

# Cálculo del Poder de Frenamiento Electrónico de Protones Rápidos Atravesando Blancos de N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>

M. E. GALASSI<sup>(1)</sup>, P. D. FAINSTEIN<sup>(2)</sup>, G. H. OLIVERA<sup>(3)</sup> y R. D. RIVAROLA<sup>(1)</sup>

(1) Instituto de Física de Rosario (CONICET - UNR), Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario.

(2) Centro Atómico Bariloche, 8400 Bariloche.

(3) Dep. of Med. Phys., Medical School, University of Wisconsin-Madison, 1530 Medical Sciences Center, 1300 University Avenue, Madison, WI 53706-1532, USA.

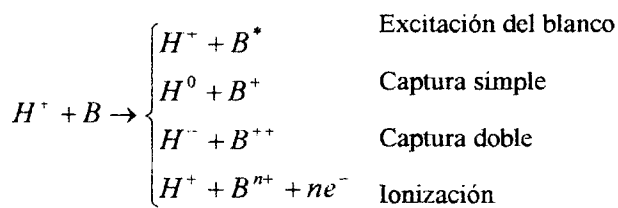
Correo electrónico: galassi@unrctu.edu.ar

Los poderes de frenamiento de protones atravesando blancos gaseosos de N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub> en el rango de energías de impacto de 4 a 13 MeV son calculados aplicando el modelo CDW-EIS (Continuum Distorted Wave - Eikonal Initial State). Para las altas energías consideradas se desprecia la contribución de los procesos de captura electrónica y excitación ya que a esas velocidades domina el proceso de ionización simple del blanco [1]. Los poderes de frenamiento de cada sistema han sido obtenidos de dos modos: a) empleando la regla de aditividad de Bragg y b) utilizando una aproximación que tiene en cuenta el carácter molecular del blanco. Los resultados teóricos se comparan con datos experimentales publicados recientemente por otros autores [2].

The stopping powers of N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> for protons with energies between 4 and 13 MeV are calculated applying the model CDW-EIS (Continuum-Distorted-Wave-Eikonal-Initial-State). The contribution from electron capture and excitation are neglected because the single ionization of the target is the most important process at these velocities [1]. The stopping powers for each system are obtained in two ways: a) employing the Bragg's additivity rule and b) using a simple approximation that takes into account the molecular character of the target. The theoretical results are compared with experimental data published recently by other authors [2].

## I. INTRODUCCIÓN

El poder de frenamiento de un medio (más comunmente conocido como Stopping Power) se define como la pérdida de energía del proyectil por unidad de longitud atravesada. Estas pérdidas de energía se producen, en su mayor parte, mediante los siguientes mecanismos:



dependiendo la importancia de cada canal de la carga del proyectil incidente y de la velocidad del mismo. Por ejemplo, para velocidades del proyectil bajas e intermedias (comparadas con la velocidad del electrón con el cual interactúa) los procesos de excitación simple (E) y captura electrónica simple (C) son los más probables. Sin embargo a altas energías del proyectil, el proceso dominante es el de ionización simple (I) del blanco.

Generalmente, las mediciones de poderes de frenamiento se realizan con blancos extendidos (los proyectiles sufren en promedio varias colisiones antes de alcanzar el detector). De este modo, si el haz incidente

está constituido por protones (H<sup>+</sup>), parte del mismo se neutraliza (H<sup>0</sup>) hasta llegar al equilibrio (a muy bajas energías debe considerarse también la presencia de H<sup>-</sup> en el haz). Las fracciones del haz cargadas y neutras se calculan del siguiente modo:

$$f(H^+) = \frac{\sigma^L}{\sigma^L + \sigma^C} \quad (1)$$

$$f(H^0) = \frac{\sigma^C}{\sigma^L + \sigma^C} \quad (2)$$

donde  $\sigma^C$  representa la sección eficaz total de captura electrónica y  $\sigma^L$  la sección eficaz total de pérdida electrónica. Conocidos estos valores, el poder de frenamiento viene dado por:

$$S_e = f(H^+)S_e^+ + f(H^0)S_e^0 \quad (3)$$

donde  $S_e^+$  y  $S_e^0$  son los poderes de frenamiento del gas blanco para un haz formado enteramente por H<sup>+</sup> o H<sup>0</sup> respectivamente.

Las fracciones (1) y (2) se han determinado experimental [3] y teóricamente [1] para un blanco de oxígeno gaseoso, observándose que la contribución del canal de captura se vuelve despreciable para energías de impacto por encima de 400 KeV.

También se estimaron las contribuciones al cálculo

de poderes de frenamiento debidas a la excitación simple del blanco [1], obteniéndose contribuciones menores al 2 %. De este modo, para las altas energías analizadas en el presente trabajo (4–13 MeV), pueden despreciarse tanto los canales de captura electrónica como de excitación para el cálculo de poderes de frenamiento, quedando finalmente:

$$S_e = S_e^+ \quad (4)$$

donde

$$S_e^+ = \int_0^\infty dE_k \Delta E_{ik}^1 \frac{d\sigma_{ik}^1}{dE_k}, \quad \Delta E_{ik}^1 = E_k - E_i \quad (5)$$

siendo  $E_i$  y  $E_k$  las energías del electrón en los estados ligado inicial y del continuo respecto al blanco respectivamente.

## II. MODELOS TEÓRICOS

Se calcularon los poderes de frenamiento de  $N_2$  y  $O_2$  realizando dos aproximaciones para tratar a los blancos moleculares: a) haciendo uso de la regla de aditividad de Bragg y b) a través de un método que tiene en cuenta el carácter molecular del blanco. En el primer caso se aproximó:

$$S_e^+(O_2) = 2S_e^+(O) \quad (6)$$

para oxígeno gaseoso, procediéndose en forma análoga para el  $N_2$ . En este caso se han utilizado funciones de onda de Roothan-Hartree-Fock [4] para describir los estados atómicos ligados.

El segundo método fue propuesto por Senger y Rechenmann [5], quienes calcularon las secciones eficaces de los orbitales moleculares como combinaciones lineales de orbitales atómicos cuyos coeficientes surgen de realizar un análisis poblacional. En otra de las contribuciones aquí presentadas se hace un análisis detallado de dicha aproximación.

Se calcularon las secciones eficaces atómicas de ionización simple utilizando el modelo CDW-EIS (Continuum Distorted Wave – Eikonal Initial State), dentro del formalismo de onda distorsionada, en la aproximación de parámetro de impacto [6].

## III. ANÁLISIS DE RESULTADOS

En la figura 1 se comparan datos experimentales de poderes de frenamiento de  $N_2$  y  $O_2$  [2] con los cálculos realizados utilizando tanto la regla de aditividad de Bragg como el método molecular. En dichas gráficas se observa que los resultados obtenidos están en muy buena concordancia con los datos experimentales y que una descripción molecular del blanco mejora notablemente la concordancia entre valores experimentales y teóricos.

Esto ya ha sido observado para el cálculo de secciones eficaces diferenciales y totales de ionización, notándose diferencias muy marcadas para energías intermedias del proyectil.

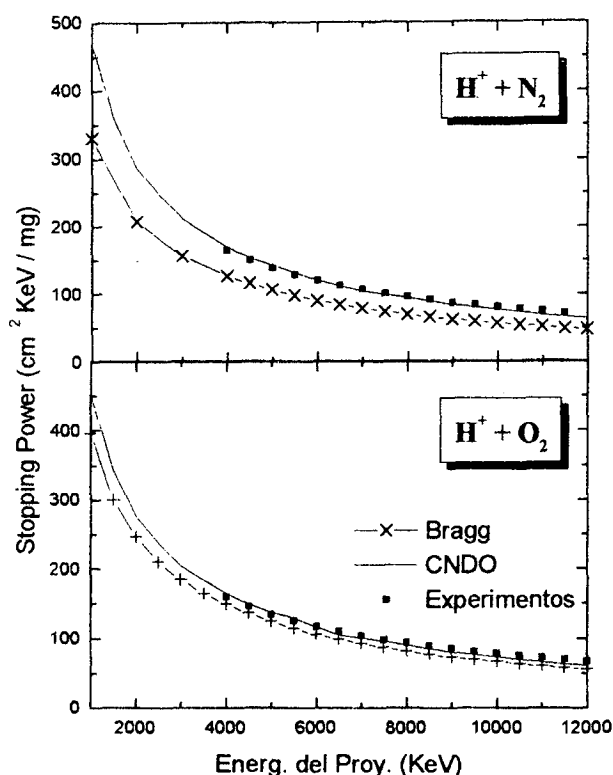


Figura 1. Poderes de frenamiento de protones atravesando blancos de  $N_2$  y  $O_2$  para altas energías de impacto.

## IV. CONCLUSIONES

Se calcularon poderes de frenamiento de protones atravesando blancos de  $N_2$  y  $O_2$  utilizando la regla de aditividad de Bragg y otro modelo que toma en cuenta el carácter molecular del blanco. Los resultados obtenidos aplicando este último método muestran una concordancia muy buena con los datos experimentales.

## V. REFERENCIAS

- [1] G.H. Olivera, A.E. Martínez, R.D. Rivarola y P.D. Fainstein. NIM B **111** (1996) 7-11
- [2] N. Shiomi-Tsuda, N. Sakamoto, H. Ogawa, M. Tanaka, M. Saitoh y U. Kitoba. NIM B **149** (1999) 17-24.
- [3] S.K. Allison. Rev. Mod. Phys. **30** (1958) 1137.
- [4] E. Clementi y C. Roetti, At. Data Nucl. Data Tables **14** (1974) 177.
- [5] B. Senger y R.V. Rechenmann. NIM B **2** (1984) 204-207.
- [6] P.D. Fainstein, V.H. Ponce, y R.D. Rivarola. J. Phys. B. **21** (1988) 287.