

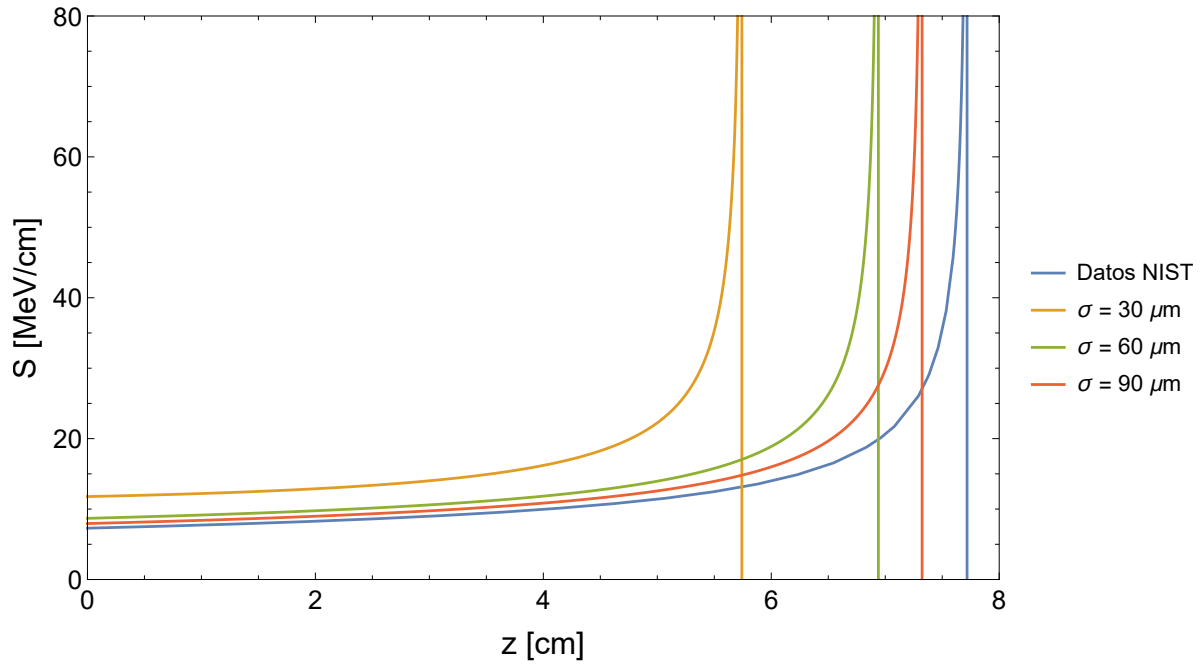


Figura 17: Poder de frenado de los protones en función de la distancia recorrida, para distintos radios de la sección transversal del haz, con $Q = 300 \text{ pC}$, $T_{ini} = 30 \text{ fs}$.

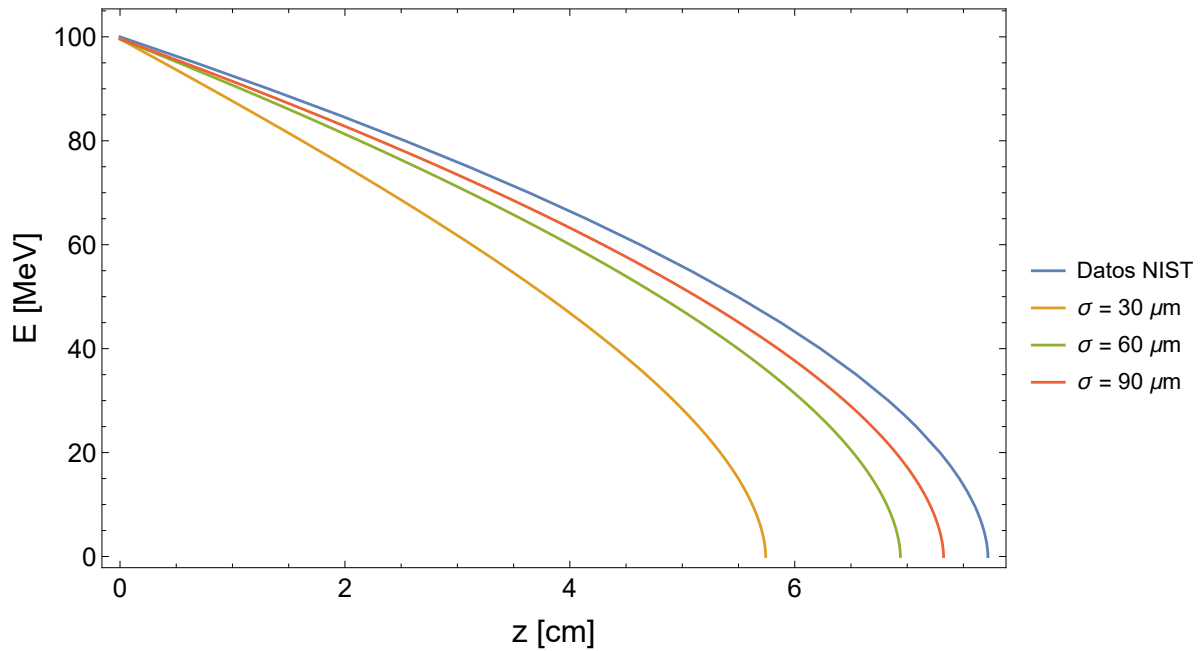


Figura 18: Energía cinética de los protones en función de la distancia recorrida, para distintos radios de la sección transversal del haz, con $Q = 300 \text{ pC}$, $T_{ini} = 30 \text{ fs}$.

4.2. Análisis del poder de frenado de un haz de partículas alfa en agua

4.2.1. Dependencia del poder de frenado con la carga del haz

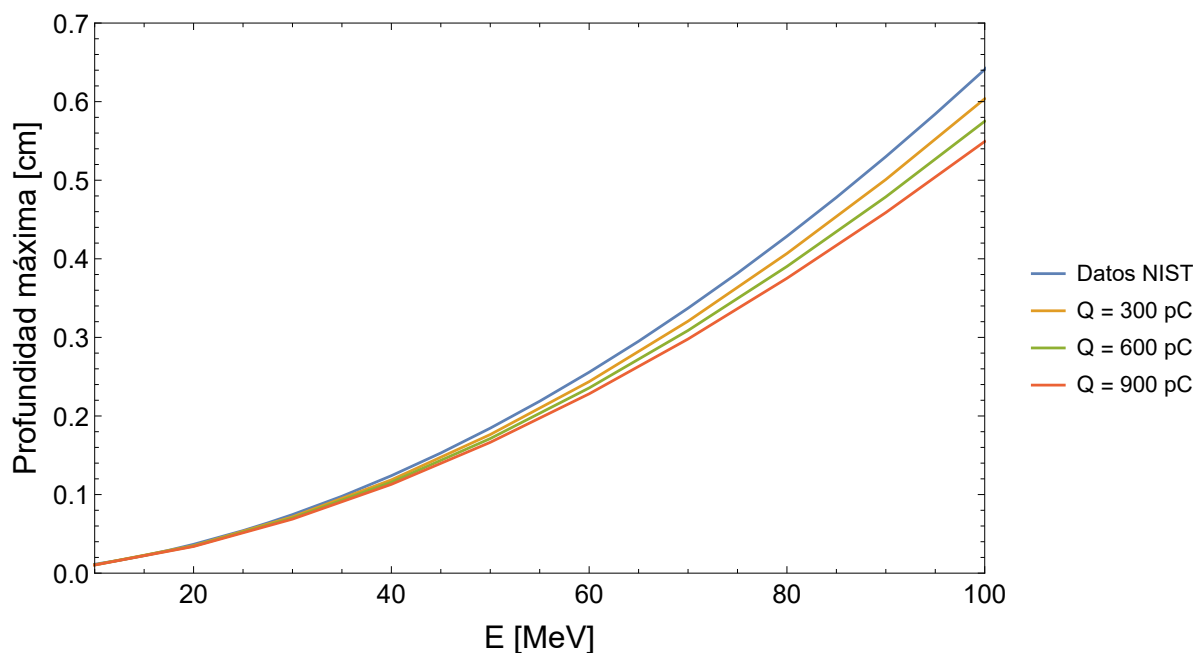


Figura 19: Profundidad de penetración de las partículas alfa en función de su energía cinética inicial, para distintos valores de carga eléctrica del haz, con $T_{ini} = 30 \text{ fs}$, $\sigma_r = 30 \mu\text{m}$.

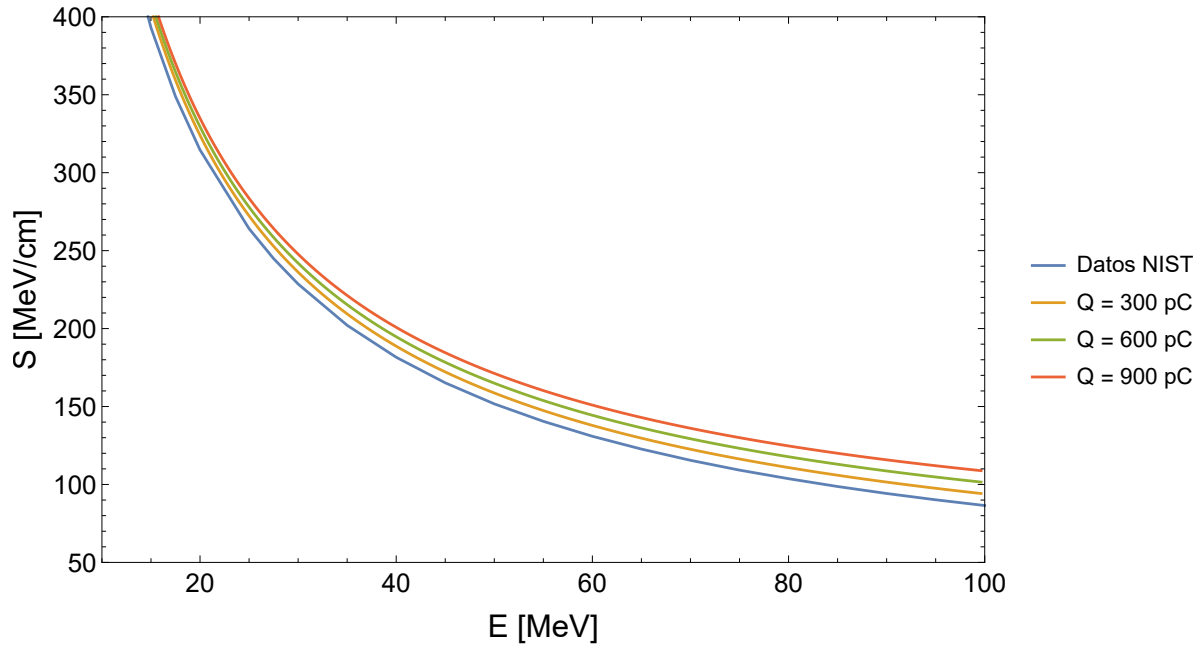


Figura 20: Poder de frenado de las partículas alfa en función de su energía cinética, para distintos valores de carga eléctrica del haz, con $T_{ini} = 30 \text{ fs}$, $\sigma_r = 30 \mu\text{m}$.

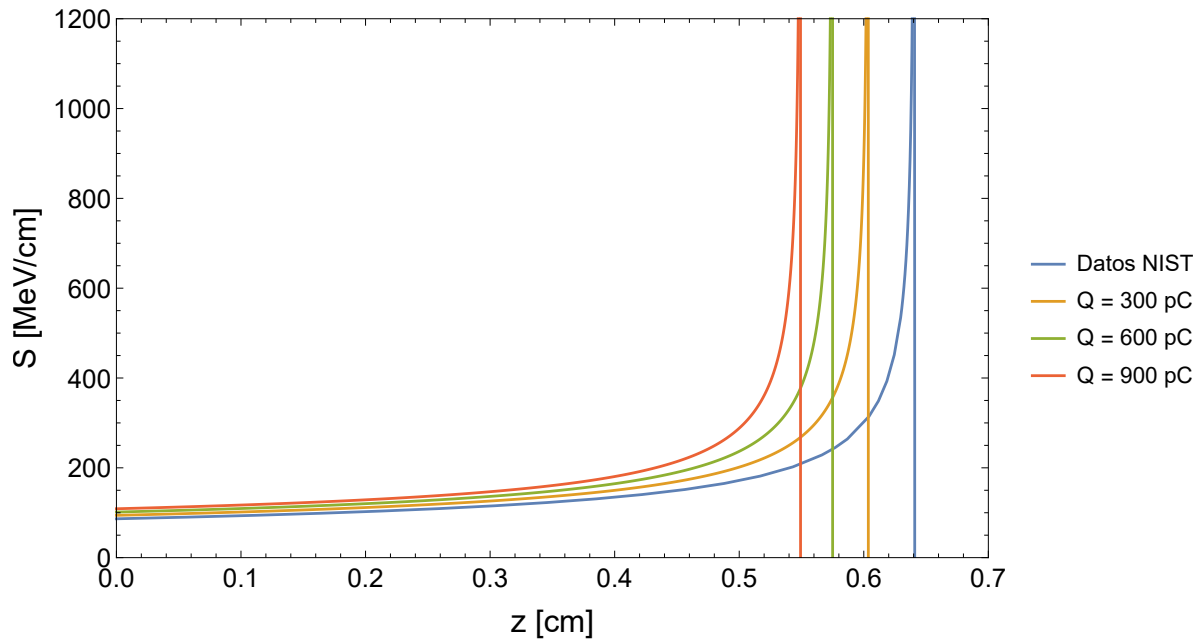


Figura 21: Poder de frenado de las partículas alfa en función de la distancia recorrida, para distintos valores de carga eléctrica del haz, con $T_{ini} = 30 \text{ fs}$, $\sigma_r = 30 \mu\text{m}$.

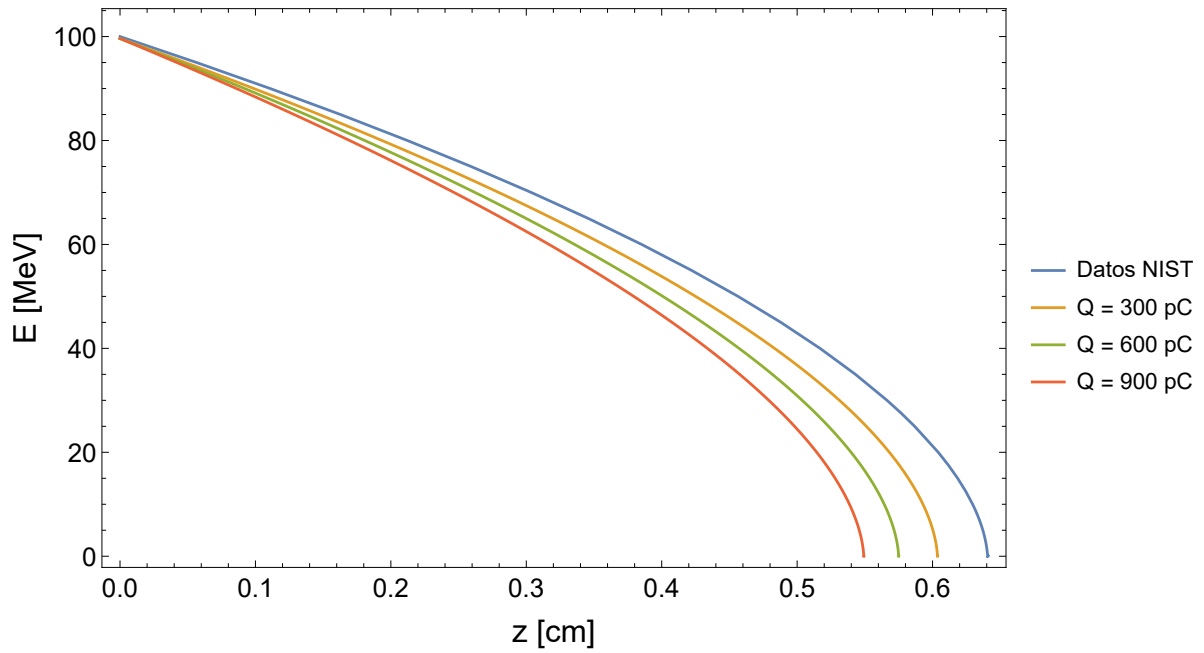


Figura 22: Energía cinética de las partículas alfa en función de la distancia recorrida, para distintos valores de carga eléctrica del haz, con $T_{ini} = 30 \text{ fs}$, $\sigma_r = 30 \mu\text{m}$.

4.2.2. Dependencia del poder de frenado con la longitud del haz

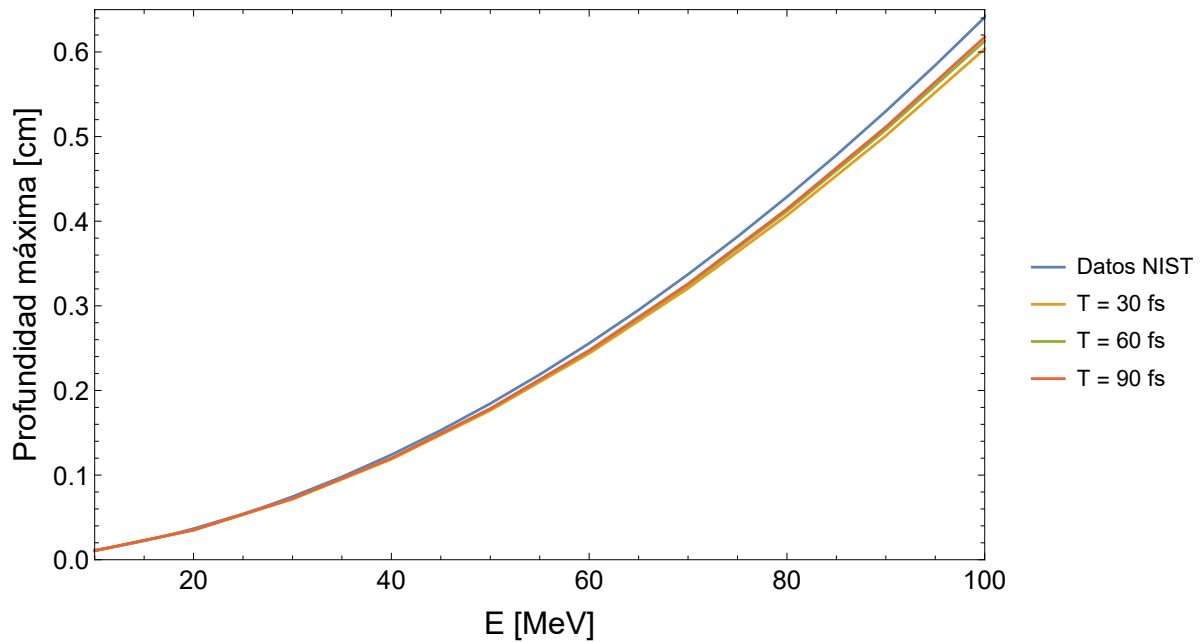


Figura 23: Profundidad de penetración de las partículas alfa en función de su energía cinética inicial, para distintas longitudes del haz (en fs), con $Q = 300 \text{ pC}$, $\sigma_r = 30 \mu\text{m}$.

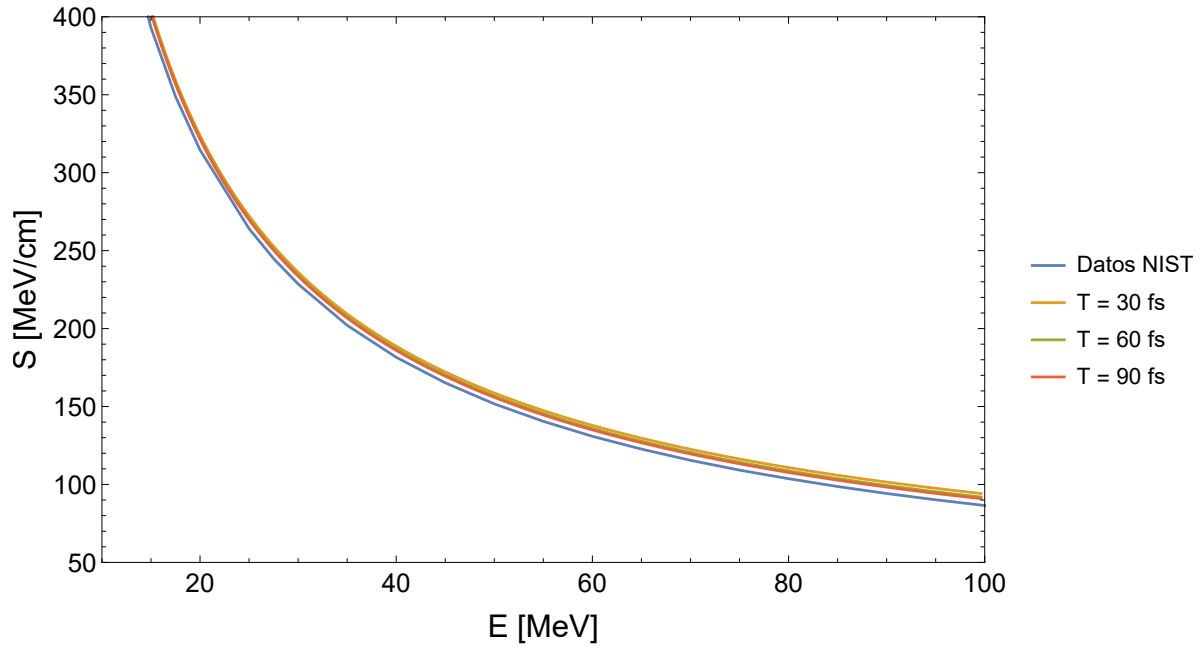


Figura 24: Poder de frenado de las partículas alfa en función de su energía cinética, para distintas longitudes del haz (en fs), con $Q = 300 \text{ pC}$, $\sigma_r = 30 \mu\text{m}$.

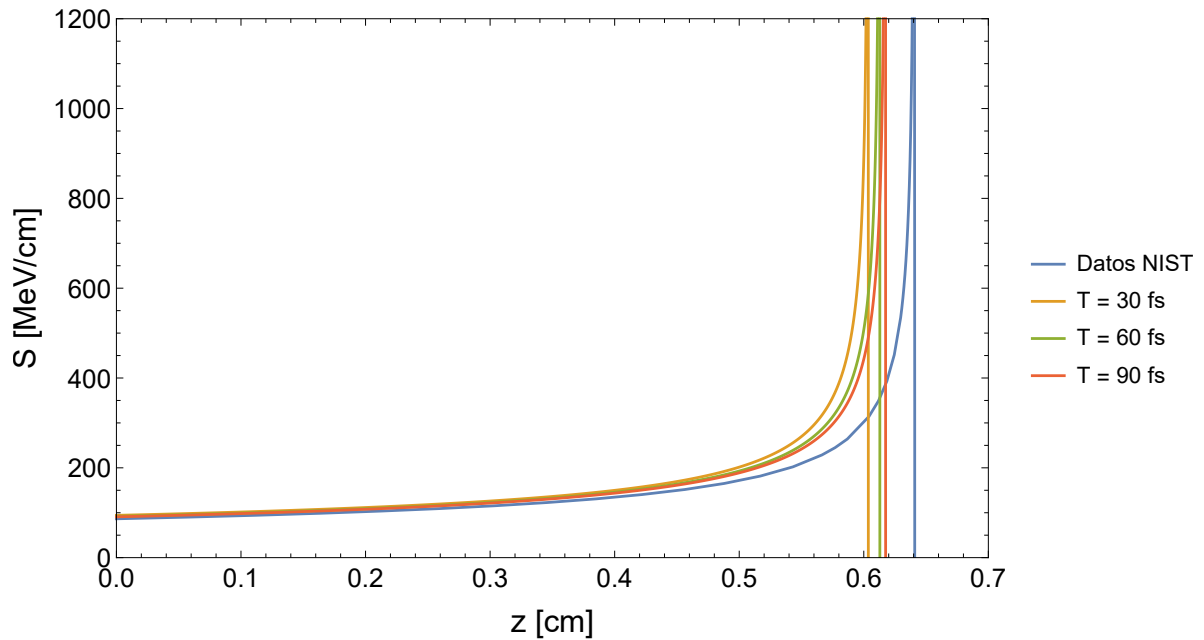


Figura 25: Poder de frenado de las partículas alfa en función de la distancia recorrida, para distintas longitudes del haz (en fs), con $Q = 300 \text{ pC}$, $\sigma_r = 30 \mu\text{m}$.

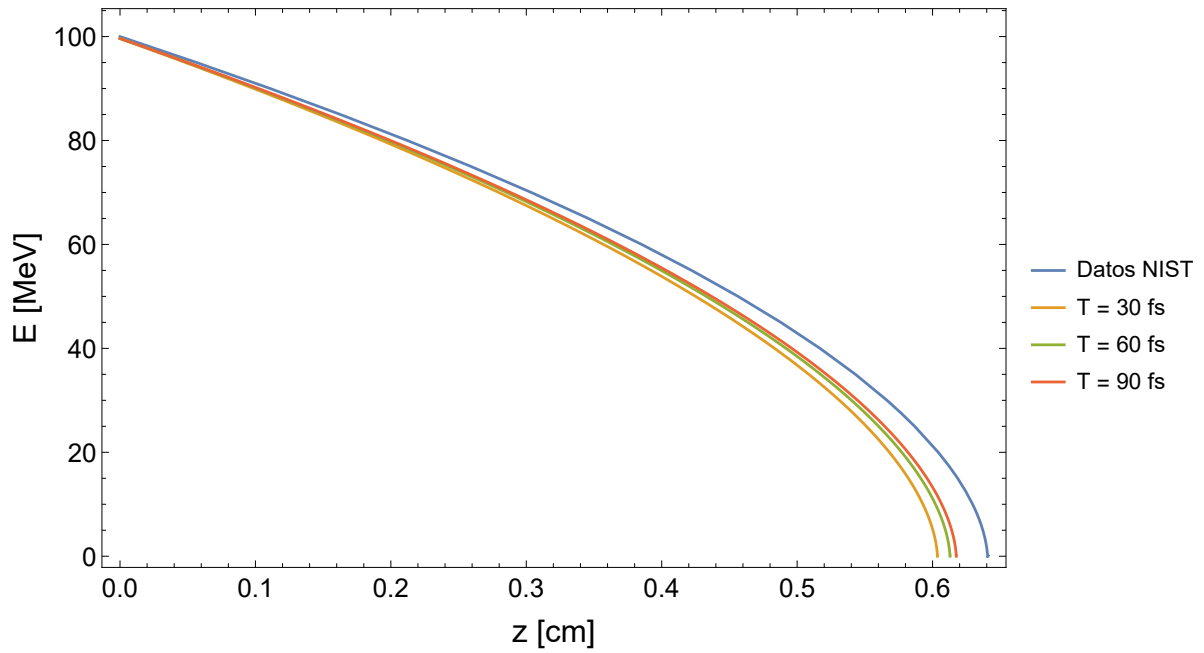


Figura 26: Energía cinética de las partículas alfa en función de la distancia recorrida, para distintas longitudes del haz (en fs), con $Q = 300 \text{ pC}$, $\sigma_r = 30 \text{ }\mu\text{m}$.

4.2.3. Dependencia del poder de frenado con la sección transversal del haz

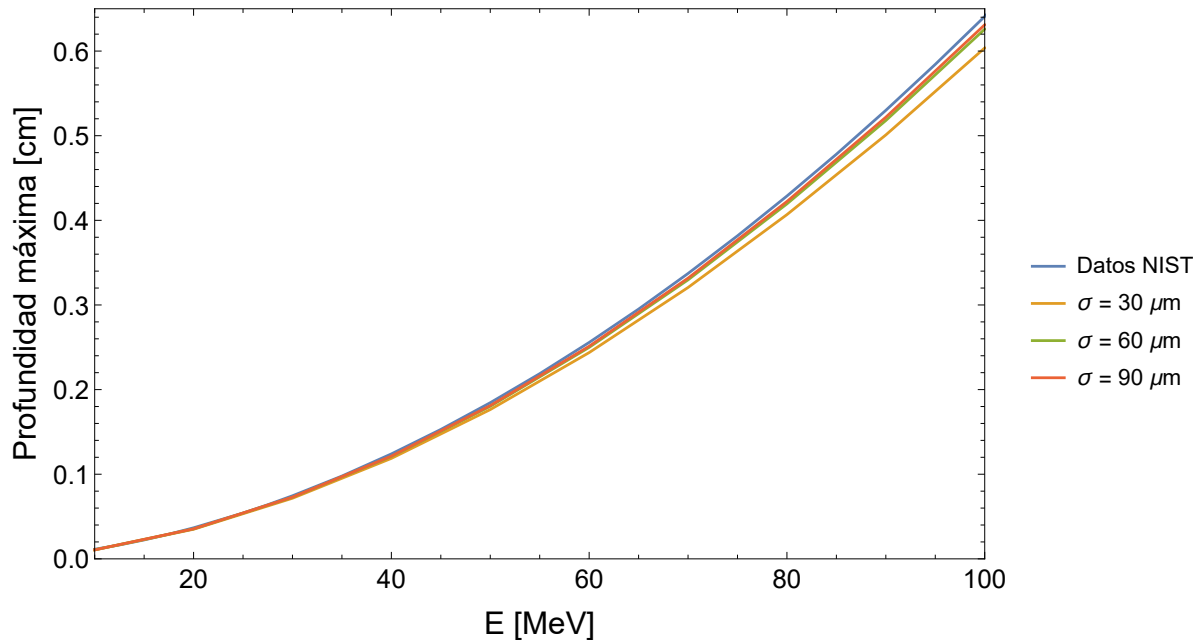


Figura 27: Profundidad de penetración de las partículas alfa en función de su energía cinética inicial, para distintos radios de la sección transversal del haz, con $Q = 300 \text{ pC}$, $T_{ini} = 30 \text{ fs}$.

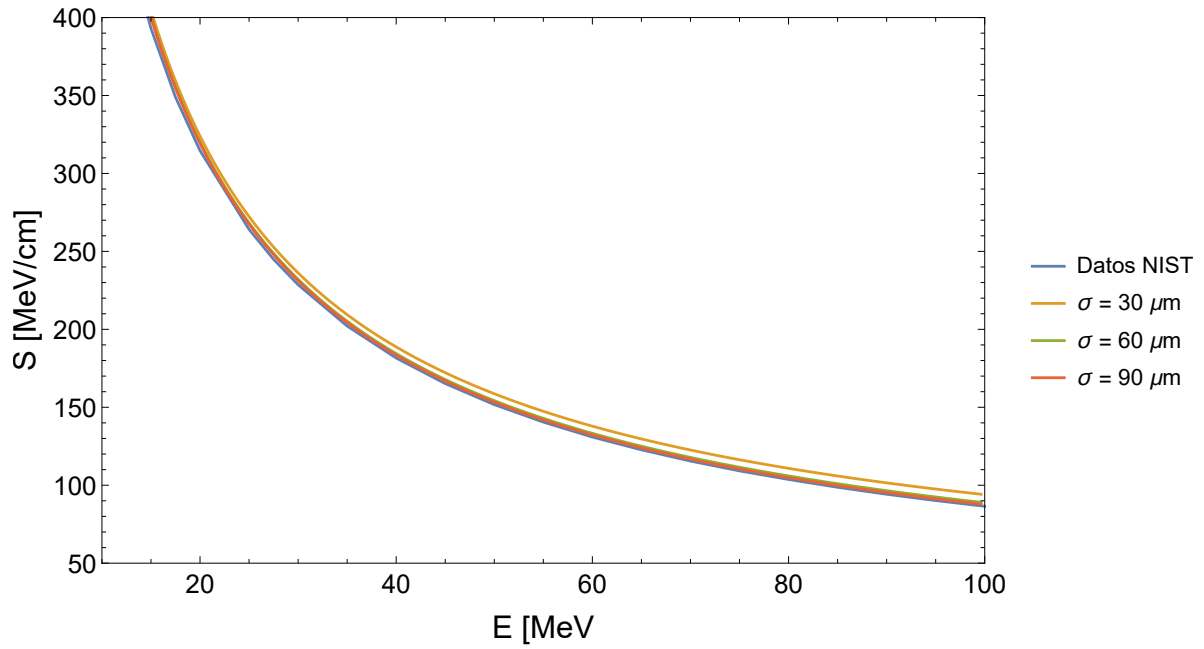


Figura 28: Poder de frenado de las partículas alfa en función de su energía cinética, para distintos radios de la sección transversal del haz, con $Q = 300 \text{ pC}$, $T_{ini} = 30 \text{ fs}$.

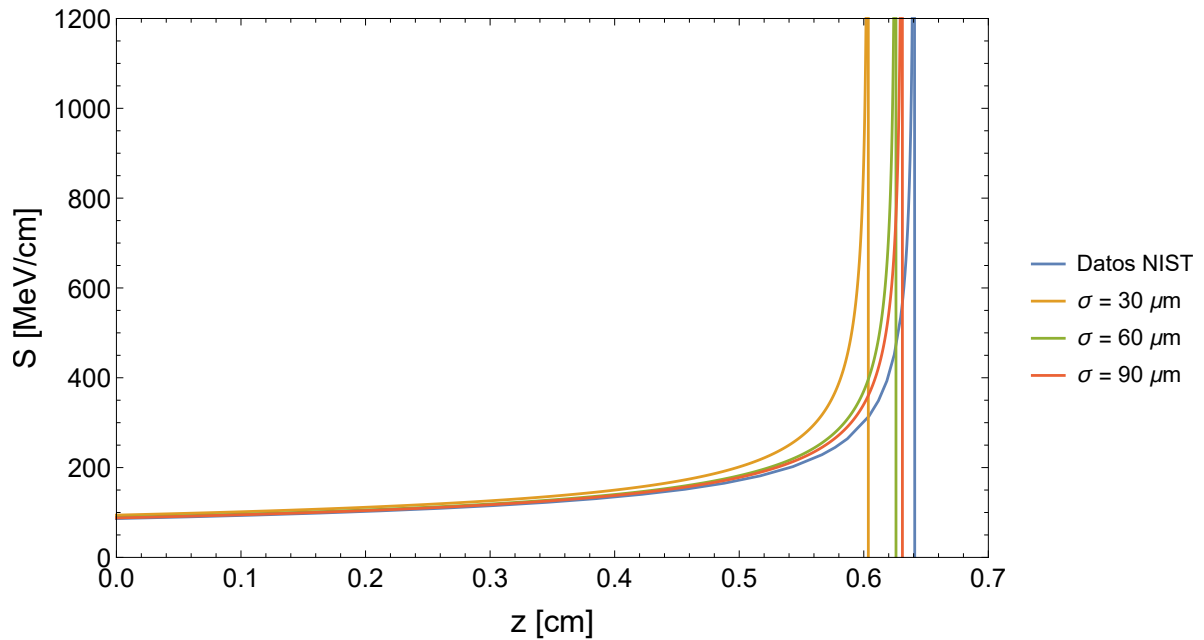


Figura 29: Poder de frenado de las partículas alfa en función de la distancia recorrida, para distintos radios de la sección transversal del haz, con $Q = 300 \text{ pC}$, $T_{ini} = 30 \text{ fs}$.

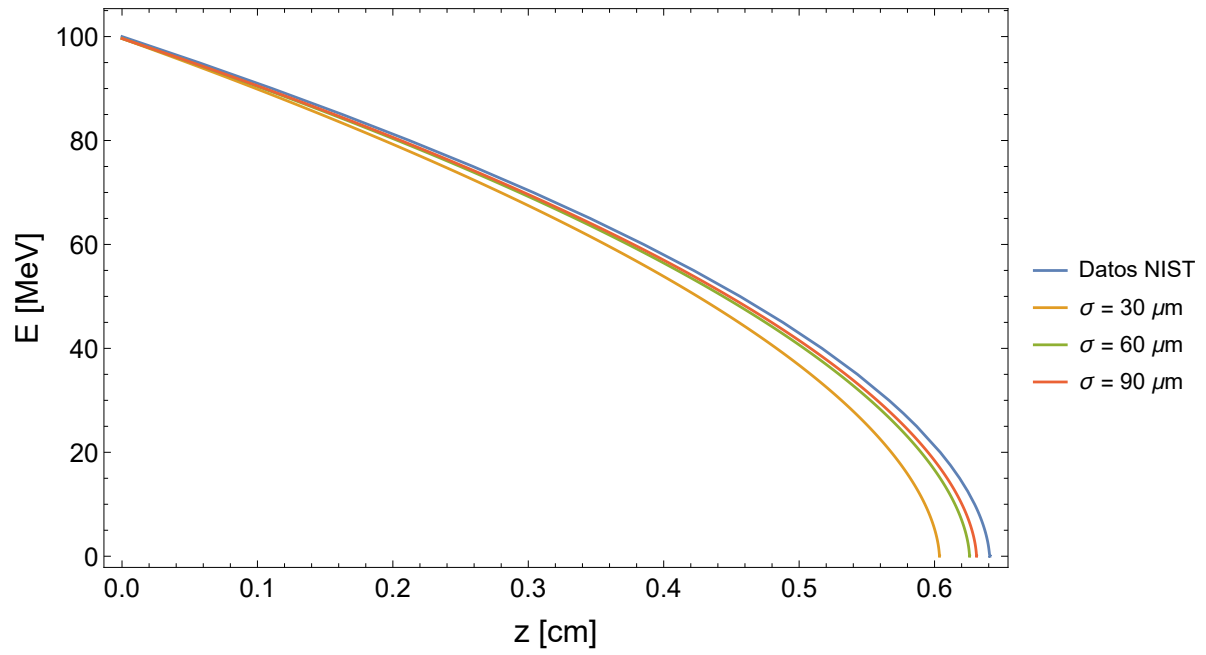


Figura 30: Energía cinética de las partículas alfa en función de la distancia recorrida, para distintos radios de la sección transversal del haz, con $Q = 300 \text{ pC}$, $T_{ini} = 30 \text{ fs}$.

5. Resultados y discusión

Como se puede ver en las gráficas anteriores, tanto para haces de protones como de partículas alfa observamos que una reducción de las dimensiones longitudinal y transversal contribuye a aumentar la absorción coherente del poder de frenado, ya que difieren más del comportamiento experimental dado por los datos del NIST. También observamos como un aumento de la carga total del haz provoca un aumento de la absorción coherente, ya que implica un aumento de la carga implica un aumento de partículas, y como hemos visto en la ecuación (78), el poder de frenado coherente es proporcional al número de partículas.

Otro comportamiento observado en ambos haces es que la discrepancia entre las simulaciones y los datos experimentales aumentan cuanto mayor es la energía cinética del haz, por lo que para bajas energías la contribución coherente es despreciable. Para altas energías, la contribución coherente es notable, llegando incluso a reducir a la mitad la profundidad de penetración, tal como se ve en la siguiente tabla, que muestra la máxima disminución relativa (correspondiente a 100 MeV), ε_r (%), de la profundidad de penetración con respecto a la absorción netamente incoherente para cada uno de los parámetros estudiados.

	PROTONES		PARTÍCULAS ALFA	
	Profundidad máx. (cm)	ε_r (%)	Profundidad máx. (cm)	ε_r (%)
Q = 30 pC	5.742	25.60	0.604	5.81
Q = 60 pC	4.636	39.93	0.575	10.28
Q = 90 pC	3.916	49.26	0.549	14.30
T = 30 fs	5.742	25.60	0.604	5.81
T = 60 fs	6.301	18.36	0.613	4.36
T = 90 fs	6.616	14.28	0.618	3.64
$\sigma_\ell = 30 \mu\text{m}$	5.742	25.60	0.604	5.81
$\sigma_\ell = 60 \mu\text{m}$	6.940	10.08	0.626	2.34
$\sigma_\ell = 90 \mu\text{m}$	7.324	5.11	0.631	1.54
NIST	7.718		0.6409	

En el caso de las partículas alfa, el poder de frenado ha sido notablemente mayor (en torno a un orden de magnitud mayor) y la distancia de penetración bastante menor que en el haz de protones, ya que las pérdidas incoherentes para las partículas alfa son mayores. Debido a esto, en el caso de las partículas alfa la variación de los parámetros Q , T y σ_ℓ no han modificado mucho la tendencia vista en las gráficas: al ser las pérdidas incoherentes mucho mayores, las variaciones en las pérdidas coherentes son menos apreciables.

6. Conclusiones

En el presente trabajo se ha deducido la ecuación del poder de frenado para un haz de iones mediante la teoría clásica del electromagnetismo, a partir de las ecuaciones de Maxwell en medios materiales. Se ha demostrado que existen dos regiones bien diferenciadas en las componentes frecuenciales del campo eléctrico: para la región de frecuencias más bajas, el campo eléctrico del haz actúa colectivamente (absorción coherente) y el poder de frenado asociado depende del número de partículas que componen el haz, mientras que para frecuencias más altas, cada ión del haz actúa individualmente sobre el material y no hay efecto colectivo (absorción incoherente).

En el rango de cargas eléctricas y dimensiones típicas de los pulsos de iones ultracortos generados en la actualidad, hemos visto como la componente coherente del poder de frenado existente a bajas frecuencias es un efecto a tener en cuenta en el poder de frenado total, ya que es del mismo orden que las pérdidas incoherentes a altas frecuencias descritas satisfactoriamente por la teoría de Bethe-Bloch.

Mediante las simulaciones realizadas, se ha podido comprobar que, efectivamente, la reducción de las dimensiones del haz tanto longitudinal como radialmente aumentan la magnitud de las pérdidas debidas al efecto colectivo del haz. Asimismo, el aumento de la carga del haz, que implica el aumento del número de iones que lo componen, también contribuye a aumentar las pérdidas por absorción coherente, reduciendo por tanto la profundidad de penetración.

Al realizar la simulación para dos tipos de iones, protones y partículas alfa, se han podido comparar los resultados de cada uno de ellos. En el caso del haz de protones, magnitudes como el poder de frenado, la energía cinética y la profundidad de penetración han variado notablemente en función de los valores de los parámetros Q (carga del haz), T (longitud del haz) y σ_ρ (radio transversal del haz). Se ha podido comprobar que el factor que más ha influido en estas variaciones ha sido la carga del haz, mientras que las dimensiones longitudinal y radial del haz han producido cambios similares en estas magnitudes.

Se ha mostrado como es posible modificar la profundidad de penetración y la profundidad a la que se da el pico de absorción variando parámetros como la carga y las dimensiones del haz. Esto puede ser interesante para aplicaciones en campos como la medicina, por ejemplo en técnicas como la terapia de protones, donde se pueda ajustar la profundidad del punto a tratar variando alguna de estas magnitudes, en lugar del procedimiento habitual que consiste en ajustar la energía cinética.

Conclusions

In the present work, the stopping power equation for an ion beam has been derived by means of the classical theory of electromagnetism, starting from Maxwell's equations in material media. It has been shown that there are two distinct regions in the frequency components of the electric field: for the lower frequency region, the electric field of the beam acts collec-

tively (coherent absorption) and the associated stopping power depends on the number of particles in the beam, while for higher frequencies, each ion in the beam acts individually on the material and there is no collective effect (incoherent absorption).

In the range of typical electrical charges and dimensions of ultrashort ion pulses generated nowadays, we have seen how the coherent component of the stopping power existing at low frequencies is an effect to be taken into account in the total stopping power, since it is of the same order as the incoherent losses at high frequencies described satisfactorily by the Bethe-Bloch theory.

Through the simulations carried out, it has been verified that, indeed, the reduction of the beam dimensions both longitudinally and radially increases the magnitude of the losses due to the collective effect of the beam. Likewise, the increase in the beam charge, which implies a larger number of ions that compose it, also contributes to increment the losses due to coherent absorption, thus reducing the penetration depth.

By performing the simulation for two types of ions, protons and alpha particles, it has been possible to compare the results for each of them. In the case of the proton beam, magnitudes such as stopping power, kinetic energy and penetration depth have varied significantly as a function of the values of the parameters Q (beam charge), T (beam length) and σ_q (transverse radius of the beam). It has been found that the most influential factor in these variations has been the beam charge, while the longitudinal and radial dimensions of the beam have produced similar variations in these magnitudes.

It has been shown how it is possible to modify the penetration depth and the depth at which the absorption peak occurs by varying parameters such as load and beam dimensions. This may be of interest for applications in fields such as medicine, for example in techniques such as proton therapy, where the depth of the area to be treated can be adjusted by varying some of these quantities, instead of the usual procedure of adjusting the kinetic energy.

Bibliografía

- ¹ JI Apiñaniz et al. A quasi-monoenergetic short time duration compact proton source for probing high energy density states of matter. *Scientific Reports*, 11(1):1–11, 2021.
- ² Colin Danson et al. Petawatt class lasers worldwide. *High power laser science and engineering*, 3, 2015.
- ³ M Huault et al. A 2d scintillator-based proton detector for high repetition rate experiments. *High Power Laser Science and Engineering*, 7, 2019.
- ⁴ Enrico Fermi. The ionization loss of energy in gases and in condensed materials. *Physical Review*, 57(6):485, 1940.
- ⁵ James F Ziegler. Stopping of energetic light ions in elemental matter. *Journal of applied physics*, 85(3):1249–1272, 1999.
- ⁶ Andrea Macchi, Marco Borghesi, and Matteo Passoni. Ion acceleration by superintense laser-plasma interaction. *Reviews of Modern Physics*, 85(2):751, 2013.
- ⁷ Ken WD Ledingham et al. Towards laser driven hadron cancer radiotherapy: A review of progress. *Applied Sciences*, 4(3):402–443, 2014.
- ⁸ Emilie Bayart et al. Fast dose fractionation using ultra-short laser accelerated proton pulses can increase cancer cell mortality, which relies on functional parp1 protein. *Scientific reports*, 9(1):1–10, 2019.
- ⁹ PK Patel et al. Isochoric heating of solid-density matter with an ultrafast proton beam. *Physical review letters*, 91(12):125004, 2003.
- ¹⁰ C McGuffey et al. Focussing protons from a kilojoule laser for intense beam heating using proximal target structures. *Scientific reports*, 10(1):1–10, 2020.
- ¹¹ A Pelka, , et al. Ultrafast melting of carbon induced by intense proton beams. *Physical review letters*, 105(26):265701, 2010.
- ¹² Krish Bhutwala et al. Development of a platform at the matter in extreme conditions end station for characterization of matter heated by intense laser-accelerated protons. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 48(8):2751–2758, 2020.
- ¹³ AJ Mackinnon et al. Proton radiography of a laser-driven implosion. *Physical review letters*, 97(4):045001, 2006.
- ¹⁴ L Volpe et al. Proton radiography of laser-driven imploding target in cylindrical geometry. *Physics of Plasmas*, 18(1):012704, 2011.
- ¹⁵ OA Hurricane et al. Inertially confined fusion plasmas dominated by alpha-particle self-heating. *Nature Physics*, 12(8):800–806, 2016.

- ¹⁶ AB Zylstra and OA Hurricane. On alpha-particle transport in inertial fusion. *Physics of Plasmas*, 26(6):062701, 2019.
- ¹⁷ M Roth et al. Fast ignition by intense laser-accelerated proton beams. *Physical review letters*, 86(3):436, 2001.
- ¹⁸ JC Fernández et al. Fast ignition with laser-driven proton and ion beams. *Nuclear Fusion*, 54(5):054006, 2014.
- ¹⁹ Ingo Hofmann. Review of accelerator driven heavy ion nuclear fusion. *Matter and Radiation at Extremes*, 3(1):1–11, 2018.
- ²⁰ M Salvadori, PL Andreoli, M Cipriani, G Cristofari, R De Angelis, S Malko, L Volpe, JA Perez Hernandez, JI Apiñaniz, A Morace, et al. Time-of-flight methodologies with large-area diamond detectors for the effectively characterization of tens mev protons. *Journal of Instrumentation*, 17(04):C04005, 2022.
- ²¹ John David Jackson. Classical electrodynamics, 1999.
- ²² Jorge Mauricio Paulin Fuentes, Víctor Leonel Quiroz Rosado, Jorge Mulia Rodríguez, Máximo A Aguero Granados, and D Osorio González. Reseña sobre espectroscopia de rompimiento inducida por láser. *CIENCIA ergo-sum, Revista Científica Multidisciplinaria de Prospectiva*, 25(2), 2018.
- ²³ NIST. Stopping-power & range tables for electrons, protons, and helium ions, 2017.

Apéndices

A. Caso particular: Campos de un ión en reposo

Se puede comprobar fácilmente cómo, para el caso particular electrostático, donde el ión está en reposo y por tanto $\mathbf{v} = 0$, los campos (24) y (25) se simplifican y el campo magnético se anula, mientras que para el campo eléctrico se obtiene la conocida Ley de Coulomb:

$$\begin{aligned} \mathbf{v} = 0 &\longrightarrow \mathbf{B}(\mathbf{k}, \omega) = 0 \longrightarrow \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0 \\ \mathbf{v} = 0 &\longrightarrow \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = -i\mathbf{k}\Phi(\mathbf{k}, \omega) \longrightarrow \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\nabla\Phi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (87)$$

donde hemos empleado la propiedad (11) para calcular el campo eléctrico en el dominio real.

El potencial eléctrico $\Phi(\mathbf{r}, t)$ se calcula a continuación, empleando la ecuación (22) y la fórmula de transformada inversa de Fourier (7):

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \Phi(\mathbf{k}, \omega) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{2\pi q \delta(\omega)}{\varepsilon(\omega) (k^2 - \varepsilon_r(\omega) \frac{\omega^2}{c^2})} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega t} = \\ &= \frac{1}{8\pi^3} \frac{q}{\varepsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d^3k \frac{1}{k^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{8\pi^3} \frac{q}{\varepsilon} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{e^{ikr \cos \theta}}{k^2} k^2 \sin \theta dk d\varphi d\theta = \\ &= -\frac{1}{4\pi^2} \frac{q}{\varepsilon} \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} e^{ikr \cos \theta} dk d(\cos \theta) = -\frac{1}{4\pi^2} \frac{q}{\varepsilon} \int_0^{\infty} \frac{1}{ikr} [e^{ikr \cos \theta}]_0^{\pi} dk = \\ &= -\frac{1}{4\pi^2} \frac{q}{\varepsilon} \int_0^{\infty} \frac{1}{ikr} (e^{-ikr} - e^{ikr}) dk = \frac{1}{2\pi^2} \frac{q}{\varepsilon} \int_0^{\infty} \frac{1}{kr} \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{2i} dk = \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \frac{q}{\varepsilon} \int_0^{\infty} \frac{\text{sen}(kr)}{kr} dk = \frac{q}{4\pi\varepsilon} \frac{1}{r} \end{aligned} \quad (88)$$

Como vemos, el resultado corresponde al potencial de Coulomb, como cabía esperar en el caso electrostático.

B. Momento máximo intercambiado en una colisión ión-electrón

Sea el subíndice i y f el correspondiente al estado inicial y final del ión, y el subíndice e al estado final del electrón objetivo, que inicialmente está en reposo. Asumiendo una colisión elástica, que conserva energía cinética y momento:

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_f + \mathbf{p}_e \quad (89)$$

$$E_i = E_f + E_e \longrightarrow \frac{p_i^2}{2M} = \frac{p_f^2}{2M} + \frac{p_e^2}{2m} \quad (90)$$

donde M es la masa del ión y m la masa del electrón. $\mathbf{p}_i$, $\mathbf{p}_f$ son el momento inicial y final del ión, respectivamente, mientras que $\mathbf{p}_e$ es el momento adquirido por el electrón tras la colisión.

Cuando el momento intercambiado por el ión es máximo:

$$p_e = p_{max} \longrightarrow p_{max}^2 = (p_f - p_i)_{max}^2 = p_i^2 + p_f^2 + 2p_i p_f = (p_f + p_i)^2 \longrightarrow p_{max} = p_f + p_i \quad (91)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación de la conservación de la energía:

$$E_i = E_f + E_e \longrightarrow \frac{p_i^2}{2M} + \frac{(p_{max} - p_i)^2}{2M} + \frac{p_{max}^2}{2m} \quad (92)$$

$$p_i^2 = (p_{max} - p_i)^2 + \frac{M p_{max}^2}{m} \longrightarrow \left(1 + \frac{M}{m}\right) p_{max}^2 - 2p_i p_{max} = 0 \quad (93)$$

$$\left(1 + \frac{M}{m}\right) p_{max} - 2p_i = 0 \longrightarrow p_{max} = \frac{2p_i}{1 + \frac{M}{m}} \simeq \frac{2mp_i}{M} = 2mv \quad (94)$$

donde la última aproximación se debe a que $\frac{M}{m} \gg 1$.

C. Código *Mathematica* empleado para las resoluciones numéricas

```
SetDirectory[NotebookDirectory[]];
(*establece direct- directorio de cuaderno*)
ClearAll["Global`*"]
(*borra todo*)
(* 30 THz -> Mínima λ con abs. coherente para un bunch de 10 fs. Solo interesa analizar absorcion coherente *)
nReRaw = Import["nRev2.dat"]; (* Re{n} frente a la longitud de onda en m. 76 puntos. λ=[10μm,10m] -> f=[30 MHz,30THz] *)
nRe = Reverse[Table[{2 Pi c / nReRaw[[j]][[1]], nReRaw[[j]][[2]]}, {j, 1, Length[nReRaw]}]]; (* Re{n} frente a la frecuencia, en rad/s *)
nImRaw = Import["nImv2.dat"]; (* Im{n} frente a la longitud de onda en m. 76 puntos. λ=[10μm,10m] -> f=[30 MHz,30THz] *)
nIm = Reverse[Table[{2 Pi c / nImRaw[[j]][[1]], nImRaw[[j]][[2]]}, {j, 1, Length[nImRaw]}]]; (* Im{n} frente a la frecuencia, en rad/s *)
eRe = Table[{nRe[[j]][[1]], nRe[[j]][[2]]^2 - nIm[[j]][[2]]^2}, {j, 1, Length[nRe]}];
eIm = Table[{nRe[[j]][[1]], 2 * nRe[[j]][[2]] * nIm[[j]][[2]]}, {j, 1, Length[nRe]}];
eI = Table[{nRe[[j]][[1]], eRe[[j]][[2]] + I * eIm[[j]][[2]]}, {j, 1, Length[nRe]}];
w = Table[nRe[[j]][[1]], {j, 1, Length[nRe]}];

(***** Parameters *****)
(** ALL MAGNITUDES IN SI **)
c = 3 * 10^8; (* velocity of light *)
ee = 1.6 * 10^-19; (* elemental charge *)
mp = 1.67 * 10^-27; (* proton mass *)
me = 9.11 * 10^-31; (* electron mass *)
ε0 = 8.854 * 10^-12; (* dielectric constant *)

nw = 997 / (2.989 * 10^-26); (* Densidad de moléculas del agua *)
Zw = 10; (* Effective atomic number of water *)
IonP = 75 * ee; (* Ionization potential of water *)
(*----- Parameters that i can modify -----*)
qini = 2; (* ion charge [number of elemental charges] *)
Mini = 4; (* ion mass [number of proton masses] *)
Qini = 300; (* charge of the beam [pC] *)
σrini = 30; (* statistical radius of the beam [μm] *)
Tini = 30; (* temporal statistical bunch [fs] *)
(*
Kini=100; (* initial ion kinetic energy [MeV] (Range: 1-100MeV) *)
*)
niter = 500; (* Number of iterations in velocity *)
(***** BUCLE *****)
n = 1;
While[n < 11, {
(*
Kini = n * 10; (* initial ion kinetic energy [MeV] *)
*)
Qini = n * 100; (* charge of the beam [pC] *)
σrini = n * 10; (* statistical radial width radial distribution of the beam [μm] *)
Tini = n * 10; (* initial temporal statistical bunch [fs] *)
*)
(*-----*)
q = qini * ee; (* ion charge [C] *)
M = Mini * mp; (* ion mass [kg] *)
K = Kini * 10^-6 * ee; (* initial ion kinetic energy [J] *)
Q = Qini * 10^-12; (* charge of the beam [C] *)
T = Tini * 10^-15; (* statistical time of bunch [s] *)
σr = σrini * 10^-6; (* statistical radius of the beam [m] *)

v0 =  $\frac{c \sqrt{K} \sqrt{K + 2 c^2 M}}{K + c^2 M}$ ;
σz = v0 * T; (* statistical width of bunch [s] *)
Nq = Q / q; (* Number of ions *)
s = v0 / niter; (* velocity step. Denominator is the number of iterations *)
v = Table[v, {v, s / 10, v0, s}]; (* Table with all the velocities of the iterations *)
```

C CÓDIGO MATHEMATICA EMPLEADO PARA LAS RESOLUCIONES NUMÉRICAS

```

γ =  $\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$ ; (* Table with all the Lorentz factor of the iterations *)
(*****
Quiet[
|silencioso
L = (* poder de frenado dE/dz *)
Table[ Nq * q^2 / (2 * Pi^2 * c0 * v[[z]]^2) Sum[w[[j]] Exp[-w[[j]]^2 (oz/v[[z]]^2)^2] Im[1/er[[j]]{[2]}] (w[[j] + 1] - w[[j]])
|tabla |numero pi |suma |exponencial |parte imaginaria
NIntegrate[Exp[-kr^2 oz^2] (kr^2 + w[[j]]^2/v[[z]]^2 Abs[(1 - er[[j]]{[2]}) * v[[z]]^2/c^2)] / Abs[(kr^2 + w[[j]]^2/v[[z]]^2 (1 - er[[j]]{[2]}) * v[[z]]^2/c^2)]^2 * kr, {kr, 0, Infinity}],
|integral nume... |exponencial |valor absoluto |valor absoluto |infinito
{z, 1, Length[er] - 1}], {z, 1, Length[v]}] - Table[  $\frac{\mu * e^2 * q^2}{4 * \pi * c0^2 * m * v[[z]]^2}$  * 2w * (Log[2 * m * v[[z]]^2 / (1 - v[[z]]^2/c^2)] / IonP] - v[[z]]^2/c^2), {z, 1, Length[v]}]]];
|longitud |longitud |tabla |logaritmo |longitud

VA = Table[v[[z]]^3 * M * v[[z]] / L[[z]], {z, 1, Length[v]}]; (* Valor de v/a (velocidad entre aceleración) en cada punto *)
|tabla |longitud
Z = s Accumulate[VA]; (* integral para calcular la posición z en cada punto, a = dv/dt → dt = dv/a : z = ∫ v dt = ∫ v/a dv *)
|acumula
Z = Z - Z[[Length[Z]]];
|longitud
Ez = Table[{100 Z[[j]], M * c^2 * (γ[[j]] - 1) / (10^6 ee)}, {j, 1, Length[Z]}];
|tabla |longitud
Sz = Table[{100 Z[[j]], -L[[j]] / (10^6 ee) / 100}, {j, 1, Length[Z]}]; (* Sz es la tabla del poder de frenado (stopping power) *)
|tabla |longitud
Quiet[Print[Style["Ion Range: ", 15, Bold], Style[NumberForm[100 Z[[1]], 3], 15, Bold], Style[" cm", 15, Bold]]];
|describe |estilo |negrita |estilo |forma de número |negrita |estilo |negrita
Print["Ion energy: ", Kini, " MeV"];
|describe
ListLogLogPlot[eRe, Joined → True, PlotRange → Full, PlotStyle → {Thick, Blue}, AxesStyle → Directive[Black, Thick, 15], AxesLabel → {Style["ω [rad/s]", Bold, 15], Style["Re(er)", Bold, 15]},
| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
ImageSize → 600];
|tamaño de imagen
ListLogLogPlot[eIm, Joined → True, PlotRange → Full, PlotStyle → {Thick, Red}, AxesStyle → Directive[Black, Thick, 15], AxesLabel → {Style["ω [rad/s]", Bold, 15], Style["Im(er)", Bold, 15]},
| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
ImageSize → 600];
|tamaño de imagen
(***** Exportar datos *****
datafileEz = StringJoin["EzA", ToString[Qini], "pc", ToString[Tini], "fs", ToString[orini], "um", ToString[Kini], "MeV", ".dat"];
|une cadenas de caract... |convierte a cadena de cara... |convierte a cadena de cara... |convierte a cadena de caract... |convierte a cadena de caracteres
datafileSz = StringJoin["SzA", ToString[Qini], "pc", ToString[Tini], "fs", ToString[orini], "um", ToString[Kini], "MeV", ".dat"];
|une cadenas de caract... |convierte a cadena de cara... |convierte a cadena de cara... |convierte a cadena de caract... |convierte a cadena de caracteres
(*
datafileEz=StringJoin["EzA",ToString[Kini],"MeV","Bethe.dat"];
datafileSz=StringJoin["SzA",ToString[Kini],"MeV","Bethe.dat"];
*)
Export[datafileEz, Ez];
|exporta
Export[datafileSz, Sz];
|exporta
}], n++]

SE = Table[{M * c^2 * (γ[[j]] - 1) / (10^6 ee), -L[[j]] / (10^6 ee) / 100}, {j, 1, Length[Z]}];
|tabla |longitud

datafileSE = StringJoin["SEA", ToString[Qini], "pc", ToString[Tini], "fs", ToString[orini], "um", ToString[Kini], "MeV", ".dat"];
|une cadenas de caract... |convierte a cadena de cara... |convierte a cadena de caract... |convierte a cadena de caracteres
(*
datafileSE=StringJoin["SEA",ToString[Kini],"MeV","Bethe.dat"];
*)
Export[datafileSE, SE];
|exporta

```