



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA  
SUPERIOR INGENIEROS  
INDUSTRIALES VALENCIA

Curso Académico:



*A mi familia, ya que sin su apoyo incondicional no habría  
podido llegar hasta aquí.*

*A mis amigos, que me animaron en los momentos  
más duros.*

*A mi tutor, el Doctor Tkachenko, cuya inconmensurable  
paciencia me ha permitido apreciar  
la belleza de la investigación. A mi camarada Jesús,  
cuya ayuda ha resultado clave en el desarrollo de este proyecto.*



## Resumen

La medición de la energía perdida por haces de partículas cargadas es una importante herramienta de diagnóstico y generación en la física de plasmas moderna, relacionada directamente con la fusión inercial mediante haces de iones pesados como proyectiles.

H. Bethe, en 1930, derivó una fórmula para el cálculo del poder de frenado (*Stopping power*) que describe la energía perdida por un proyectil rápido al atravesar un sólido modelado como un sistema de oscilaciones mecánico-cuánticas. Más tarde, en 1959, A. Larkin demostró que una fórmula análoga mantiene su validez para iones rápidos a velocidades no relativistas que permean un gas de electrones en el cual la frecuencia de oscilación es reemplazada por la frecuencia del plasma. La forma asintótica de Larkin para pérdidas de energía se suele utilizar para determinar la densidad electrónica en un blanco de fusión, tradicionalmente tratado como un fluido de electrones. Excluyendo la técnica de dispersión de rayos X de Thomson, esta técnica sigue siendo la única candidata adecuada para el diagnóstico de plasmas a altas temperaturas y densidades ( $n_e \sim 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ,  $T \sim 50 \text{ kK}$ ).

El estudio de las pérdidas energéticas que sufre una partícula al atravesar la materia resulta pues de gran interés para el avance de la ciencia en numerosos campos, además de aquellos relacionados con la fusión nuclear por confinamiento inercial, siendo un ejemplo importante la destrucción de tumores en zonas de difícil acceso, como la cavidad craneal.

En la actualidad, dado que no existen métodos fiables de evaluación del *stopping power* por requerirse ensayos en condiciones extremas, no se puede prever, ni tan siquiera de forma aproximada, el comportamiento de sistemas en estas condiciones, por lo que resulta fundamental encontrar un método válido de evaluación. La alternativa que se propone se basa en el cálculo independiente de algunos de los parámetros estadísticos del sistema siguiendo el marco de la teoría de reacción lineal de Kubo. Algunos de estos parámetros se incluyen en las reglas de sumas (*sum rules*), que son, efectivamente, unas leyes de conservación adicionales que consiguen tener en cuenta las propiedades dinámicas (leyes del movimiento clásicas o mecánico-cuánticas) de sistemas físicos con las citadas condiciones.

Los resultados aportados por la consideración de estas premisas permiten, mediante algunas correcciones, obtener una caracterización válida del sistema que cumple todas las *sum rules*, así como otras leyes de conservación físicas, tal y como se podrá apreciar al comparar los datos teóricos propuestos con las simulaciones numéricas, que incluyen tanto proyectiles rápidos como lentos. En definitiva, los resultados aportados permitirán la ampliación del conocimiento de un campo puntero en la física de plasmas, acercando un poco más a la humanidad a la fusión termonuclear controlada.

Palabras clave: fusión termonuclear, diagnóstico de plasmas densos, poder de frenado, método de momentos.



## Resum

La mesura de l'energia perduda per feixos de partícules carregades resulta una important eina de diagnòstic i generació a la física de plasmes moderna, relacionada directament amb la fusió inercial per mitjà de feixos d'ions pesats com a projectils.

En 1930, H. Bethe va derivar una fórmula per al càlcul del poder de frenada (*Stopping Power*) que descriu l'energia perduda per un projectil ràpid quan travessa un sòlid modelat com un sistema d'oscil·lacions mecànic-quàntiques. Més endavant, en 1959, A. Larkin va demostrar que una fórmula anàloga mantenia la seua validesa per a ions ràpids a velocitats no relativistes que permeen un gas d'electrons on la freqüència d'oscil·lació queda substituïda per la freqüència del plasma. La forma asimptòtica de A. Larkin per a pèrdues d'energia sol gastar-se per determinar la densitat electrònica d'un objectiu de fusió, que tradicionalment es considerava com a un fluid d'electrons. Deixant de banda la tècnica de dispersió de rajos X de Thomson, aquesta tècnica segueix sent l'única candidata adient per al diagnòstic de plasmes a altes temperatures i densitats ( $n_e \sim 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ,  $T \sim 50 \text{ kK}$ ).

L'estudi de les pèrdues d'energia que experimenta una partícula quan travessa la matèria resulta doncs de gran interès per l'avanç de la ciència en nombrosos camps, a més d'aquells relacionats amb la fusió nuclear per confinament inercial, sent un exemple important la destrucció de tumors en zones de difícil accés, com la cavitat cranial.

Actualment, ja que no existeixen mètodes fiables d'avaluació del *Stopping Power* per necessitar-se assajos en condicions extremes, no es pot preveure, ni tan sols de forma aproximada, el comportament de sistemes en aquestes condicions, de forma que resulta fonamental trobar un mètode vàlid d'avaluació. L'alternativa que es proposa es fonamenta en el càlcul independent d'alguns paràmetres estadístics del sistema seguint el marc de la teoria de reacció lineal de Kubo. Alguns d'aquests paràmetres s'inclouen en les regles de suma (*sum rules*), que són, efectivament, unes lleis de conservació addicionals que aconseguen tindre en compte les propietats dinàmiques (lleis del moviment clàssiques o mecano-quàntiques) de sistemes físics amb aquestes condicions.

Els resultats aportats per la consideració d'aquestes premisses permeten, mitjançant algunes correccions, obtenir una caracterització vàlida del sistema que compleix totes les *sum rules*, a més d'altres lleis físiques, tal com es podrà apreciar en comparar les dades teòriques proposades amb les de simulacions numèriques, que inclouen tant projectils ràpids com lents. En definitiva, els resultats aportats permetran l'ampliació del coneixement d'un camp punter a la física de plasmes, apropant un poc més a la humanitat a la fusió termonuclear controlada.

Paraules clau: fusió termonuclear, diagnòstic de plasmes densos, poder de frenada, mètode de moments.





## Abstract

Measuring energy losses of beams of charged particles is an important diagnostics and generation tool in modern plasma physics directly related to the inertial fusion with heavy ion beams as a driver.

H. Bethe, back in 1930, derived a simplified formula for the stopping power capable of describing the energy losses of fast projectiles in a solid modeled as a system of quantum-mechanical oscillators. Later, A. Larkin (1959) demonstrated that an analogous formula remains valid for fast but not relativistic ions permeating electron gases, in which the oscillator frequency is effectively replaced by the plasma frequency. Larkin's asymptotic form for the energy losses is usually employed to determine the number density of electrons in a fusion target traditionally treated as an electron fluid. The x-ray Thomson scattering excepted, this technique remains the only suitable candidate for the diagnostics of hot and dense ( $n_e \sim 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ,  $T \sim 50 \text{ kK}$ ) plasmas.

Hence, the study of the energy losses of a particle on its way across matter has great importance for the progress of several scientific fields different from those related with the nuclear fusion via inertial confinement, for example, the destruction of tumors located in difficult access areas such as the cranial cavity.

Nowadays, because of the lack of reliable evaluation methods of the stopping power under extreme conditions, we cannot even approximately predict the behavior of the systems under such circumstances, so that it is important to find a reliable method of evaluation. The chosen alternative is based on the independent calculation of some statistical parameters of the system within the Kubo linear reaction theory. Some of this parameters are included in the sum rules, that are effectively additional conservations laws that successfully take into account the dynamic properties (classical or quantum-mechanical movement laws) of systems under such conditions.

The results obtained under those considerations permit us, with some corrections, to accomplish a characterization of the system that satisfy all *sum rules* and other conservation laws as confirmed by the comparison of the proposed theoretical data with the numerical simulations data that include both slow and fast projectiles. Finally, the obtained results will make an enlargement of the actual boundaries of the advanced field of plasma physics, approaching the humanity to the controlled nuclear fusion.

Key words: nuclear fusión, diagnostics of dense plasmas, stopping power, method of moments.



# Índice de documentos

Documentos contenidos en el TFG

---

- **Memoria**
- **Anexos**
- **Presupuestos**





**ESCUELA TÉCNICA  
SUPERIOR INGENIEROS  
INDUSTRIALES VALENCIA**



**UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA**

**TRABAJO DE FINAL DE GRADO DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**COLOMA DE LA FUENTE, LLUÍS**

**EVALUACIÓN DE LOS RESULTADOS DE DIAGNÓSTICO DE  
PLASMAS DENSOS BASADA EN EL MÉTODO DE MOMENTOS  
CLÁSICO**

# **MEMORIA**

**Curso académico: 2017-18**

# Índices

---

## Índice de contenido:

1. Objetivos.....	1
2. Motivación y justificación.....	1
3. Introducción.....	2
3.1. El plasma.....	2
3.1.1. Plasmas naturales.....	3
3.1.2. Plasmas artificiales.....	5
3.2. La fusión nuclear.....	5
3.2.1. Reactores de confinamiento magnético.....	10
3.2.2. Reactores de confinamiento inercial.....	10
4. Planteamiento del problema.....	14
4.1. Constantes físicas.....	14
4.2. Parámetros termo- y electrodinámicos.....	15
4.3. Poder de frenado ( <i>Stopping Power</i> ).....	17
4.3.1. Otras aplicaciones del <i>Stopping Power</i> .....	20
4.4. La función de pérdidas ( <i>loss function</i> ).....	21
4.5. La fórmula de Nevanlinna y el método de momentos.....	23
4.6. Procedimiento.....	25
5. Solución del problema.....	26
5.1. Reconstrucción de la función dieléctrica inversa.....	26
5.2. Cálculo de la <i>loss function</i> .....	32
5.3. Cálculo de la función $h_0(k)$ .....	34
5.4. Modelo RPA.....	35
5.5. Cálculo analítico del momento $C_0(k)$ .....	36

5.6. Plasmas de un componente (OCP) .....	38
5.7. Plasmas de dos componentes (TCP) .....	41
5.8. Adimensionalización de funciones y parámetros.....	42
6. Resultados numéricos.....	49
6.1. Resultados de <i>Stopping Power</i> para varios casos de OCP.....	49
6.2. Resultados de <i>Stopping Power</i> para varios casos de TCP.....	55
7. Conclusiones.....	58
8. Posibilidades de mejora.....	59
9. Referencias.....	61
9.1. Referencias bibliográficas.....	61
9.2. Referencias de imágenes.....	64

## Índice de imágenes:

<i>Imagen 1.</i> Cambio del estado de agregación del agua según la temperatura.....	3
<i>Imagen 2.</i> Plasma natural bajo la forma de rayos. ....	4
<i>Imagen 3.</i> Capas de una estrella de neutrones. ....	4
<i>Imagen 4.</i> Evolución del consumo energético mundial. ....	6
<i>Imagen 5.</i> Esquema del proceso de fusión entre deuterio y tritio. ....	6
<i>Imagen 6.</i> Esquema de la fisión de un núcleo de $U^{235}$ . ....	7
<i>Imagen 7.</i> Comparación de las energías obtenidas por fusión y fisión. ....	8
<i>Imagen 8.</i> Comparativa entre las interacciones fundamentales. ....	9
<i>Imagen 9.</i> Comparación de los tipos de reactores por confinamiento magnético. .....	10
<i>Imagen 10.</i> Detalle de las partes del <i>hohlraum</i> . ....	11
<i>Imagen 11.</i> Esquema conceptual del proceso de fusión. ....	11
<i>Imagen 12.</i> Esquema de las instalaciones de <i>National Ignition Facility</i> (NIF). .....	12
<i>Imagen 13.</i> Comparación temperatura (eV) frente a densidad electrónica ( $m^{-3}$ ). .....	12
<i>Imagen 14.</i> Obtención de energía eléctrica en un reactor de fusión nuclear. ....	13
<i>Imagen 15.</i> Instalación en la que se acelerarán los iones de carbono. ....	21



**Índice de gráficas:**

<i>Gráfica 1.</i> Caso $r_s = 2.5256$ y $\Gamma = 0.05$ .....	50
<i>Gráfica 2.</i> Caso $r_s = 2.5256$ y $\Gamma = 0.11$ .....	50
<i>Gráfica 3.</i> Caso $r_s = 2.5256$ y $\Gamma = 1.1$ .....	51
<i>Gráfica 4.</i> Caso $r_s = 1.985$ y $\Gamma = 0.67$ .....	52
<i>Gráfica 5.</i> Caso $r_s = 1.985$ y $\Gamma = 0.69$ .....	52
<i>Gráfica 6.</i> Caso $r_s = 11.797$ y $\Gamma = 0.145$ .....	53
<i>Gráfica 7.</i> Caso $r_s = 11.797$ y $\Gamma = 0.2365$ .....	53
<i>Gráfica 8.</i> Caso $r_s = 2.5256$ y $\Gamma = 0.05$ .....	55
<i>Gráfica 9.</i> Caso $r_s = 2.5256$ y $\Gamma = 0.11$ .....	56
<i>Gráfica 10.</i> Caso $r_s = 2.5256$ y $\Gamma = 1.1$ .....	56
<i>Gráfica 11.</i> Caso $r_s = 2.5256$ y $\Gamma = 5$ .....	57



## 1. Objetivos

---

El presente proyecto se enfoca en el desarrollo de un método interpolacional que permita calcular de forma válida la función dieléctrica de un plasma fuertemente acoplado, es decir, con alto grado de interacción entre sus partículas; con el fin último de obtener resultados sobre las pérdidas de energía de una partícula al atravesar la materia, lo que permite, *a posteriori*, obtener datos relevantes acerca de las propiedades del plasma que se estudia, es decir, diagnosticar el sistema.

Concretamente, se plantea un método de cálculo sencillo, basado en interpolaciones preexistentes, de la función dieléctrica de un plasma fuertemente acoplado empleando el método de momentos. Una vez obtenida dicha función, se planteará el cálculo del poder de frenado polarizacional (*Stopping Power*) siguiendo el formalismo establecido por J. Lindhard.

Desde un punto de vista personal, el objetivo del proyecto es aprender y desarrollar nuevos conocimientos matemáticos y de programación que permitan abordar la solución de problemas complejos reales. Además, desde un punto de vista moral se considera que se está en la obligación de ayudar dentro lo posible al desarrollo de la investigación de plasmas, ya que en este campo tal vez se encuentre la respuesta a la cuestión energética actual, uno de los principales problemas de nuestro tiempo.

## 2. Motivación y justificación

---

El aumento de población y de desarrollo tecnológico ha producido en las últimas décadas un crecimiento sin parangón de la demanda energética a escala global. Por otro lado, las reservas de combustibles fósiles indican que con el actual ritmo de crecimiento resultará inviable el abastecimiento energético global a corto y medio plazo. Es por este motivo que resulta de gran interés el estudio de fuentes de energía alternativas. Una de las principales propuestas que existen al respecto son los reactores de fusión nuclear, que dotarían a la humanidad de una fuente de energía limpia y prácticamente ilimitada a largo plazo.

Uno de los numerosos problemas que presenta la fusión nuclear es establecer de forma correcta las propiedades del plasma con el que se trabaja para obtener la fusión de los núcleos. Esto se debe a que el plasma presenta temperaturas excepcionalmente altas que imposibilitan cualquier tipo de medida que implique el contacto directo de un instrumento con la superficie o el interior del plasma.

Por este motivo, adquiere especial relevancia el desarrollo de métodos que permitan determinar las propiedades del plasma (termodinámicas, químicas, térmicas, etc.) mediante métodos que no impliquen contacto directo de un instrumento específico.

Al respecto, en este aspecto han surgido numerosos métodos pero, a pesar de ello, la complejidad de los mismos para obtener de forma satisfactoria resultados de diagnóstico ha motivado que se desarrolle un método útil y sencillo que permita realizar estimaciones válidas sin necesidad de cálculos complicados. Este es el marco dentro del cual se encuadra el presente proyecto.

Desde un punto de vista personal, la motivación para la realización de este trabajo ha sido la búsqueda de nuevos conocimientos y el crecimiento propio desde un punto de vista tanto académico como humano. El resultado de los esfuerzos dirigidos de este modo han sublimado en cuatro publicaciones en revistas de investigación [1], [2], [3] y [4].

### **3. Introducción**

---

A modo de introducción a este trabajo, resulta interesante exponer algunas nociones sobre una serie de conceptos básicos estrechamente relacionados con los temas que más adelante se plantean. Así mismo, esta introducción también servirá para comprender un poco el *statu quo* de la industria relacionada con la investigación llevada a cabo en este proyecto.

#### **3.1. El plasma**

El término plasma, procedente del griego *πλάσμα*, que puede traducirse literalmente como “sustancia moldeable”, fue introducido a principios del siglo XX por Irving Langmuir para describir un cuarto estado de la materia que se diferenciaba de los otros en que no se puede encontrar en condiciones normales en la superficie terrestre, en tanto que se trata de materia a una temperatura tan elevada que una parte o la totalidad de sus electrones han sido arrancados del núcleo, esto es, materia que ha resultado parcial o totalmente ionizada como consecuencia de las condiciones extremas en las que se encuentra.

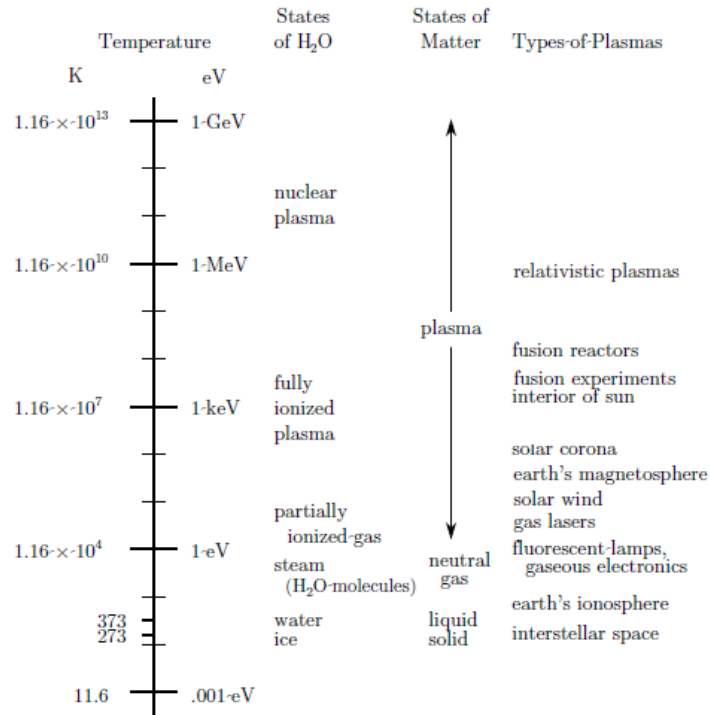


Imagen 1. Cambio del estado de agregación del agua según la temperatura [I. 1].

Desde un punto de vista más teórico, un plasma se puede entender como cualquier sistema estadístico que contenga partículas cargadas en movimiento. Cuando sistemas de este tipo se condensan, la interacción entre sus partículas se hace tan efectiva que el sistema puede experimentar numerosos cambios en sus estados internos o incluso transiciones de fase, tal y como explica S. Ichimaru en [5]. Este tipo de fenómenos se deben a la multitud de procesos elementales que pueden darse en estas condiciones, transferencia de fotones, procesos con reacciones nucleares, etc. En este proyecto, se trabajará concretamente con plasmas condensados. A continuación, se presentan algunos ejemplos de donde se puede encontrar este tipo de plasmas, de modo que se pueda comprobar el vasto alcance de este campo de estudio.

### 3.1.1. Plasmas naturales

En contra de lo que puede parecer, el estado plasma es el estado de agregación en que se encuentra la mayoría de materia visible del universo. En la Tierra se pueden encontrar plasmas en la naturaleza en forma de rayos, relámpagos o, incluso, en el denominado fuego de San Telmo. Este tipo de plasmas se suele generar como respuesta a la ionización del aire de la atmósfera, como consecuencia de un campo eléctrico resultado del rozamiento entre las partículas.



Imagen 2. Plasma natural bajo la forma de rayos [I. 2].

Dejando de lado la superficie terrestre, existen numerosos plasmas en objetos espaciales. El estudio de los mismos resulta fundamental para el avance de la comprensión del cosmos, por lo que se han dedicado numerosos esfuerzos al respecto. A continuación, se plantean algunos ejemplos de plasmas existentes en cuerpos celestes.

En los interiores de estrellas de la secuencia principal, entre las que se incluye el Sol y que conforman el grupo más abundante de estrellas en el universo, se hallan plasmas densos constituidos fundamentalmente por hidrógeno y sus isótopos. En su interior tienen lugar numerosas reacciones termonucleares. Por otro lado, existen aplicaciones directas de la física de plasmas densos en la atmósfera solar, como por ejemplo el estudio de opacidades, que permiten resolver cuestiones tan importantes como la composición de la misma.

Así mismo, el estudio de plasmas densos en estrellas enanas blancas permite establecer mecanismos detallados sobre la explosión de supernovas y la formación de estrellas de neutrones, tal y como explican R. Canal y otros en [6]. Precisamente, en el estudio de las estrellas de neutrones, que son algunos de los objetos más misteriosos del cosmos, se ha teorizado que existen plasmas densos en su parte más superficial. Estos plasmas estarían formados principalmente por hierro que, debido a la alta densidad a la que se vería sometido por la fuerza gravitatoria, se encontraría totalmente ionizado, como postula S. Ichimaru en [5].

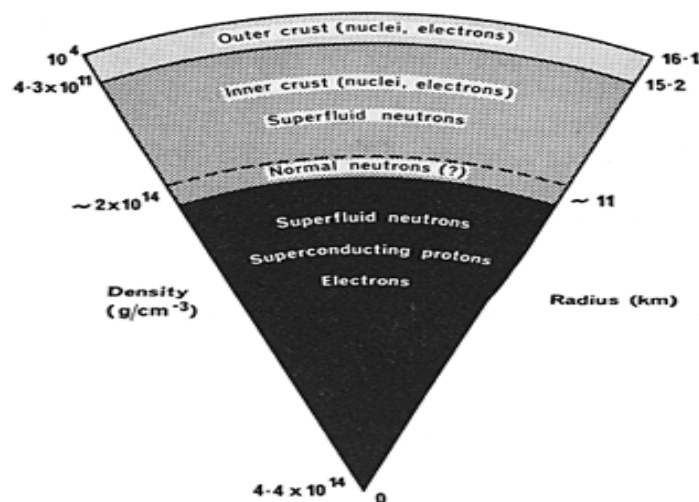


Imagen 3. Capas de una estrella de neutrones [I. 3].

Estos son solamente algunos de los ejemplos más trascendentales que ocupan hoy día a la investigación de plasmas densos en el espacio exterior. Por otro lado, este no es el área de estudio más relacionada con el presente proyecto, por lo que a continuación se procederá a plantear algunos de los casos donde el estudio de los plasmas densos tiene una aplicación más industrial, esto es, en los plasmas artificiales.

### 3.1.2. Plasmas artificiales

Se puede encontrar materia en estado plasma en numerosos elementos de la vida cotidiana, desde las luces de neón, que se iluminan gracias a la ionización de gases a baja presión en su interior, hasta las pantallas de algunos televisores antiguos, que funcionaban gracias a un principio similar. Una de las principales características que se puede observar en este tipo de artilugios es que no presentan temperaturas muy elevadas en comparación con otros plasmas. Esto se debe precisamente a la baja densidad del plasma. El sistema logra este efecto gracias a que se ioniza una cantidad muy pequeña de materia, lo que hace que las partículas estén dispersas, produciendo la ilusión de que la temperatura del sistema es baja.

Dejando a un lado este tipo de plasmas de baja densidad, existen numerosos proyectos de investigación en los cuales se trabaja con plasmas densos similares a los que se encuentran en el interior de las estrellas anteriormente citadas. Uno de los ejemplos más significativos es el de los plasmas de investigación de fusión por confinamiento inercial planteado por H. Hora en [7], de la cual se hablará en detalle más adelante y que representa uno de los principales campos de aplicación a los que se enfoca este proyecto. En general, los experimentos que involucran plasmas densos se obtienen de numerosas formas, por choques de compresión, como muestra V. E. Fortov en [8], descargas por pinzamiento, como plantean N. R. Pereira y J. Davis en [9] o evaporación de metales, como estudian A. N. Mostovych y otros en [10], entre otros.

Llegados a este punto, resulta necesario hablar acerca del campo de aplicación estrella de la física de plasmas: la fusión nuclear.

## **3.2. La fusión nuclear**

El creciente aumento de la demanda energética mundial ha dejado claro que cada vez resulta más apremiante la aparición de una fuente de energía limpia y con expectativas de duración superiores a las de los combustibles fósiles, que cada vez están más cerca de agotarse.

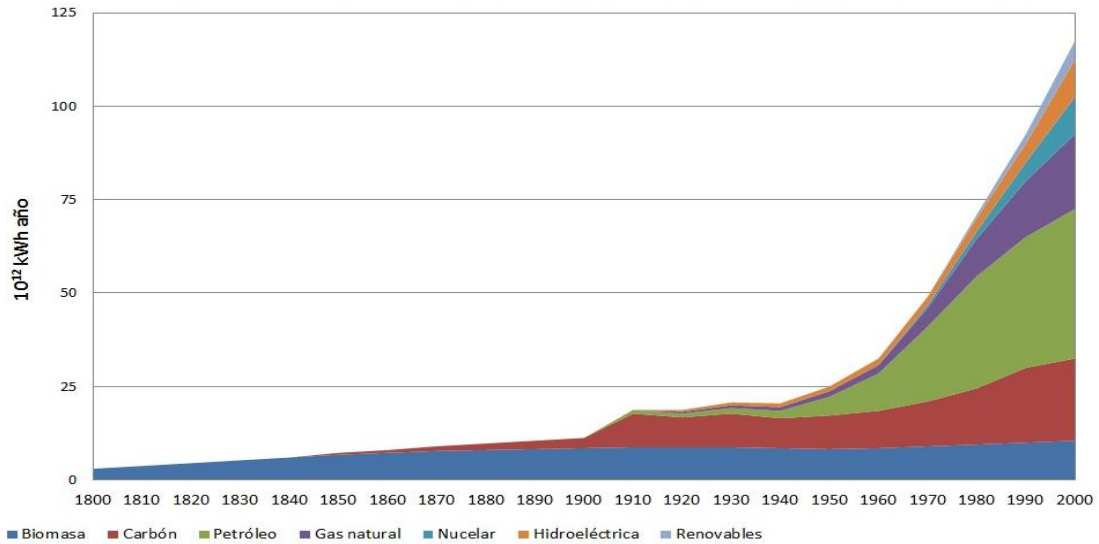


Imagen 4. Evolución del consumo energético mundial [I. 4].

La fusión termonuclear es la energía que hace que brillen las estrellas y, por extensión, exista la vida en la Tierra. Se basa en la unión de dos núcleos ligeros, como por ejemplo, uno de deuterio y otro de tritio, para producir un nuevo átomo, en este caso de helio, liberando una cantidad de energía enlace que es equivalente a la diferencia de masa entre la suma de las dos partículas iniciales y la partícula final, es decir, una energía igual a

$$E = \Delta mc^2 \quad (3.1)$$

donde  $E$  es la energía liberada,  $\Delta m$  es la variación de masa antes mencionada y  $c$  es la velocidad de la luz.

Si la fusión tiene lugar entre dos isótopos del hidrógeno, por ejemplo deuterio y tritio, el esquema de la reacción que tiene lugar es el siguiente

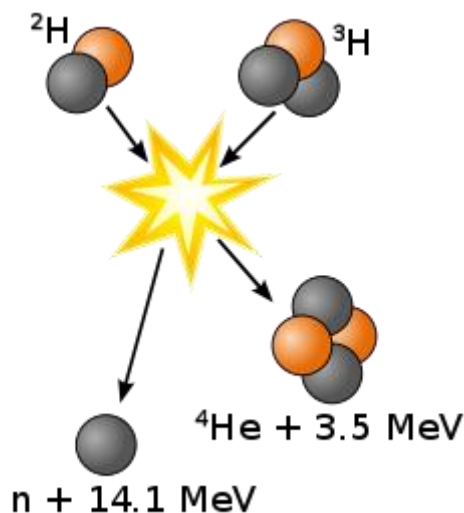
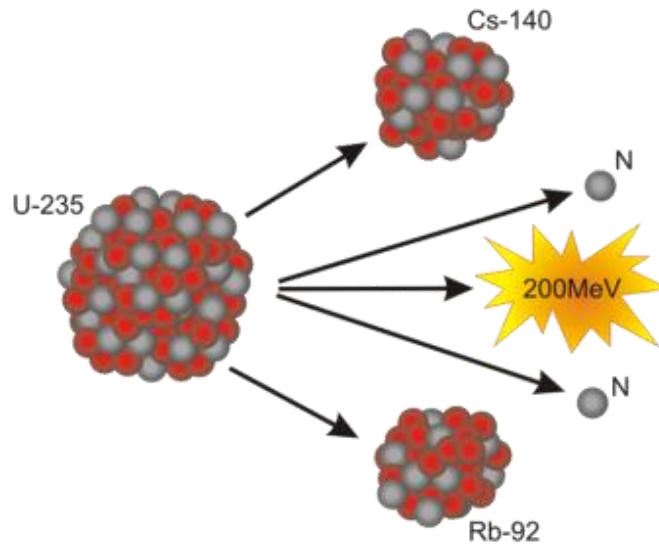


Imagen 5. Esquema del proceso de fusión entre deuterio y tritio [I. 5].



Tal y como se puede apreciar en la *Imagen 5*, este tipo de fuente de energía no produce contaminantes de tipo atmosférico ni residuos radiactivos de larga duración, ya que los únicos residuos que genera son neutrones, que pueden ser reabsorbidos con litio para fabricar tritio, que a su vez se emplea en la reacción de fusión. Por estos motivos se considera que la fusión nuclear es la energía del futuro, lo que ha motivado que, en las últimas décadas, hayan surgido numerosas iniciativas para llevar a cabo la creación de dispositivos capaces de llevar a cabo la fusión controlada y continua de núcleos ligeros de manera rentable y controlada.

No debe confundirse este método de obtención de energía con el de fisión, que es el que se utiliza actualmente en las centrales nucleares convencionales. La fusión y la fisión representan conceptos totalmente distintos: el primero, como se ha dicho, se enfoca en la unión de dos núcleos ligeros para formar un tercero más pesado; por otro lado, la fisión se enfoca en aprovechar átomos grandes, es decir, de elementos pesados como plutonio o uranio, y someterlos a condiciones que logren crear las suficientes inestabilidades en sus núcleos como para que estos se desintegren formando elementos más ligeros.



*Imagen 6.* Esquema de la fisión de un núcleo de  $U^{235}$  [I. 6].

El principal problema que presenta la fisión como fuente de energía son los residuos que produce, que presentan radiactividad durante periodos de tiempo extremadamente largos, del orden de miles de años. Por otro lado, cabe mencionar que, en el proceso de fusión, se libera más energía que en el de fisión por unidad de combustible quemado, por lo que resultaría aún más deseable desde un punto de vista de aprovechamiento.

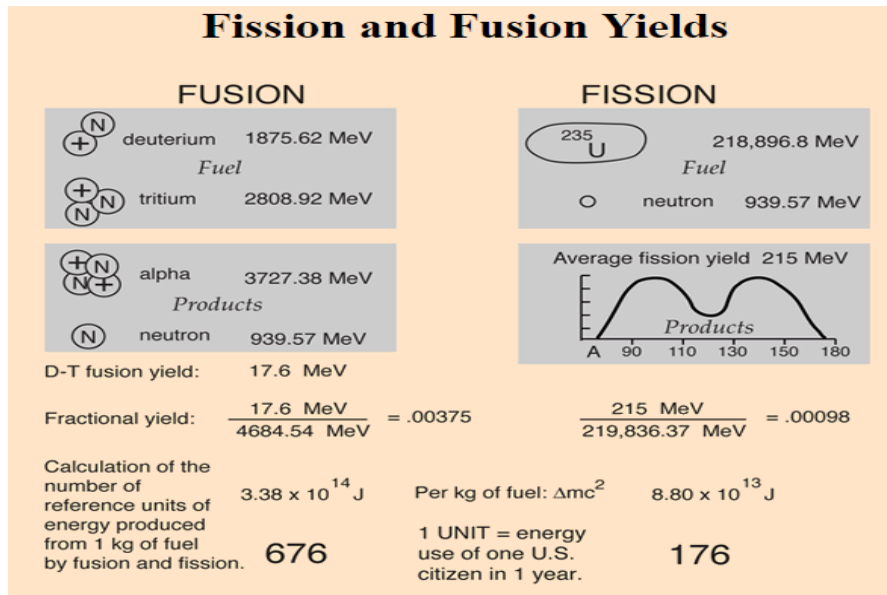


Imagen 7. Comparación de las energías obtenidas por fusión y fisión [I. 7].

Regresando a la cuestión principal, uno de los principales problemas que presenta el desarrollo de un reactor de fusión nuclear radica en que, tal y como se ha explicado, se precisa la unión de dos núcleos, que están formados por cargas positivas, por lo que hay que superar la barrera que impone la fuerza electromagnética Coulombiana y acercar los átomos hasta el punto en el que comienza a hacerse efectiva otra fuerza fundamental, la nuclear fuerte, que es la que se encarga de mantener unidos los protones dentro de un mismo átomo.

Tal y como se puede apreciar en la imagen siguiente, existen cuatro interacciones fundamentales conocidas actualmente. En cualquier tipo de fusión, se precisa superar la barrera de la fuerza electromagnética, que hace que dos cargas iguales (dos núcleos) se repelan cuando se tratan de poner en contacto. La interacción electromagnética es la segunda más fuerte y presenta un rango de acción infinito. Por otro lado, la interacción fuerte es, valga la redundancia, la más fuerte de las cuatro, solo que comienza a ser efectiva cuando las distancias entre las partículas son muy pequeñas, del orden de  $10^{-15}$ m. Cuando la distancia entre los núcleos alcanza valores próximos a este, debido a que la interacción fuerte es muy superior a la electromagnética, se produce la fusión de los núcleos.

Fundamental Forces				
<b>Strong</b>		Strength <b>1</b> Force which holds nucleus together	Range (m) <b><math>10^{-15}</math></b> (diameter of a medium sized nucleus)	Particle gluons, $\pi$ (nucleons)
<b>Electro-magnetic</b>		Strength $\frac{1}{137}$	Range (m) Infinite	Particle photon mass = 0 spin = 1
<b>Weak</b>		Strength $10^{-6}$ neutrino interaction induces beta decay	Range (m) <b><math>10^{-18}</math></b> (0.1% of the diameter of a proton)	Particle Intermediate vector bosons $W^+$ , $W^-$ , $Z_0$ , mass > 80 GeV spin = 1
<b>Gravity</b>		Strength $6 \times 10^{-39}$	Range (m) Infinite	Particle graviton ? mass = 0 spin = 2

Imagen 8. Comparativa entre las interacciones fundamentales. [I. 8]

El problema principal es, pues, conseguir aportar al sistema la energía suficiente como para que entre en juego la interacción fuerte. En las estrellas, la fusión se produce gracias a una tercera interacción, la gravitatoria. A pesar de ser la más débil de todas, dadas las grandes masas de las estrellas, se supera la barrera de la fuerza electromagnética y la estrella se “enciende<sup>1</sup>”. Por otro lado, si la masa no es lo suficientemente grande, como en el caso de astros como Júpiter, la estrella no llega a “encenderse” y se mantiene como un planeta.

Para poder realizar un aprovechamiento a nivel industrial de la energía de fusión de forma rentable, dado que no se puede disponer de la fuerza gravitatoria para acerca los núcleos entre sí, se debe proporcionar la energía al sistema aportando condiciones de presión y temperatura muy superiores a las que se dan en muchas estrellas. Cuando se lleva la materia a condiciones de este tipo, naturalmente ésta pasa a estado de plasma. Es en este punto donde surge uno de los principales problemas de fusión nuclear: el plasma se encuentra en unas condiciones tan extremas que su manipulación resulta extremadamente compleja. Atendiendo a la forma de obtener y confinar el plasma, existen numerosos tipos de reactores que emplean los más diversos tipos de tecnología, siendo los diseños más avanzados, actualmente, los de confinamiento magnético y los de confinamiento inercial. A continuación, se presenta una breve explicación de algunos de los diseños que parecen más prometedores.

<sup>1</sup>El término encenderse resulta especialmente preciso en tanto que en el momento en que se comienzan a dar procesos de fusión, el astro en sí comienza a emitir radiación electromagnética.

### 3.2.1. Reactores de confinamiento magnético

Los reactores que confinan el plasma mediante campos magnéticos fueron diseñados paralelamente a lo largo del siglo XX por soviéticos y estadounidenses. Los primeros plantearon el modelo *Tokamak*, mientras que los segundos el *Stellarator*. En cualquier caso, la idea general es la misma: conseguir confinar combustible nuclear en un anillo hueco mediante un campo magnético toroidal para, posteriormente, llevarlo al estado plasma mediante calentamiento por microondas y haces de neutrones para, finalmente, fusionarlo.

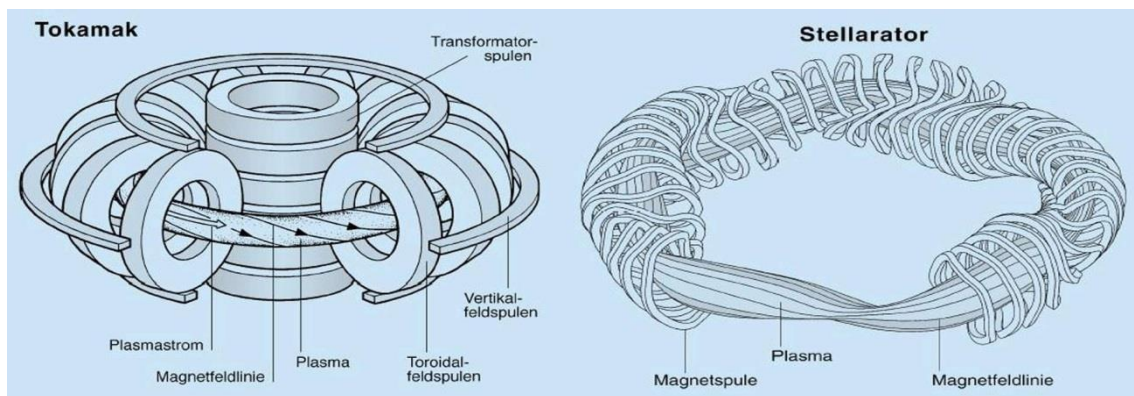


Imagen 9. Comparación de los tipos de reactores por confinamiento magnético [I. 9].

En ambos casos, el objetivo es mantener la mayor cantidad de tiempo posible el combustible en estado plasma para lograr que se produzcan choques eficaces entre los iones del medio, es decir, choques que fusionen núcleos.

En las últimas décadas se han producido avances en la tecnología de confinamiento magnético que han hecho que una parte de la comunidad científica opine que este tipo de reactores resultan demasiado complejos como para poder lograr controlar todas las inestabilidades del sistema. A pesar de ello, existen numerosas iniciativas a nivel internacional que apuestan por este tipo de tecnología, dentro de las cuales cabe mencionar el proyecto ITER, un reactor de de tipo *Tokamak* en el cual participan numerosos países y que aspira a obtener su primer plasma para 2025 y las primeras operaciones con deuterio y tritio en 2035.

### 3.2.2. Reactores de confinamiento inercial

Este tipo de reactores se diferencia de los anteriores en que emplea haces de iones o rayos láser para incrementar la densidad de un blanco, denominado *hohlraum*, que contiene el combustible nuclear. El *hohlraum* está formado por numerosas capas de varios elementos, siendo el núcleo del mismo el combustible en sí. Las capas más externas, de forma cilíndrica, están compuestas por oro y se encargan de hacer que los diferentes haces impacten correctamente sobre la capsula de combustible que albergan en su interior. Por

otro lado, la cápsula de combustible se encuentra recubierta por una capa compuesta por otros elementos.

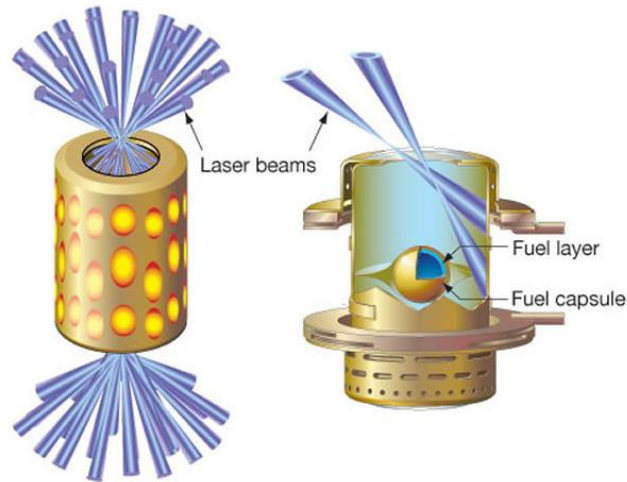


Imagen 10. Detalle de las partes del *hohlraum* [I. 10].

El proceso que tiene lugar es el siguiente: una serie de haces apunta hacia la superficie del blanco de modo que, gracias a una serie de lentes meticulosamente dispuesta, llegan todos al unísono a la superficie de *hohlraum*. Los haces inciden de forma homogénea y sobre toda la superficie del blanco. Dada la alta energía de los haces que inciden sobre el *hohlraum*, las capas superficiales del mismo se convierten en un plasma que explota. Gracias al principio de conservación del momento, la explosión de las capas externas del *hohlraum* genera una respuesta de igual fuerza y sentido contrario que comprime el combustible hasta que sus átomos se fusionan.

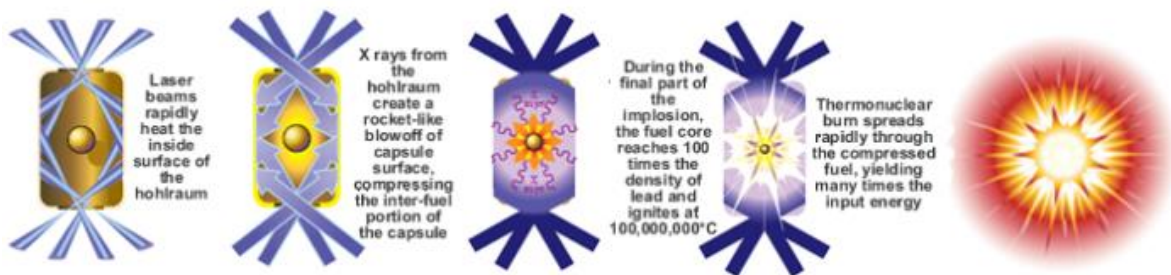


Imagen 11. Esquema conceptual del proceso de fusión [I. 11].

La creación de haces con energía suficiente como para poder fusionar átomos de este modo requiere de grandes cantidades de energía, a pesar de ello, se prevé que los reactores de este tipo produzcan entre 10 y 100 veces más de la energía que requieren para funcionar. Además, el sistema de lentes que los dirigen hacia el objetivo requiere de una gran superficie, por lo que las instalaciones resultan significativamente grandes. A continuación, se presentan de manera general las diferentes partes que requiere un complejo de estas características, concretamente del NIF.

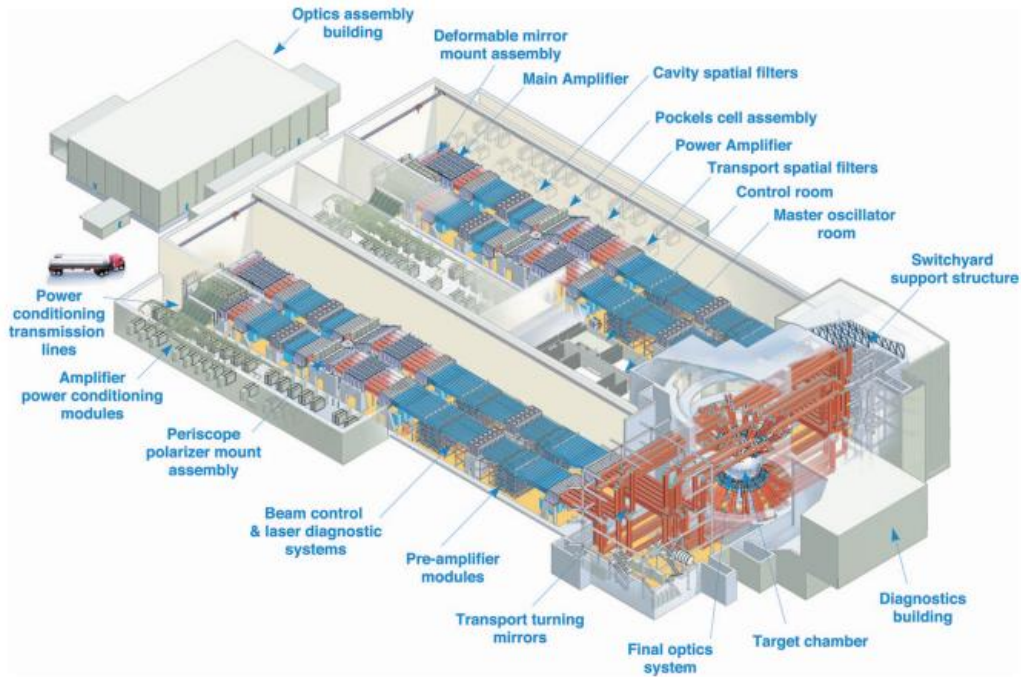


Imagen 12. Esquema de las instalaciones de *National Ignition Facility* (NIF) [I. 12].

Existen numerosas iniciativas de reactores de este tipo a nivel global, aunque cabe destacar que algunas de las principales son el NIF, ubicado en Estados Unidos, y el *Mégajoule*, en Francia.

Como conclusión a los tipos de reactores nucleares, se presenta la imagen siguiente, donde se puede apreciar el orden de magnitud de temperatura y densidad del plasma en cada caso, así como algunos ejemplos de distintas estrellas, a modo de comparación.

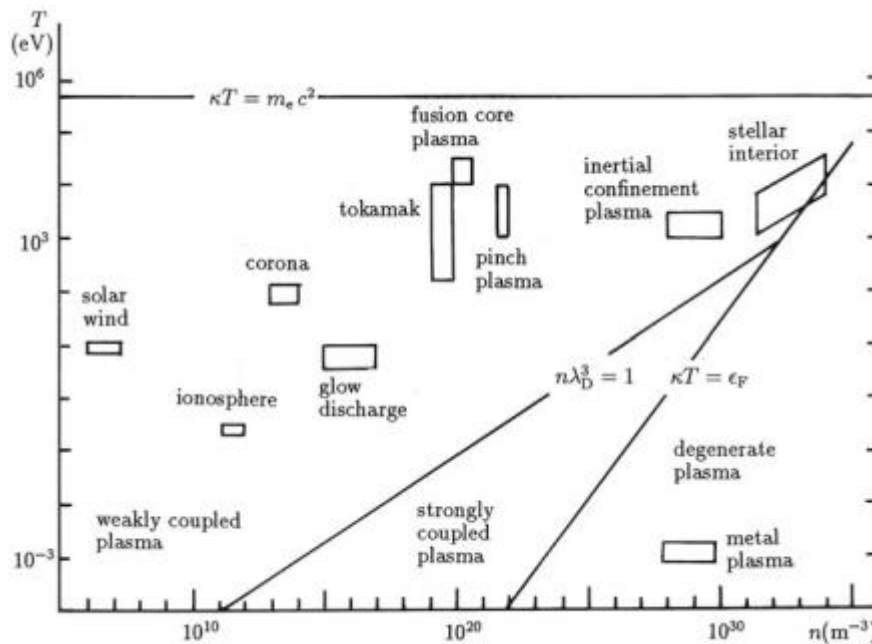


Imagen 13. Comparación temperatura (eV) frente a densidad electrónica ( $m^{-3}$ ) [I. 13].

Por otro lado, independientemente de la tecnología empleada para llevar a cabo la fusión, la instalación recupera la energía de forma muy parecida a la de cualquier central energética actual: el calor obtenido por la fusión de los núcleos se emplea para calentar agua, que se hace pasar por una turbina donde se produce la transformación de energía mecánica en energía eléctrica. A continuación se presenta un esquema del proceso que se acaba de describir:

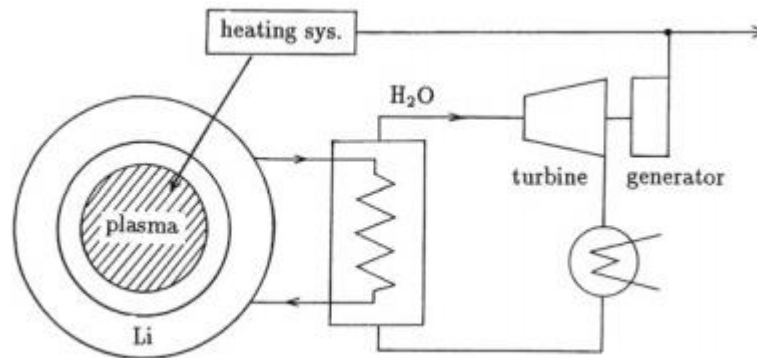


Imagen 14. Obtención de energía eléctrica en un reactor de fusión nuclear [I. 13].

Además del problema del confinamiento del plasma, existen numerosas dificultades más, siendo uno de los principales el hecho de que son muy pocos los métodos existentes para llevar a cabo una medida de las condiciones del plasma. Esto provoca que el conocimiento de las propiedades termodinámicas, físicas y químicas del plasma sea, en muchos casos, escueto o nulo. En general, en la actualidad uno de los únicos métodos que existe es emplear un lector de infrarrojos, lo que permite establecer la temperatura en la superficie del plasma sin saber nada de la temperatura en su interior, puesto que un plasma denso es opaco a casi cualquier tipo de radiación, exceptuando los rayos X con una longitud de onda determinada. En este proyecto se presenta un método diferente que incluye una perturbación del sistema: el cálculo del poder de frenado (*Stopping Power*) de un proyectil pesado y cargado. Más adelante se explicarán en detalle las características y ventajas de este método.

Una vez planteados estos conceptos básicos, se está en condiciones de abordar el planteamiento concreto del problema.

## 4. Planteamiento del problema

---

Dadas las características del trabajo, a pesar de que posteriormente se normalizarán las expresiones, se trabaja *a priori* con el sistema cegesimal de unidades (ergio, segundo, Kelvin, centímetro y gramo), ampliamente aplicado en física teórica. Por otro lado, como elemento de separación decimal se empleará un punto“.”.

Primeramente, se presentan los diferentes parámetros relevantes que se precisan para construir el edificio matemático necesario para alcanzar la solución al problema.

### 4.1. Constantes físicas

-Carga del electrón:

$$e^2 = 4.803204 \cdot 10^{-10} \quad \{erg \cdot cm\}$$

-Masa del electrón:

$$m_e = 9.1093829 \cdot 10^{-28} \quad \{g\}$$

-Masa del protón:

$$m_i = 1.672621 \cdot 10^{-24} \quad \{g\}$$

-Radio de Bohr:

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.5292 \cdot 10^{-8} \quad \{cm\}$$

-Constante de Planck reducida:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05457 \cdot 10^{-27} \quad \{erg \cdot s\}$$

-Constante de Boltzmann:

$$k_B = 1.3806488 \cdot 10^{-16} \quad \{erg/K\}$$



-Número atómico. En general, en este proyecto se trabajará con plasmas de hidrógeno, por lo que se tomará que

$$Z = 1$$

## 4.2. Parámetros termo- y electrodinámicos

-Temperatura del sistema. Representa la energía cinética de las partículas del sistema:

$$\beta = \frac{1}{Tk_B} \quad \{erg^{-1}\} \quad (4.1)$$

-Radio de Wigner-Seitz. Se define como el radio de una esfera tal que, en las condiciones del sistema, albergaría en su volumen un electrón.

$$a = r_s \cdot a_B \quad \{cm\} \quad (4.2)$$

donde  $r_s$  es el parámetro de Bruenecker que, en general, es un dato de partida del problema, dado que es un parámetro adimensional que caracteriza el sistema electrónico.

-Densidad numérica electrónica. Representa la cantidad de electrones existente por unidad de  $cm^3$ .

$$n = \frac{3}{4\pi a^3} \quad \{cm^{-3}\} \quad (4.3)$$

En el caso del presente estudio, dado que se trabaja con plasmas globalmente neutrales, se cumple la relación

$$\sum_i Z_i n_i = n_e$$

donde, en plasmas de hidrógeno, se puede asumir que  $n_e = n_i = n$ . Si el plasma un fuese de hidrógeno, dado que  $Z$  no tiene valor numérico “uno”, la relación es

$$n_i = \frac{n_e}{Z}$$

-Número de ondas de Fermi (*Fermi wave number*). Representa el número de electrones en el estado paramagnético del plasma, es decir, en el estado en el cual el número de electrones en dos estados de espín se obtiene por la fórmula

$$\begin{aligned}
 k_F &= (3\pi^2 n_e)^{\frac{1}{3}} = \left(3\pi^2 \frac{3}{4\pi a^3}\right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{a} = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{r_s a_B} = \\
 &= 1.9191583 \cdot \frac{1}{r_s 0.5292 \cdot 10^{-8}} = \frac{3.627 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}}{r_s} \rightarrow \\
 &\rightarrow k_F = \frac{3.627 \cdot 10^8}{r_s} \quad \{\text{cm}^{-1}\} \quad (4.4)
 \end{aligned}$$

-Parámetro de acoplamiento del plasma. Es un parámetro adimensional que se utiliza para caracterizar los sistemas de partículas cargadas e inmersas en un medio uniforme de partículas de la carga opuesta (iones y electrones), es decir, un plasma.

$$\Gamma = \frac{\beta e^2}{a} \quad (4.5)$$

Es uno de los parámetros fundamentales en el estudio de los plasmas puesto que, en función de los valores que adopta, se puede clasificar un plasma según su grado de acoplamiento, lo que permite realizar el tratamiento adecuado del mismo. De este modo, si se trata de plasmas fuertemente acoplados, como en el presente proyecto, el valor de  $\Gamma > 1$  y el sistema comienza a exhibir muestras de correlaciones microscópicas características de líquidos. Los plasmas con este tipo de acoplamiento presentan en general temperaturas más bajas y densidades más altas que aquellos débilmente acoplados. Se pueden encontrar en los experimentos de fusión inercial, atmósferas de estrellas de neutrones o enanas blancas.

Por otro lado, si  $\Gamma \leq 1$ , el plasma presenta poco acoplamiento y su comportamiento es más parecido al de un gas. La temperatura es más alta y la densidad menor, lo que hace que el plasma sea más difuso que cuando presenta acoplamiento fuerte. Se pueden encontrar plasmas con estas características en reactores de fusión por confinamiento magnético y plasmas espaciales o de ionosfera.

-Energía de interacción promedio entre iones:

$$\phi(k) = \frac{4\pi Z^2 e^2}{k^2} \quad \{\text{erg}\} \quad (4.6)$$

-Frecuencia de resonancia del plasma. Es la frecuencia que adoptan los electrones libres en el interior de la materia ionizada. El término fue acuñado por N. Bohr en [11]:

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{m_e}} \quad \{s^{-1}\} \quad (4.7)$$

-Energía de Fermi. Es la energía del nivel más alto ocupado por un electrón en un sistema cuantizado cuando la temperatura de dicho sistema es de cero grados Kelvin.

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} \quad \{erg\} \quad (4.8)$$

-Grado de degeneración de Fermi. Este parámetro resulta importante a la hora de estudiar el grado de comportamiento cuántico de un plasma. Cuando  $\theta < 0.1$ , los electrones se encuentran en un estado de casi absoluta degeneración, es decir, casi totalmente cuantizados. Si  $0.1 \leq \theta \leq 10$  el grado de degeneración se considera medio, es decir, los efectos cuánticos y clásicos (térmicos) coexisten en el sistema. Finalmente, si  $\theta > 10$  se considera que el plasma prácticamente no presenta degeneración y se comporta como un fluido clásico, tal y como establece S. Ichimaru en [5].

$$\theta = \frac{rs}{1.84159\Gamma} \quad (4.9)$$

-Velocidad de Fermi.

$$v_{th} = \sqrt{\frac{1}{\beta m_e}} \quad \{erg^{-\frac{1}{2}} \cdot g^{-\frac{1}{2}}\} \quad (4.10)$$

### 4.3. Poder de frenado (*Stopping Power*)

En los últimos años, nuevas evidencias han hecho que un importante sector de la comunidad científica se planteen el hecho de que la fusión de átomos mediante confinamiento magnético no sea la mejor solución al problema de alcanzar la fusión termonuclear controlada y mantenida. Este hecho ha motivado un descenso en la cantidad de iniciativas de desarrollo de reactores con estas características. Aun así, siguen en marcha numerosos experimentos a nivel internacional, como por ejemplo el ITER, ya que la recompensa de la fusión nuclear es demasiado grande como para no considerar cualquier

posibilidad, y más aún cuando todavía no existe la suficiente evidencia experimental y teórica sobre el tema como para descartar por completo la vía del confinamiento magnético.

En cualquier caso, los avances en el desarrollo de reactores nucleares de las últimas décadas ha motivado que se produzca un incremento en el interés del estudio de los fenómenos relacionados con la interacción de las partículas con la materia, ya que, dado que el primer muro de contención del reactor, ya sea de confinamiento magnético o inercial, se verá sometido a flujos de radiación altamente energéticos que pueden alterar las propiedades del mismo, lo que podría llegar a contaminar el plasma y/o erosionar el reactor. Además, se contempla como alternativa al confinamiento magnético la utilización de haces de partículas rápidas y pesadas como medio de fusión por confinamiento inercial, que parece ser una alternativa más asumible para la tecnología actual.

El *Stopping Power* o poder de frenado es uno de los efectos que caracteriza la interacción de partículas cargadas con la materia. El término hace referencia a la energía que va perdiendo una partícula (el proyectil) por unidad de longitud al atravesar un medio determinado.

El estudio de la interacción de las partículas pesadas con la materia se remonta a 1906, cuando Ernest Rutherford observó la dispersión de partículas  $\alpha$  al atravesar una lámina de oro. Numerosos investigadores del más alto nivel han seguido esta línea de estudio: Niels Bohr planteó en 1913 una ecuación que calculaba el *Stopping Power* considerando que los átomos de la materia que recibía el haz de proyectiles se comportaban como osciladores clásicos [11]. Más adelante, H. Bethe [12] llevó a cabo un estudio mecano-cuántico consistente que le permitió obtener una fórmula que permitía calcular la pérdida de energía de la partícula entrante por unidad de longitud

$$\frac{dE}{dx} = \left( \frac{Z_p e \omega_p}{v} \right)^2 \ln \left( \frac{2m_0 M_p v}{(m_0 + M_p) \omega \hbar} \right) \quad (4.11)$$

donde, respectivamente,  $v$ ,  $Z_p e$ , y  $M_p$  son la velocidad, carga y masa del proyectil, mientras que  $m_0$  y  $\omega$  representa la masa del átomo y la autofrecuencia de sus electrones. En el caso de que el plasma transpire electrones, se debe sustituir en la ecuación  $m_0$  por la masa del electrón,  $m_e$ , y  $\omega$  por la autofrecuencia del plasma,  $\omega_p$ , tal y como estableció I. A. Larkin en [13]. La ecuación (4.11) no considera la interacción de los iones con los electrones en la diana y, dado que los electrones de esta son los que frenan el proyectil, resulta interesante tener en cuenta esta característica. Bajo estas premisas, D. Ballester e I. Tkachenko [14] obtuvieron una relación que consideraba este tipo de interacción

$$\frac{dE}{dx} = \left( \frac{Z_p e \omega_p}{v} \right)^2 \ln \left( \frac{2m_e v^2}{\hbar \omega_p \sqrt{(1 + H)}} \right) \quad (4.12)$$

donde  $H$  es una función que establece las interacciones entre iones y electrones en la diana. El resto de parámetros ya se han descrito en la ecuación (4.11). Los resultados de esta ecuación resultan interesantes, por lo que se utilizarán como comparativa al modelo presentado en este proyecto.

En el caso de que el proyectil sea una partícula cargada que viaja a gran velocidad a través de un sólido, las pérdidas de energía que este experimenta se deben a que, tal y como establecen L. D. Landau y E. M. Lifshitz en [15]; a su avance, produce la ionización<sup>2</sup> de los átomos que encuentra en su avance a través del blanco. Si la materia de la diana ya se encuentra totalmente ionizada y acoplada, lo que se aprecia es que la energía que se transfiere por la partícula se emplea en excitar las frecuencias características del sistema, es decir, a los plasmones, llevando a cabo un fenómeno de resonancia.

Por otro lado, a nivel macroscópico, el efecto que se percibe es el de una polarización del medio por efecto de la partícula cargada entrante en este, es decir, se aprecia cómo el medio se distribuye de forma ordenada, de modo que surgen zonas con mayor cantidad de partículas cargadas eléctricamente con un signo u otro donde, previamente, solo se apreciaba un sistema neutro.

Con el fin de realizar un enfoque adecuado a la solución de problemas de *Stopping Power*, Enrico Fermi sugirió en 1924 llevar a cabo un tratamiento basado en las propiedades de la función dieléctrica del medio. Más adelante, en 1940, el propio Fermi planteó la solución de problemas de *Stopping Power* que involucraban partículas a velocidades relativistas, las cuales generaban en el sistema perturbaciones considerables.

Las pérdidas de energía en sistemas de estas condiciones resultan considerablemente superiores a las que se producen con proyectiles lanzados a velocidades no relativistas. De cualquier modo, en ambos casos las pérdidas de energía se corresponden con valores significativamente pequeños, lo que no quita que la pérdida de energía sea calculable y permita aportar información relevante acerca de las características del plasma.

En el presente proyecto se considerará un tratamiento perturbativo<sup>3</sup> del sistema que empleará la premisa de que la partícula entrante es comparativamente más pesada que las partículas del medio en que entra, de modo que la pérdida de energía del proyectil es comparativamente más pequeña que las pérdidas del medio, de modo que se comparta como un punto cargado que se desplaza a velocidad  $v$ . Por ejemplo, puede considerarse un protón.

<sup>2</sup>Cabe destacar que las pérdidas de energía no se deben exclusivamente a las pérdidas por ionización total, sino que, además de a estas, se deben también a la excitación de electrones en niveles discretos de los átomos del medio, es decir, a la energía invertida en elevar el nivel energético de electrones de los átomos del medio sin llegar a separarlos por completo del átomo.

<sup>3</sup>El hecho de que el tratamiento sea perturbativo se debe a que se altera el sistema mediante un proyectil, lo cual produce una perturbación en el mismo, aunque ésta sea despreciable.

Teniendo en cuenta todas estas consideraciones, en 1954 J. Lindhard dedujo en [16] la ecuación que definía las pérdidas de energía que sufría una partícula bajo las citadas premisas. El resultado al que llegó fue el siguiente:

$$\left[\frac{dE}{dx}\right]^{pol} = \frac{2(Z_p e)^2}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} \omega^2 \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \quad (4.13)$$

donde, nuevamente,  $v$  y  $Z_p e$  representan la velocidad y la carga del proyectil. Por otro lado,  $\mathcal{L}(k, \omega)$  representa la función de pérdidas o *loss function*, incluye la función dieléctrica y se definirá posteriormente.

Con el paso del tiempo, numerosos investigadores han seguido los pasos de Lindhard y han calculado el *Stopping Power*, estudiando para ello de diversas formas de obtener la función dieléctrica del plasma y, con ello, la *loss function*. En el presente proyecto, se presenta un método de cálculo de la *loss function* distinto al planteado en 1954. Este método resulta más preciso y sencillo que el empleado por Lindhard y, al menos, más sencillo que otros más actuales.

#### 4.3.1. Otras aplicaciones del *Stopping Power*

Dejando a un lado las aplicaciones anteriormente citadas del cálculo del *Stopping Power*, resulta interesante resaltar la aplicabilidad del método en Medicina: un equipo de investigadores alemanes (GSI y la Universidad de Darmstadt) ha planteado la eliminación de tumores en zonas de difícil acceso empleando como proyectiles iones de carbono. La relación de esta técnica con el *Stopping Power* radica en que, dado que esta requiere de precisión milimétrica para evitar daños en zonas sanas del organismo, resulta fundamental calcular la pérdida de energía que experimenta el proyectil según avanza, con el fin de alcanzar el blanco con la energía suficiente como para destruirlo.

Para este tipo de aplicaciones resulta también fundamental el cálculo del *straggling*, término que hace referencia a la precisión del alcance del haz. Este parámetro resulta fundamental, pues se debe entender que se dispara un haz de partículas y que, por lo tanto, estas alcanzan una zona del blanco, de modo que no todas las partículas penetran del mismo modo en el mismo.

En cualquier caso, el método resulta significativamente más eficaz a la hora de llevar a cabo tratamientos contra tumores, especialmente en zonas de difícil acceso, ya que permite llevar a cabo una destrucción absolutamente localizada en la zona del tumor. Este proceso emplea como proyectiles iones de carbono acelerados hasta un 70% de la velocidad de la luz mediante campos magnéticos [17].



Imagen 15. Instalación en la que se acelerarán los iones de carbono [I. 14].

#### 4.4. La función de pérdidas (*loss function*)

La *loss function* es realmente una función creada *ex profeso* para el cálculo del *Stopping Power*. Se trata de una función de correlación estrechamente relacionada con la pérdida de energía, de este aspecto proviene su nombre. Se define de la manera siguiente:

$$\mathcal{L}(k, \omega) = -\frac{\text{Im}[\epsilon^{-1}(k, \omega)]}{\omega} \quad (4.14)$$

donde  $\text{Im}[\epsilon^{-1}(k, \omega)]$  representa la parte imaginaria de la función dieléctrica inversa del plasma. Se trata de una función par y estrictamente no negativa.

Atendiendo a la ecuación (4.14), resulta evidente que para obtener la *loss function* se debe calcular previamente  $\text{Im}[\epsilon^{-1}(k, \omega)]$  que, naturalmente, será la primera cuestión que se tratará.

Como inciso, cabe mencionar que el teorema de la fluctuación-disipación (*Fluctuation Dissipation Theorem* o FDT), es una función de correlación que está relacionada con la pérdida de energía, tal y como G. Mahan explica en [18]. Mediante la aplicación de FDT se puede calcular el factor de estructura dinámico de un plasma (*Dynamic Structure Factor* o DSF), es decir  $S(k, \omega)$ , que es una función de gran importancia en la física de plasmas, ya que permite estudiar la evolución temporal de la dispersión de la materia plasmática ante una radiación incidente. Por otro lado, cabe decir que el DSF se puede relacionar mediante FDT con la parte imaginaria de la función dieléctrica y la *loss function* dado que, como su nombre indica, el FDT establece la disipación, es decir, las pérdidas de energía. Como analogía se puede plantear la pérdida de energía por efecto Joule de un cable

atravesado por una corriente. Este es un resultado teórico clásico. La relación anteriormente citada es clásica y, tal y como plantea A. Askaruly en [19] tiene la forma siguiente

$$S(k, \omega) = \frac{\mathcal{L}(k, \omega)}{\pi\beta\phi(k)} \quad (4.15)$$

El resultado anterior proviene del caso cuántico, obtenido por L. D. Landau y E. M. Lifshitz en [20]

$$Im \epsilon^{-1}(k\omega) = -\pi\phi(k)(1 - \exp(-\beta\hbar\omega))S(k, \omega)/\hbar \quad (4.16)$$

Para obtener la ecuación del caso clásico (4.15), basta con realizar el límite de (4.16) cuando  $\hbar \rightarrow 0$ .

En cualquier caso, en este proyecto no se opta por obtener el DSF para obtener la parte imaginaria de la función dieléctrica, sino que se reconstruirá a partir del método de momentos la función dieléctrica inversa completa para, posteriormente, obtener su parte imaginaria y, por último, la *loss function* y el *Stopping Power*.

De este modo, se pasará de la ecuación de la función dieléctrica inversa en forma integral a una ecuación más manejable con la forma siguiente:

$$\epsilon^{-1}(k, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2 [ih_0(k) + \omega]}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0(k)[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} \quad (4.17)$$

Mientras que la expresión de la parte imaginaria de la inversa de la función dieléctrica es, tal y como se demostrará más adelante, la siguiente:

$$-Im \epsilon(k, \omega) = \frac{\omega_p^2 \omega h_0(k) (\omega_2^2(k) - \omega_1^2(k))}{[\omega(\omega^2 - \omega_2^2(k))]^2 + h_0^2(k) (\omega^2 - \omega_1^2(k))^2} \quad (4.18)$$

donde  $\omega_1(k)$  y  $\omega_2(k)$  son las frecuencias características del plasma,  $\omega$  es la frecuencia de oscilación de las partículas del plasma (en general iones y electrones),  $\omega_p$  es la frecuencia característica del plasma. Del parámetro  $h_0(k)$  se hablará posteriormente.

La variable  $k$  tiene unidades de  $cm^{-1}$  y representa lo que se conoce como dispersión espacial, por lo que puede tener tanto componente transversal como longitudinal, aunque en el caso del presente estudio solo se trabajará con la componente longitudinal, dado que no existe una dirección privilegiada en el seno del medio, en tanto que este es uniforme e isótropo, por lo que no existe ningún punto en el medio que tenga unas propiedades distintas de otro aledaño al mismo. Esta propiedad se cumple tanto en plasmas de un componente (*One Component Plasmas* o OCP) como en plasmas de dos componentes (*Two Component Plasmas* o TCP), dado que, efectivamente, al no trabajarse con campos



magnetizados, la forma de la función  $Im [\epsilon^{-1}(k, \omega)]$  puede caracterizar en OCP y TCP. Más adelante, se demostrará que las frecuencias características  $\omega_1(k)$  y  $\omega_2(k)$  difieren según se trate OCP o TCP.

#### 4.5. La fórmula de Nevanlinna y el método de momentos

Lo que se conoce como método de momentos, tal y como establecen I. M. Tkachenko y otros en [21] se define como el problema de hallar una función no decreciente de variación acotada  $\sigma(x)$  con  $x \in [0, +\infty[$  de modo que sus momentos formen un conjunto de números proporcionados *a priori*. La ecuación de un momento es, por el problema de Hamburger, la siguiente:

$$C_\nu(x) = \int_0^{\infty} x^\nu d\sigma(x) \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (4.19)$$

Si la distribución  $\sigma(x)$  es diferenciable y su derivada es una función par, todos los momentos impares se anulan.

En particular, para el caso del presente problema, dado que la función que se trata de reconstruir es la dieléctrica (intrínsecamente relacionada con la *loss function*):

$$C_\nu(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^\nu \mathcal{L}(k, \omega) d\omega; \quad \nu = 0, 2, 4 \dots \quad (4.20)$$

Cabe destacar que el término  $k$  hace referencia exclusivamente a un parámetro de la función  $\mathcal{L}(k, \omega)$ , por lo que no tiene más relevancia para el estudio de la ecuación anterior. En cualquier caso, desde este punto en adelante, la definición que se utilizará será la (4.20).

El problema que se acaba de presentar fue planteado por primera vez por T. J. Stieltjes [22] y [23] hace más de un siglo. Numerosos investigadores han continuado su trabajo y desarrollado más y más el campo y sus aplicaciones desde entonces. El método en sí permite establecer los denominados momentos, también conocidos como *sum rules*, que permiten establecer nuevas leyes de conservación en las ecuaciones que involucran, esto es, leyes de conservación que se basan en mantener las relaciones de los propios momentos invariantes.

De este modo, el problema de momentos es efectivamente equivalente al problema de encontrar una función compleja que haga coincidir punto a punto dos dominios conexos [21], es decir permite establecer una relación entre una función matemática y un fenómeno de la naturaleza. Por así decirlo, se trata de un método de interpolación extremadamente potente.

La solución del problema se aborda aquí mediante el algoritmo de Nevanlinna y de Hamburger truncado (El problema de Hamburger, sin entrar en demasiados detalles, resuelve el problema para un número infinito de momentos y estudiándolo en un caso truncado), que establece relaciones de correspondencia uno a uno entre las funciones cuyos momentos sean conocidos, tal y como estableció R. Nevanlinna en [24] y [25], que tiene la forma siguiente:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\sigma(x)}{x-z} = \frac{E_{n+1}(z) + Q_n(z)E_n(z)}{D_{n+1}(z) + Q_n(z)D_n(z)} \quad (4.21)$$

Para el caso del presente problema, la ecuación es, *mutatis mutandis*, análoga

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathcal{L}(x, \omega)}{x-z} = \frac{E_3(z, k) + Q'_2(k, z)E_2(z, k)}{D_3(z, k) + Q'_2(k, z)D_2(z, k)} \quad (4.22)$$

Esto no resulta una simplificación del problema, dado que, en lugar de hallar la *loss function*, se debe encontrar la función  $Q_2(k, z)$ , lo cual no es en absoluto trivial.

La función  $Q_2(k, z)$  es una función analítica con la parte imaginaria negativa en el semiplano  $z$  superior imaginario

$$\text{Im}(Q_2(k, \omega + i\varphi)) > 0, \quad \varphi > 0 \quad (4.23)$$

y, además,  $Q_2(k, z)$  satisface la condición restrictiva de que

$$\frac{Q_2(k, z)}{z} \xrightarrow{z \uparrow \infty} 0, \quad \text{Im } z > 0 \quad (4.24)$$

El hecho de emplear las soluciones del problema de Hamburger truncado implica que se utilizan únicamente los cinco primeros momentos y, dado que la función que los define (4.20) es par, los momentos impares se anulan por lo que se trabaja únicamente con  $C_0(k)$ ,  $C_2(k)$  y  $C_4(k)$ . En el caso de que se estudien plasmas de dos componentes (*Two Component Plasmas* o TCP), los momentos superiores al de cuarto orden divergen, tal y como demostraron Perel y Eliashberg. Por otro lado, en plasmas de un componente (*One Component Plasmas* u OCP), se sabe que los momentos de orden superior a cuatro no divergen y, en general, existen en una cantidad infinita. A pesar de esto, resultan ambiguos y difíciles de tratar, tanto que su cálculo tal vez resulte inviable en la actualidad, tal como establece A. Askaruly en [19]. Esto resulta evidente cuando se estudia el caso del momento de orden cuatro, que ya resulta significativamente complejo y requiere de numerosos esfuerzos para obtenerlo.

Por otro lado, el método de momentos permite construir características dinámicas como la *loss function* en términos de las frecuencias características del plasma. Estas frecuencias se denominan  $\omega_1(k)$  y  $\omega_2(k)$ , y se obtienen a partir de las definiciones concretas de los momentos, considerando su estudio dimensional. Las frecuencias características  $\omega_1(k)$  y  $\omega_2(k)$  se obtienen de forma inmediata a partir de los momentos calculados anteriormente debido a que, al tratarse de frecuencias, deben presentar unidades de Herzio, o lo que es lo mismo,  $s^{-1}$ . De este modo, dado que los momentos  $C_0(k)$ ,  $C_2(k)$  y  $C_4(k)$  presentan respectivamente las unidades de, adimensional,  $s^{-2}$  y  $s^{-4}$ , se construirán las funciones  $\omega_1(k)$  y  $\omega_2(k)$  manteniendo la consistencia dimensional de funciones que definen frecuencias, esto es

$$\omega_1(k) = \sqrt{C_2(k)/C_0(k)} \quad \{s^{-1}\} \quad (4.25)$$

$$\omega_2(k) = \sqrt{C_4(k)/C_2(k)} \quad \{s^{-1}\} \quad (4.26)$$

El momento  $C_0(k)$  se calculará de forma precisa más adelante, mientras que del  $C_4(k)$  se hablará posteriormente, pero, como se puede intuir, presentan la forma y dimensión siguientes:

$$C_0(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \quad \{s^{-0}\} \quad (4.27)$$

$$C_2(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \rightarrow C_2(k) = \omega_p^2 \quad \{s^{-2}\} \quad (4.28)$$

$$C_4(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^4 \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \quad \{s^{-4}\} \quad (4.29)$$

En referencia al momento  $C_2(k)$ , tal y como se puede apreciar en (4.28), se presenta directamente su valor exacto. Esta *sum rule* se puede encontrar en [26], donde fue calculada por I. M. Tkachenko y otros; y su desarrollo no se incluirá en el presente proyecto, ya que excede por mucho la dificultad del mismo.

#### 4.6. Procedimiento

En resumen y de manera aclaratoria, el procedimiento que se llevará a cabo para la resolución del problema será fundamentalmente la siguiente: primero se reconstruye la función dieléctrica inversa. Para ello, se emplea la fórmula de Nevanlinna. Una vez reconstruida la función dieléctrica inversa, se está en condiciones de obtener su parte imaginaria y, con esta, la *loss function*. El término  $h_0(k)$  todavía no tendrá un valor concreto asignado, por lo que se calculará igualando a cero la derivada segunda de *loss function* respecto a  $\omega$  cuando  $\omega = 0$ . Con esto se obtendrá un valor para el parámetro  $h_0(k)$ , que es el valor estático de la función  $Q_2(k, z)$  y será la última pieza que reste para la reconstrucción total de la *loss function*.

Una vez realizada esta reconstrucción, se procede finalmente al cálculo exacto de los momentos, con los cuales se obtienen las expresiones exactas de las frecuencias características  $\omega_1(k)$  y  $\omega_2(k)$ , tanto para OCP como para TCP. Tras haber calculado todas estas funciones, se puede abordar el cálculo del *Stopping Power*, que no presenta más dificultad que la aplicación de la fórmula de Lindhard, y la representación de la misma, tal y como se mostrará más adelante.

## 5. Solución del problema

### 5.1. Reconstrucción de la función dieléctrica inversa.

*Grosso modo*, las relaciones de Kramers-Kronig permiten relacionar la parte imaginaria o la real de una función con su parte real o imaginaria, respectivamente. Desde un punto de vista más conceptual se fundamentan en el principio de causalidad de la reacción del sistema a una perturbación externa, lo que permite aportar información acerca de las características que debe presentar una función de respuesta causal. Sin entrar en más detalles, tal y como se pudieron comprobar I. M. Tkachenko y otros en [26], se puede afirmar que, para una función  $\epsilon^{-1}(k, \omega)$  regular, acotada en el semiplano superior y con su valor de contorno en el eje real

$$\epsilon^{-1}(k, \omega) = \lim_{\delta \downarrow 0} \epsilon^{-1}(k, \omega + i\delta) \quad (5.1)$$

se obtienen las denominadas relaciones de Kramers-Kronig de dispersión, que reflejan el principio de causalidad en funciones de respuesta o funciones matemáticas de tipo Nevanlinna, como la función dieléctrica inversa. Estas relaciones son las siguientes

$$\text{Re}[\epsilon^{-1}(k, \omega)] = 1 + V.P. \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im} \epsilon^{-1}(k, \omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (5.2)$$

$$\text{Im} [\epsilon^{-1}(k, \omega)] = 1 - V.P. \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Re} \epsilon^{-1}(k, \omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (5.3)$$

donde V.P. representa el valor principal de la integral de Cauchy, que es el método por el cual se puede obtener un valor de una integral que de otro modo resultaría divergente, es decir:

$$\int_a^c f(x) dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left[ \int_a^{b-\varepsilon} f(x) dx + \int_{b+\varepsilon}^c f(x) dx \right] \quad (5.4)$$

De este modo, gracias a las relaciones de Kramers-Kronig, de las ecuaciones (5.2) y (5.3) se puede llegar a la ecuación de la que partirá el desarrollo del trabajo: la función dieléctrica inversa en su forma integral. El desarrollo que se detalla a continuación se enfoca en la reconstrucción de ésta función, a partir de la cual se podrán obtener el resto de funciones necesarias para alcanzar el fin último de este proyecto: evaluar de manera aproximada el *Stopping Power*, que tiene como objetivo obtener información acerca de las características del plasma de estudio. Se desarrolla pues la ecuación de la función dieléctrica inversa, esto es:

$$\epsilon^{-1}(k, z) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } \epsilon^{-1}(k, \omega)}{\omega - z} d\omega \quad (5.5)$$

donde  $z = \omega + i\delta$  es la frecuencia compleja tal que cumple que  $\delta > 0$  y  $\delta \downarrow 0$ .

En este punto el desarrollo puede parecer un tanto antiintuitivo, ya que la función que se trata de calcular se encuentra a ambos lados de la expresión y con una integral impropia entre ambas. La solución se debe abordar como una reconstrucción en lugar de como un cálculo analítico. Mediante la fórmula de Nevanlinna, tal y como se ha mencionado anteriormente, se deberá reconstruir la función dieléctrica inversa como una transformación lineal-fraccional del parámetro  $h_0(k)$ , con los coeficientes que son unos polinomios ortogonales, que sea capaz de satisfacer las condiciones impuestas por los momentos de forma que se pueda obtener, ahora sí de manera analítica, una solución a la ecuación anterior, de modo que se pueda obtener la función dieléctrica inversa únicamente en función de las frecuencias características,  $\omega$  y  $k$ , eliminando además la parte integral.

Por otro lado, como ya se había mencionado, la *loss function* se define como

$$\mathcal{L}(k, \omega) = -\frac{\text{Im } \epsilon(k, \omega)}{\omega} \quad (4.14)$$

Que es una función par, de modo que se anula en los puntos impares. Despejando, se puede obtener que:

$$\text{Im } \epsilon(k, \omega) = -\omega \mathcal{L}(k, \omega) \quad (5.6)$$

Finalmente, desde un punto de vista puramente físico, tal y como se presenta en la ecuación (4.20) y teniendo presente que solo se trabajará con los cuatro primeros momentos, se puede afirmar que

$$C_\nu(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^\nu \mathcal{L}(k, \omega) d\omega; \quad \nu = 0, 2, 4 \quad (5.7)$$

En caso del momento cero, la expresión anterior se transforma en la siguiente:

$$C_0(k) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^0 \mathcal{L}(k, \omega) d\omega = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \quad (5.8)$$

Finalmente, si se sustituyen en la definición de la función dieléctrica inversa (5.5) las expresiones (4.14) y (5.8) se obtiene que

$$\epsilon^{-1}(k, z) = 1 + \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{Im \epsilon^{-1}(k, \omega)}{\omega - z} d\omega = 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega \mathcal{L}(k, \omega)}{\omega - z} d\omega$$

En este punto, si se suma y se resta  $z$  en el numerador se puede obtener que

$$\begin{aligned} \epsilon^{-1}(k, z) &= 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\omega + z - z)}{\omega - z} \mathcal{L}(k, \omega) d\omega = 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left(1 + \frac{z}{\omega - z}\right) \mathcal{L}(k, \omega) d\omega = \\ &= 1 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{L}(k, \omega) d\omega - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z}{\omega - z} \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \end{aligned}$$

Por un lado, atendiendo a la expresión que se acaba de obtener, se puede apreciar que ha aparecido un término que coincide con la definición de  $C_0$  antes obtenida (5.8), esto es:

$$\epsilon^{-1}(k, z) = 1 - C_0 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z}{\omega - z} \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \quad (5.9)$$

En este punto, si se evalúa la ecuación anterior en el punto  $z = 0$  se obtiene que:

$$\epsilon^{-1}(k, 0) = 1 - C_0 - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{0}{\omega - 0} \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \rightarrow \epsilon^{-1}(k, 0) = 1 - C_0$$

Por lo que, despejando, puede obtenerse

$$C_0(k) = 1 - \epsilon^{-1}(k, 0) \quad (5.10)$$

Lo que no es más que la definición del momento de orden cero. Por otro lado, si se sigue el desarrollo (5.9), se puede ver que aparece la definición de la fórmula de Nevanlinna (4.22), por lo que se obtiene que

$$\epsilon^{-1}(k, z) = 1 - C_0 - z \frac{E_3(z, k) + Q_2'(k, z)E_2(z, k)}{D_3(z, k) + Q_2'(k, z)D_2(z, k)} \quad (5.11)$$

Llegados a este punto, se deben obtener los polinomios característicos  $E_2(z, k)$ ,  $E_3(z, k)$ ,  $D_2(z, k)$  y  $D_3(z, k)$ . Dado que el cálculo de los mismos resulta un tanto extenso, se incluirá en el anexo I.

Los valores obtenidos para los polinomios, que son los coeficientes de la transformación de Nevanlinna, son los siguientes:

$$D_0(z, k) = \frac{1}{\sqrt{C_0(k)}} \quad (5.12)$$

$$D_1(z, k) = \frac{z}{\sqrt{C_2(k)}} \quad (5.13)$$

$$D_2(z, k) = W_2(k)(z^2 - \omega_1^2(k)) \quad (5.14)$$

$$D_3(z, k) = W_3(k)(z^2 - \omega_2^2(k))z \quad (5.15)$$

$$E_0(z, k) = 0 \quad (5.16)$$

$$E_1(z, k) = \frac{C_0(k)}{\sqrt{C_2(k)}} \quad (5.17)$$

$$E_2(z, k) = zC_0(k)W_2(k) \quad (5.18)$$

$$E_3(z, k) = C_0(k)(z^2 + \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k))W_3(k) \quad (5.19)$$

siendo

$$W_2(k) = \frac{C_0(k)}{\sqrt{(C_0^2(k)C_4(k) - C_2^2(k)C_0(k))}} \quad (5.20)$$

y

$$W_3(k) = \frac{C_2(C_0C_4 - C_2^2)}{\sqrt{2C_0C_2^3C_4^3 - 2C_0C_2^4C_4C_6 + C_0^2C_2^2C_4^2C_6 - C_0^2C_2C_4^4 + C_2^6C_6 - C_2^5C_4^2}} \quad (5.21)$$

En cuanto a los coeficientes  $D_0(z, k)$ ,  $D_1(z, k)$ ,  $E_0(z, k)$  y  $E_1(z, k)$ , no se utilizan en el proceso de reconstrucción, pero resulta interesante calcularlos a modo de ejercicio de comprensión del desarrollo seguido en los otros.

Por otro lado, con el fin de amenizar los cálculos dentro de lo posible, la notación empleada para denominar a las frecuencias características  $\omega_1(k)$  y  $\omega_2(k)$  pasará a ser simplemente  $\omega_1$  y  $\omega_2$  durante los desarrollos, aunque en las ecuaciones definitivas que se

vayan obteniendo se mantendrá como  $\omega_1(k)$  y  $\omega_2(k)$ . Para los momentos, la función  $h_0(k)$  y los polinomios  $W_2(k)$  y  $W_3(k)$  se seguirá una notación análoga a la descrita con las frecuencias características.

Llegados a este punto se puede observar que los polinomios no dependen de la función de distribución que se trata de reconstruir, sino exclusivamente de sus momentos. Este no es un hecho en absoluto trivial, pues demuestra que, tal y como se había comentado, a pesar de la sencillez del método empleado, éste muestra una alta versatilidad y potencia, en tanto que, como se comprueba a continuación, permite reconstruir de forma satisfactoria la función dieléctrica inversa.

Si se sustituyen los polinomios anteriores en la ecuación (5.11) se puede reconstruir prácticamente en su totalidad la función dieléctrica inversa. Si se reorganiza un poco la ecuación, ésta se simplifica significativamente, esto es:

$$\begin{aligned}
 \epsilon^{-1}(k, z) &= 1 - C_0 - z \frac{W_3 C_0 (z^2 + \omega_1^2 - \omega_2^2) + Q'_2(k, z) z C_0 W_2}{W_3 (z^2 - \omega_2^2) z + Q'_2(k, z) (z^2 - \omega_1^2) W_2} = \\
 &= 1 - C_0 - z \frac{C_0 (z^2 + \omega_1^2 - \omega_2^2) + z C_0 Q'_2(k, z) \frac{W_2}{W_3}}{(z^2 - \omega_2^2) z + (z^2 - \omega_1^2) Q'_2(k, z) \frac{W_2}{W_3}} = \\
 &= 1 - C_0 - z \frac{C_0 (z^2 + \omega_1^2 - \omega_2^2) + z C_0 Q_2(k, z)}{(z^2 - \omega_2^2) z + (z^2 - \omega_1^2) Q_2(k, z)} \rightarrow \\
 \rightarrow \epsilon^{-1}(k, z) &= 1 - C_0(k) - z \frac{C_0(k) [z^2 + \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k)] + Q_2(k, z) z C_0(k)}{z^3 - z \omega_2^2(k) + Q_2(k, z) [z^2 - \omega_1^2(k)]} \quad (5.22)
 \end{aligned}$$

donde

$$Q_2(k, z) = Q'_2(k, z) \frac{W_2}{W_3} \quad (5.23)$$

En este punto, resulta importante volver a incidir en el hecho de que el parámetro  $Q_2(k, z)$  no es fenomenológico, es decir, no es arbitrario y depende de la normalización de los polinomios que se lleve a cabo. Por otro lado, se puede llevar a cabo una renormalización de los mismos, tal y como se ha planteado líneas atrás. Simplemente resultará importante que, tal y como se demostraron I. M. Tkachenko y otros en [26], la función  $Q_2(k, z)$  se sustituye por su valor estático, que es puramente imaginario y presenta la forma  $Q_2(k, z) = i h_0(k)$ .



Seguidamente se procede a sustituir la variable  $z$  por su parte real, es decir,  $z = \omega + i0^+ \rightarrow z \approx \omega$ . Seguidamente, con el fin de obtener una expresión más manejable, se realizará una simplificación *ad hoc* de la expresión anterior incluyendo el citado cambio:

$$\begin{aligned} \epsilon^{-1}(k, z) &= 1 - C_0 - z \frac{C_0(k)[z^2 + \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k)] + Q_2(k, z)zC_0(k)}{z^3 - z\omega_2^2(k) + Q_2(k, z)[z^2 - \omega_1^2(k)]} \rightarrow \\ &\rightarrow \epsilon^{-1}(k, \omega) = 1 - C_0 - \omega \frac{C_0(k)[\omega^2 + \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k)] + Q_2(k, \omega)\omega C_0(k)}{\omega^3 - \omega\omega_2^2(k) + Q_2(k, \omega)[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} \end{aligned} \quad (5.24)$$

Así mismo, se sustituye  $Q_2(k, \omega)$  por su definición,  $Q_2(k, \omega) = ih_0(k)$ , obtenida por I. M. Tkachenko y otros en [26]. Donde  $h_0(k)$  es una función que se obtendrá *a posteriori*. De este modo, la ecuación (5.24) queda como:

$$\begin{aligned} \epsilon^{-1}(k, \omega) &= 1 - C_0 - \omega \frac{C_0(k)[\omega^2 + \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k)] + ih_0\omega C_0(k)}{\omega^3 - \omega\omega_2^2(k) + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} \\ &= 1 - C_0 - \omega \frac{C_0(k)[\omega^2 + \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k)] + ih_0(k)\omega C_0(k)}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0(k)[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} \end{aligned} \quad (5.25)$$

Con el fin de eliminar el término  $C_0$  y simplificar la ecuación de la función dieléctrica inversa, se procede a hacer uso de las definiciones de  $\omega_1(k)$  y  $C_2(k)$ , (4.25) y (4.28), respectivamente:

$$\omega_1^2 = \frac{C_2}{C_0} \rightarrow C_0 = \frac{C_2}{\omega_1^2} \rightarrow C_0(k) = \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2(k)} \quad (5.26)$$

Sustituyendo (5.26) en la expresión (5.25), se obtiene

$$\begin{aligned} \epsilon^{-1}(k, \omega) &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2} - \omega \frac{\frac{\omega_p^2}{\omega_1^2}[\omega^2 + \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k)] + ih_0\omega \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2}}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} = \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2} - \omega \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2} \frac{[\omega^2 + \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k)] + ih_0\omega}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} = \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2} \left[ 1 - \omega \frac{[\omega^2 + \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k)] + ih_0\omega}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} \right] = \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2(k)} \left[ \frac{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2(k)] - \omega[\omega^2 + \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k) + ih_0\omega]}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} \right] = \\ &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2(k)} \left[ \frac{\omega^3 - \omega\omega_2^2(k) + ih_0\omega^2 - ih_0\omega_1^2(k) - \omega^3 - \omega\omega_1^2(k) + \omega\omega_2^2(k) - ih_0\omega^2}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} \right] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2(k)} \left[ \frac{-ih_0\omega_1^2(k) - \omega\omega_1^2(k)}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} \right] = \\
 &= 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega_1^2(k)} \left[ \frac{-\omega_1^2(k)[ih_0 + \omega]}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} \right] \rightarrow \\
 \rightarrow \epsilon^{-1}(k, \omega) &= 1 + \frac{\omega_p^2[ih_0(k) + \omega]}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0(k)[\omega^2 - \omega_1^2(k)]} \quad (5.27)
 \end{aligned}$$

## 5.2. Cálculo de la *loss function*

Una vez reconstruida completamente la función dieléctrica inversa, se procede a calcular la *loss function*. Para ello, se debe atender a la expresión (4.14) donde, tal y como se puede observar, aparece la parte imaginaria de la función dieléctrica inversa. Para obtener la parte imaginaria de esta función, se procede a emplear el proceso que se ejemplifica a continuación con una función simple:

Sea el número complejo  $y = a + ib$ . Para obtener la parte imaginaria de  $y$  basta con llevar a cabo el proceso siguiente:

$$\text{Im}(y) = \frac{1}{2i} [y - \bar{y}] = \frac{[a + ib - a + ib]}{2i} = \frac{2ib}{2i} = b \quad (5.28)$$

Que es la parte imaginaria de "y", tal y como se deseaba demostrar.

Aplicado al presente caso, el proceso resulta análogo. Dada la función (5.27)

$$\epsilon^{-1}(k, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2[\omega + ih_0(k)]}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2(k)] + ih_0(k)[\omega^2 - \omega_1^2(k)]}$$

Su parte imaginaria es

$$\begin{aligned}
 \text{Im } \epsilon^{-1}(k, \omega) &= \frac{1}{2i} [\epsilon^{-1}(k, \omega) - \overline{\epsilon^{-1}(k, \omega)}] = \\
 &= \frac{1}{2i} \left[ \frac{\omega_p^2[\omega + ih_0]}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2]} - \frac{\omega_p^2[\omega - ih_0]}{\omega[\omega^2 - \omega_2^2] - ih_0[\omega^2 - \omega_1^2]} \right] =
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{i}{2i^2} \left[ \frac{\omega_p^2[\omega + ih_0](\omega[\omega^2 - \omega_2^2] - ih_0[\omega^2 - \omega_1^2])}{(\omega[\omega^2 - \omega_2^2] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2])(\omega[\omega^2 - \omega_2^2] - ih_0[\omega^2 - \omega_1^2])} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\omega_p^2[\omega - ih_0](\omega[\omega^2 - \omega_2^2] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2])}{(\omega[\omega^2 - \omega_2^2] - ih_0[\omega^2 - \omega_1^2])(\omega[\omega^2 - \omega_2^2] + ih_0[\omega^2 - \omega_1^2])} \right] = \\
 &= \frac{-i}{2} \left[ \frac{[\omega\omega_p^2 + ih_0\omega_p^2](\omega^3 - \omega_2^2\omega - ih_0\omega^2 + \omega_1^2ih_0)}{(\omega^3 - \omega_2^2\omega + ih_0\omega^2 - \omega_1^2ih_0)(\omega^3 - \omega_2^2\omega - ih_0\omega^2 + \omega_1^2ih_0)} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{[\omega\omega_p^2 - ih_0\omega_p^2](\omega^3 - \omega_2^2\omega + ih_0\omega^2 - \omega_1^2ih_0)}{(\omega^3 - \omega_2^2\omega + ih_0\omega^2 - \omega_1^2ih_0)(\omega^3 - \omega_2^2\omega - ih_0\omega^2 + \omega_1^2ih_0)} \right] = \\
 &= \frac{-i}{2} \left[ \frac{1}{[\omega(\omega^2 - \omega_2^2)]^2 - i^2h_0^2(\omega^2 - \omega_1^2)^2} ((\omega^4\omega_p^2 - \omega_2^2\omega^2\omega_p^2 - \omega^3ih_0\omega_p^2 + \omega_1^2ih_0\omega\omega_p^2 \right. \\
 &\quad + \omega^3ih_0\omega_p^2 - \omega_2^2\omega ih_0\omega_p^2 - i^2h_0^2\omega^2\omega_p^2 + \omega_1^2i^2h_0^2\omega_p^2) \\
 &\quad \left. - \frac{1}{[\omega(\omega^2 - \omega_2^2)]^2 - i^2h_0^2(\omega^2 - \omega_1^2)^2} (\omega^4\omega_p^2 - \omega_2^2\omega^2\omega_p^2 + \omega^3ih_0\omega_p^2 \right. \\
 &\quad \left. - \omega_1^2ih_0\omega\omega_p^2 - \omega^3ih_0\omega_p^2 + \omega_2^2\omega ih_0\omega_p^2 - i^2h_0^2\omega^2\omega_p^2 + \omega_1^2i^2h_0^2\omega_p^2) \right] = \\
 &= \frac{-i}{2} \left[ \frac{-2\omega^3ih_0\omega_p^2 + 2\omega_1^2ih_0\omega\omega_p^2 + 2\omega^3ih_0\omega_p^2 - 2\omega_2^2\omega ih_0\omega_p^2}{[\omega(\omega^2 - \omega_2^2)]^2 + h_0^2(\omega^2 - \omega_1^2)^2} \right] = \\
 &= -i^2\omega_p^2\omega h_0 \left[ \frac{\omega_1^2 - \omega_2^2}{[\omega(\omega^2 - \omega_2^2)]^2 + h_0^2(\omega^2 - \omega_1^2)^2} \right] = \\
 &= \omega_p^2\omega h_0 \left[ \frac{\omega_1^2 - \omega_2^2}{[\omega(\omega^2 - \omega_2^2)]^2 + h_0^2(\omega^2 - \omega_1^2)^2} \right] \rightarrow \\
 &\rightarrow -Im \epsilon(k, \omega) = \frac{\omega_p^2\omega h_0(k)(\omega_2^2(k) - \omega_1^2(k))}{[\omega(\omega^2 - \omega_2^2(k))]^2 + h_0^2(k)(\omega^2 - \omega_1^2(k))^2} \quad (5.29)
 \end{aligned}$$

De este modo, sustituyendo la expresión obtenida se puede obtener la *loss function* como:

$$\mathcal{L}(k, \omega) = \frac{\omega_p^2 h_0(k)(\omega_2^2(k) - \omega_1^2(k))}{[\omega(\omega^2 - \omega_2^2(k))]^2 + h_0^2(k)(\omega^2 - \omega_1^2(k))^2} \quad (5.30)$$

### 5.3. Cálculo de la función $h_0(k)$

Llegados a este punto, el siguiente problema que se presenta es el cálculo concreto del parámetro  $h_0(k)$ . Una manera sencilla de obtener este parámetro consiste en suponer que la función  $\mathcal{L}(k, \omega)$  posee un extremo en la frecuencia cero y, entonces., evaluar la derivada segunda respecto a  $\omega$  de la *loss function* en el punto  $\omega = 0$ . Es decir:

$$\left[ \frac{\partial^2 \mathcal{L}(k, \omega)}{\partial \omega^2} \right]_{\omega=0} = 0 \quad (5.31)$$

Dada la complejidad de la resolución de las derivadas, se ha procedido a obtener los resultados mediante el programa *Mathematica*. De este modo, la primera derivada es (5.32)

$$\mathcal{L}'(k, \omega) = - \frac{\omega_p^2 h_0 (\omega_2^2 - \omega_1^2) [4\omega h_0^2 (\omega^2 - \omega_1^2) + 4\omega^3 (\omega^2 - \omega_2^2) + 2\omega (\omega^2 - \omega_2^2)^2]}{[[\omega (\omega^2 - \omega_2^2)]^2 + h_0^2 (\omega^2 - \omega_1^2)^2]}$$

Mientras que la derivada segunda es (5.33)

$$\begin{aligned} \mathcal{L}''(k, \omega) &= \\ &= \frac{2h_0 (\omega_2^2 - \omega_1^2) \omega_p^2 (4h_0^2 \omega (\omega^2 - \omega_1^2) + 4\omega^3 (\omega^2 - \omega_2^2) + 2\omega (\omega^2 - \omega_2^2)^2)^2}{(h_0^2 (\omega^2 - \omega_1^2)^2 + \omega^2 (\omega^2 - \omega_2^2)^2)^3} \\ &- \frac{\omega_p^2 h_0 (\omega_2^2 - \omega_1^2) [8\omega^2 h_0^2 + 8\omega^4 + 4h_0^2 (\omega^2 - \omega_1^2) + 20\omega^2 (\omega^2 - \omega_2^2) + 2(\omega^2 - \omega_2^2)^2]}{[[\omega (\omega^2 - \omega_2^2)]^2 + h_0^2 (\omega^2 - \omega_1^2)^2]^2} \end{aligned}$$

Una vez obtenida la derivada segunda, se procede a evaluarla en el punto  $\omega = 0$ , con lo que se obtiene que:

$$\mathcal{L}''(k, 0) = - \frac{(\omega_2^2 - \omega_1^2) (2\omega_2^4 - 4h_0^2 \omega_1^2) \omega_p^2}{h_0^3 \omega_1^8} \quad (5.34)$$

Por último, se iguala la expresión a 0,

$$- \frac{(\omega_2^2 - \omega_1^2) (2\omega_2^4 - 4h_0^2 \omega_1^2) \omega_p^2}{h_0^3 \omega_1^8} = 0 \quad (5.35)$$

Si se resuelve la ecuación anterior, se obtienen las tres posibles soluciones de  $h_0(k)$

$$h_0(k) = 0 \quad (5.36)$$

$$h_0(k) = - \frac{\omega_2^2(k)}{\omega_1(k) \sqrt{2}} \quad (5.37)$$

$$h_0(k) = \frac{\omega_2^2(k)}{\omega_1(k) \sqrt{2}} \quad (5.38)$$

De las tres soluciones obtenidas, dos no resultan válidas, dado que  $h_0(k)$  no puede ser ni nulo ni negativo, con lo que, por descarte, el factor  $h_0(k)$  es (5.38)

$$h_0(k) = \frac{\omega_2^2(k)}{\omega_1(k)\sqrt{2}} \quad (5.38)$$

#### 5.4. Modelo RPA

El modelo de aproximación de las fases aleatorias o, por sus siglas en inglés RPA (*Random Phase Approximation*), es, tal y como su nombre indica, un método de aproximación empleado tanto en la física de materia condensada como en física nuclear. Fue introducido por los físicos David Bohm y David Pines en tres artículos publicados a principios de la década de 1950 [27], [28] y [29].

El objetivo inicial de esta aproximación fue obtener un método fiable que tuviera en consideración los efectos de las fuerzas coulombianas en las correlaciones de la localización de los electrones.

Bajo estas premisas, el modelo de la RPA plantea una nueva aproximación basada en el comportamiento colectivo de las partículas. Para ello, simplificaron el problema pasando de tratarlo como un sistema multielectrónico en un gas de electrones uniforme a considerarlo como un oscilador armónico acoplado que describía las oscilaciones del plasma en rangos largos y empleaba una pequeña corrección para los cortos. Bohm y Pines demostraron que esto era posible si se asumía los términos cruzados que aparecen con las oscilaciones de densidad entre las diferentes fases pueden ser despreciados, de donde surge el nombre de RPA. [30]

Debido a sus características, este método se emplea ampliamente para describir la respuesta lineal dinámica de sistemas electrónicos. Actualmente, existen métodos más precisos que la RPA para obtener el valor de la función dieléctrica en sus extremos, pero dado que el objetivo de este proyecto es demostrar que con herramientas sencillas se pueden realizar aproximaciones consistentes referentes al diagnóstico de plasmas densos, resulta un método adecuado, en tanto que existe una gran cantidad de literatura relacionada con el mismo.

Finalmente, cabe puntualizar que, el hecho de que para alcanzar una solución se precise de una aproximación por un método distinto al de momentos, resulta uno de los principales puntos débiles de este trabajo. En cualquier caso, dado que el objetivo aquí no es otro que el de emplear cálculos sencillos para realizar una aproximación de un fenómeno extremadamente complejo, tiene sentido realizar algunas concesiones a la hora de la resolución del problema. Por otro lado, se debe remarcar que el método de la RPA ha demostrado, a lo largo de los años que se lleva utilizando en este campo, que resulta más fiable que otras aproximaciones, como la llevada a cabo por Mermin, lo cual lo hace una de las opciones más preferibles.

### 5.5. Cálculo analítico del momento $C_0(k)$

Una vez obtenida la función  $h_0(k)$ , el siguiente paso es calcular los momentos de forma precisa. Dada la complejidad del cálculo analítico de los momentos de  $C_2(k)$  y  $C_4(k)$ , se incluirá en el presente trabajo únicamente el cálculo de  $C_0(k)$ . El cálculo de los otros dos puede encontrarse realizado por I. M. Tkachenko y otros en [26].

Puesto que se va a realizar un estudio tanto de plasmas tipo OCP como TCP, se realizará a continuación el desarrollo general para obtener el momento de orden cero. Este desarrollo coincide con el de TCP, por lo que posteriormente se particularizará para el caso OCP.

El cálculo en sí se fundamenta en el modelo de la RPA citado anteriormente. El objetivo en este punto es la correcta reconstrucción de la función  $\epsilon(k, 0)$ , que se considerará igual a  $\epsilon_{RPA}(k, 0)$ , por lo que se procederá a llevar la función  $\epsilon_{RPA}(k, 0)$  a sus extremos asintóticos, esto es, cuando el parámetro  $k$  tiende a 0 y a  $\infty$ . Una vez obtenidos los resultados en estos dos puntos, se puede reconstruir  $\epsilon_{RPA}(k, 0)$  mediante una interpolación de las dos asíntotas obtenidas, tal y como se mostrará a continuación. Los resultados aquí mostrados forman parte del desarrollo de Yu. V. Arkhipov y otros [31].

Si se evalúa la función dieléctrica cuando  $\omega = 0$  y  $k \rightarrow 0$ , se obtiene que

$$\epsilon_{RPA}(k \rightarrow 0, 0) - 1 = \frac{4}{\pi a_B k^2} \left( \int_0^\infty f_e(p) dp + \frac{m_i Z^2}{m_e} \int_0^\infty f_i(p) dp \right) \approx \frac{k_D^2}{k^2} \quad (5.39)$$

Por otro lado, si se evalúa la función dieléctrica cuando  $\omega = 0$  y  $k \rightarrow \infty$  el resultado es

$$\epsilon_{RPA}(k \rightarrow \infty, 0) - 1 = \frac{4}{\pi a_B k^2} \left( \int_0^\infty f_e(p) dp + \frac{m_i Z^2}{m_e} \int_0^\infty f_i(p) dp \right) \approx \frac{k_q^4}{k^4} \quad (5.40)$$

donde,  $f_e(p)$  y  $f_i(p)$  son las funciones de distribución de Fermi-Dirac, que presentan la forma

$$f_a(p) = (\exp(\beta E_a(p) - \eta_a) + 1)^{-1} \quad a = e, i \quad (5.41)$$

donde

$$E_a(p) = \frac{\hbar^2 p^2}{2m_a} \quad (5.42)$$

y  $\eta_a$  representa el potencial químico del componente  $a$  adimensionalizado.

Obtenidas las asíntotas en los extremos 0 e  $\infty$ , se puede interpolar para obtener que

$$\epsilon(k, 0) = 1 + \frac{1}{\frac{k^2}{k_D^2} + \frac{k^4}{k_q^4}} \quad (5.43)$$

donde

$$k_D^2 = \frac{4}{\pi a_B} \left( \int_0^\infty f_e(p) dp + \frac{m_i Z^2}{m_e} \int_0^\infty f_i(p) dp \right) \quad (5.44)$$

y

$$k_q^4 = \frac{16}{\pi a_B} \left( \int_0^\infty f_e(p) p^2 dp + \frac{m_i Z^2}{m_e} \int_0^\infty f_i(p) p^2 dp \right) \quad (5.45)$$

Por otro lado, en el presente caso de estudio, se puede simplificar las expresiones anteriores escribiendo

$$k_D^2 = \frac{4\pi e^2}{k_B T} (n_e + Z n_i) = \frac{4\pi e^2}{k_B T} (1 + Z) n \quad (5.46)$$

y

$$k_q^4 = \frac{16\pi e^2}{\hbar^2} (n_e m_e + Z^2 n_i m_i) = \frac{16\pi e^2}{\hbar^2} (m_e + Z^2 m_i) n \quad (5.47)$$

De este modo, se puede escribir el primer momento como

$$C_0 = 1 - \left( 1 + \frac{1}{\frac{k^2}{k_D^2} + \frac{k^4}{k_q^4}} \right)^{-1} \rightarrow$$

$$\rightarrow C_0(k) = \frac{k_D^2 k_q^4}{k^4 k_D^2 + k^2 k_q^4 + k_D^2 k_q^4} \quad (5.48)$$

Más adelante se especificará en detalle cada uno de los términos de  $C_0(k)$ , dado que su forma varía según se trate un OCP o un TCP.

## 5.6. Plasmas de un componente (OCP)

Se procede a continuación a particularizar el caso de TCP al de OCP. En un OCP no se considera la existencia de iones en el medio, por lo que las ecuaciones de  $k_D^2$  y  $k_q^4$  se pueden escribir como:

$$k_D^2 = \frac{4\pi e^2}{k_B T} n \quad (5.49)$$

y

$$k_q^4 = \frac{16\pi e^2}{\hbar^2} n m_e \quad (5.50)$$

El cálculo de  $\omega_1(k)$  resulta análogo tanto en OCP como en TCP, siendo la única diferencia que existe en ambos casos la relativa a los valores de  $k_D^2$  y  $k_q^4$ . En cualquier caso, partiendo de (4.25)

$$\begin{aligned} \omega_1(k) &= \sqrt{\frac{C_2}{C_0}} = \sqrt{\frac{\omega_p^2}{\frac{k_D^2 k_q^4}{k^4 k_D^2 + k^2 k_q^4 + k_D^2 k_q^4}}} \rightarrow \\ \rightarrow \omega_1(k) &= \frac{\omega_p \sqrt{k^4 k_D^2 + k^2 k_q^4 + k_D^2 k_q^4}}{k_D k_q^2} \quad (5.51) \end{aligned}$$

Para el caso de OCP, el momento de cuarto orden fue obtenido por I. M. Tkachenko y otros en [26] y se define como

$$C_4(k) = \omega_p^4 [1 + K(k) + U(k)] \quad (5.52)$$

siendo el primer término  $K(k)$  la aportación producida por la parte cinética del Hamiltoniano del sistema. De este modo, el valor en el caso degenerado (cuántico) es el obtenido por I. M. Tkachenko y otros en [32]:

$$K(k) = \frac{\langle v_e^2 \rangle k^2}{\omega_p^2} + \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} \right)^2 \frac{k^2}{\omega_p^2} \quad (5.53)$$

donde  $\langle v_e^2 \rangle$  representa la velocidad promedio de los electrones en el seno del plasma. Es un parámetro estrechamente relacionado con la energía cinética y, por extensión, con la temperatura:

$$\langle v_e^2 \rangle = \frac{3F_{3/2}(\eta)}{m_e \beta D^{3/2}} \quad (5.54)$$



El término  $D$  es la inversa del factor de degeneración del plasma  $\theta$ , que representa “cuán cuántico” es un plasma:

$$\theta = D^{-1} = (\beta E_F)^{-1} \quad (5.55)$$

siendo  $E_F$  la energía de Fermi (4.8), definida anteriormente. Con esto, se puede reescribir el sistema simplificándolo como

$$D = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\Gamma}{2r_s} \quad (5.56)$$

Por otro lado, el término  $F_{3/2}(\eta)$  representa el valor de la integral de Fermi de orden  $3/2$ . Las integrales de Fermi son funciones transcendentales que vienen determinadas por integrales. Desde un punto de vista físico representan potencias sucesivas de impulso. En general se emplean en partículas que cumplen la distribución de Fermi-Dirac, es decir, fermiones. Cualquier integral de Fermi de orden  $\nu$  tiene la forma siguiente

$$F_\nu(\eta) = \int_0^\infty \frac{x^\nu dx}{1 + \exp(x - \eta)} \quad (5.57)$$

siendo  $\eta$  el potencial químico adimensional.

Este tipo de integrales se pueden resolver generalmente solo de forma numérica. En particular, para el caso  $\nu = 3/2$  se puede escribir que

$$F_{3/2}(\eta) = \int_0^\infty \frac{x^{3/2} dx}{1 + \exp(x - \eta)} \quad (5.58)$$

Como se puede apreciar, incluso tratando de resolver la integral de forma numérica, se debe obtener previamente el valor de  $\eta$ , por ello, se toma la condición de normalización

$$F_{1/2}(\eta) = \int_0^\infty \frac{x^{1/2} dx}{1 + \exp(x - \eta)} = \frac{2}{3} D^{3/2} \quad (5.59)$$

Esta ecuación se puede interpolar numéricamente mediante el programa *Mathematica* y obtener el valor de  $\eta$ . Una vez obtenido este valor, se puede calcular de forma numérica  $F_{3/2}(\eta)$ , tal y como se puede comprobar en el código de *Mathematica* incluido en el Anexo II.

Por otro lado, el término  $U(k)$  se debe a las interacciones electrón-electrón y presenta la estructura siguiente

$$U(k) = \left( \frac{1}{2\pi^2 n_e} \right) \int_0^\infty p^2 [S_{ee}(p) - 1] f(p, k) dp \quad (5.60)$$

donde el factor angular es

$$f(p, k) = \frac{5}{12} - \frac{p^2}{4k^2} + \frac{(k^2 - p^2)^2}{8pk^3} \ln \left| \frac{p+k}{p-k} \right| \quad (5.61)$$

El término anterior presenta dificultades de cálculo que exceden el alcance del presente proyecto, puesto que el cálculo del factor de estructura estático  $S_{ee}(p)$  y su integración en sí no son en absoluto triviales. Por este motivo, se tomarán los resultados calculados en [1], donde se puede encontrar el valor de  $U(k)$  calculado a partir de una interpolación. De este modo, los términos  $K(k) + U(k)$  se pueden escribir como

$$K(k) + U(k) = \frac{\langle v_e^2 \rangle k^2}{\omega_p^2} + \left( \frac{\hbar}{2m_e} \right)^2 \frac{k^4}{\omega_p^2} - \frac{v_{int}^2 k^2}{\omega_p^2} \quad (5.62)$$

siendo el parámetro  $v_{int}^2$  un parámetro de ajuste con la forma

$$v_{int}^2 = -\frac{4}{15} \frac{\Gamma^{\frac{3}{2}}}{\beta m_e} \left( \frac{A_1}{\sqrt{A_2 + \Gamma}} + \frac{A_3}{1 + \Gamma} \right) \quad (5.63)$$

Los parámetros  $A_1$ ,  $A_2$  y  $A_3$  son valores obtenidos mediante interpolación calculados por G. Chabrier y A. Y. Potekhin [33] y toman los valores siguientes

$$A_1 = -0.9052$$

$$A_2 = 0.6322$$

$$A_3 = -\frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{A_1}{\sqrt{A_2}} = 0.272433$$

Una vez obtenidos todos los términos del cuarto momento, se procede a obtener la ecuación de la frecuencia característica  $\omega_2$ . A partir de la ecuación (4.26), se puede escribir que

$$\begin{aligned} \omega_2(k) &= \sqrt{\frac{C_4}{C_2}} = \sqrt{\frac{\omega_p^4 [1 + K(k) + U(k)]}{\omega_p^2}} \rightarrow \\ \rightarrow \omega_2(k) &= \omega_p \sqrt{\left[ 1 + \frac{\langle v_e^2 \rangle k^2}{\omega_p^2} + \left( \frac{\hbar}{2m_e} \right)^2 \frac{k^4}{\omega_p^2} - \frac{v_{int}^2 k^2}{\omega_p^2} \right]} \quad (5.64) \end{aligned}$$

### 5.7. Plasmas de dos componentes (TCP)

Como ya se ha dicho, las expresiones de  $k_q^4$  y  $k_D^2$  obtenidas anteriormente ya son las del caso TCP. El desarrollo del cálculo de  $\omega_1(k)$  en OCP y en TCP resulta idéntico exceptuando el hecho de que las definiciones de  $k_q^4$  y  $k_D^2$  varían, por lo que, nuevamente, se puede escribir que

$$\omega_1(k) = \frac{\omega_p \sqrt{k^4 k_D^2 + k^2 k_q^4 + k_D^2 k_q^4}}{k_D k_q^2} \quad (5.51)$$

con

$$k_D^2 = \frac{4\pi e^2}{k_B T} (n_e + Z n_i) = \frac{4\pi e^2}{k_B T} (1 + Z)n \quad (5.46)$$

y

$$k_q^4 = \frac{16\pi e^2}{\hbar^2} (n_e m_e + Z^2 n_i m_i) = \frac{16\pi e^2}{\hbar^2} (m_e + Z^2 m_i)n \quad (5.47)$$

Por otro lado, el momento  $C_4(k)$  presenta la siguiente forma

$$C_4(k) = \omega_p^4 [\xi_{ei}(k) + M(k)] \quad (5.65)$$

Dado que se trabajará con un potencial coulombiano, el término  $\xi_{ei}(k)$ , que representa el potencial efectivo se considera como

$$\xi_{ei}(k) = 1 \quad (5.66)$$

Así mismo,  $M(k)$  es

$$M(k) = K(k) + U(k) + H \quad (5.67)$$

El factor  $H$  establece correlaciones entre las interacciones ión-electrón del plasma. Se puede aproximar mediante la RPA de manera válida aprovechando los resultados de Yu. V. Arkhipov y otros presentados en [32]

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{6\pi^2 Z \sqrt{n_e n_i}} \int_0^\infty k^2 S_{ei}(k) dk \underset{C_4}{\underset{\omega}{\approx}} \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{\pi \omega_p^4} \int_{-\infty}^\infty \omega^4 \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \approx \\ &\approx \frac{4}{3} \frac{Z r_s \sqrt{\Gamma}}{\sqrt{3Z\Gamma^2 + 4r_s + 4\Gamma \sqrt{3(1+Z)r_s}}} \end{aligned} \quad (5.68)$$

Los parámetros  $U(k)$  y  $K(k)$  son los mismos que en el caso OCP por lo que, para el caso TCP,  $\omega_2$  se puede escribir como:

$$\begin{aligned}\omega_2(k) &= \sqrt{\frac{C_4}{C_2}} = \sqrt{\frac{[1 + M(k)]\omega_p^4}{\omega_p^2}} \rightarrow \\ \rightarrow \omega_2(k) &= \omega_p \sqrt{[1 + K(k) + U(k) + H]}\end{aligned}\quad (5.69)$$

### 5.8. Adimensionalización de funciones y parámetros

Previo a presentar los resultados, conviene adimensionalizar las ecuaciones con el fin de evitar trabajar con valores muy grandes que puedan producir errores en la ejecución de los documentos de *Mathematica*. Únicamente se trabajará con unidades de  $MeV/mm$  en cuatro resultados de OCP, dado que los resultados con los que se compara se encuentran en dichas unidades.

La mayoría de las funciones obtenidas son dependientes de  $k$ , que presenta unidades de  $cm^{-1}$ , por lo que conviene introducir una nueva variable que resulte adimensional. Se opta por la introducción de la variable  $q = ka$ .

Por otro lado, las frecuencias características  $\omega_1(k)$  y  $\omega_2(k)$  presentan unidades de  $s^{-1}$  al encontrarse multiplicadas por  $\omega_p$ , por lo que resulta natural trabajar con las frecuencias características divididas entre  $\omega_p$  para eliminar las unidades. De este modo, las ecuaciones que se obtiene son, para plasmas OCP, la ecuación de  $\omega_1(k)$  se puede escribir como

$$\omega_1(k) = \frac{\omega_p}{\omega_p} \sqrt{\frac{k^4 k_D^2 + k^2 k_q^4 + k_D^2 k_q^4}{k_D^2 k_q^4}} = \sqrt{\frac{k^4}{k_q^4} + \frac{k^2}{k_D^2} + 1}\quad (5.70)$$

Si se multiplica y se divide la ecuación (5.70) por  $a$  de la forma siguiente, se obtiene que

$$\omega_1(k) = \sqrt{\frac{k^4 a^4}{k_q^4 a^4} + \frac{a^2 k^2}{a^2 k_D^2} + 1}\quad (5.71)$$

donde se puede observar que aparece la definición de  $q$ , por lo que

$$\omega_1(q) = \sqrt{\frac{q^4}{k_q^4 a^4} + \frac{q^2}{a^2 k_D^2} + 1}\quad (5.72)$$

En este punto, si se estudia los términos que involucran a  $k_q^4$  y  $k_D^2$  sustituyéndolos por sus definiciones, se obtiene que todo resulta adimensional

$$\begin{aligned}
 (k_q^4 a^4)^{-1} &= \left( \frac{16\pi e^2}{\hbar^2} n m_e a^4 \right)^{-1} = \left( \frac{16\pi e^2}{\hbar^2} \frac{3}{4\pi a^3} m_e a^4 \right)^{-1} = \\
 &= \left( \frac{12e^2}{\hbar^2} m_e a \right)^{-1} = \left( 12 \frac{a}{a_B} \right)^{-1} \rightarrow \\
 &\rightarrow (k_q^4 a^4)^{-1} = \frac{1}{12r_s} \quad (5.73)
 \end{aligned}$$

mientras que

$$\begin{aligned}
 (k_D^2 a^2)^{-1} &= \left( \frac{4\pi e^2}{k_B T} n a^2 \right)^{-1} = \left( \frac{4\pi e^2}{k_B T} \frac{3}{4\pi a^3} a^2 \right)^{-1} = \left( \frac{e^2}{k_B T} \frac{3}{a} \right)^{-1} \rightarrow \\
 &\rightarrow (k_D^2 a^2)^{-1} = \frac{1}{3\Gamma} \quad (5.74)
 \end{aligned}$$

De modo que

$$\omega_1(q) = \sqrt{\frac{q^4}{12r_s} + \frac{q^2}{3\Gamma} + 1} \quad (5.75)$$

En el caso de un plasma de dos componentes, el desarrollo es el mismo hasta la ecuación (5.72), pues las únicas diferencias respecto a un caso u otro son  $k_q^4$  y  $k_D^2$ . Si se estudian los términos de la ecuación (5.72) para el caso de TCP se obtiene que el primer término es

$$(a^4 k_q^4)^{-1} = \left( a^4 \frac{16\pi e^2}{\hbar^2} (m_e + Z^2 m_i) n \right)^{-1} \quad (5.76)$$

Si se atiende a la dimensión de este término, resulta sencillo apreciar que es

$$(a^4 k_q^4)^{-1} = \frac{\text{erg}^2 \cdot \text{s}^2}{\text{cm}^4 \cdot \text{erg} \cdot \text{cm} \cdot \text{g} \cdot \text{cm}^{-3}} = \frac{\text{erg} \cdot \text{s}^2}{\text{cm}^2 \cdot \text{g}}$$

Puesto que un ergio se puede expresar como

$$\text{erg} = \frac{\text{g} \cdot \text{cm}^2}{\text{s}^2} \quad (5.77)$$

La dimensión de la ecuación (5.76) resulta

$$(a^4 k_q^4)^{-1} = \frac{\text{erg} \cdot \text{s}^2}{\text{cm}^2 \cdot \text{g}} = \frac{\text{erg}}{\text{erg}} = \text{adimensional}$$

mientras que el segundo término se escribe como

$$\begin{aligned} (a^2 k_D^2)^{-1} &= \left( a^2 \frac{4\pi e^2}{k_B T} (1+Z)n \right)^{-1} = \left( a^2 \frac{4\pi e^2}{k_B T} (1+Z) \frac{3}{4\pi a^3} \right)^{-1} = \left( \frac{e^2}{k_B T} \frac{3}{a} (1+Z) \right)^{-1} \\ &\rightarrow (a^2 k_D^2)^{-1} = \frac{1}{3\Gamma(1+Z)} \end{aligned} \quad (5.78)$$

De modo que la ecuación de  $\omega_1(k)$  para plasmas de dos componentes se puede escribir en forma adimensionalizada como

$$\omega_1(q) = \sqrt{\frac{q^4}{k_q^4 a^4} + \frac{q^2}{3\Gamma(1+Z)}} + 1 \quad (5.79)$$

Por otro lado, la ecuación de  $\omega_2(k)$  se escribe como

$$\begin{aligned} \omega_2(k) &= \frac{\omega_p}{\omega_p} \sqrt{1 + K(k) + U(k)} \rightarrow \\ \rightarrow \omega_2(k) &= \sqrt{\left[ 1 + \frac{\langle v_e^2 \rangle k^2}{\omega_p^2} + \left( \frac{\hbar}{2m_e} \right)^2 \frac{k^4}{\omega_p^2} - \frac{v_{int}^2 k^2}{\omega_p^2} \right]} \end{aligned} \quad (5.80)$$

Si se realiza una multiplicación y división de  $a$  de forma análoga al caso de  $\omega_1(k)$ , se obtiene que

$$\begin{aligned} \omega_2(k) &= \sqrt{\left[ 1 + \frac{\langle v_e^2 \rangle k^2 a^2}{\omega_p^2 a^2} + \left( \frac{\hbar}{2m_e} \right)^2 \frac{k^4 a^4}{\omega_p^2 a^4} - \frac{v_{int}^2 k^2 a^2}{\omega_p^2 a^2} \right]} \rightarrow \\ \rightarrow \omega_2(q) &= \sqrt{\left[ 1 + \frac{\langle v_e^2 \rangle q^2}{\omega_p^2 a^2} + \left( \frac{\hbar}{2m_e} \right)^2 \frac{q^4}{\omega_p^2 a^4} - \frac{v_{int}^2 q^2}{\omega_p^2 a^2} \right]} \end{aligned} \quad (5.81)$$

Nuevamente se estudia término a término la ecuación anterior, donde se obtiene que el primer término es

$$\begin{aligned}
 \frac{\langle v_e^2 \rangle}{\omega_p^2 a^2} &= \frac{\frac{3F_{3/2}(\eta)}{m_e \beta D^{3/2}}}{\left( \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m_e}} \right)^2 a^2} = \frac{3F_{3/2}(\eta)}{4\pi n e^2 a^2 \beta D^{3/2}} = \\
 &= \frac{3F_{3/2}(\eta)}{4\pi \frac{3}{4\pi a^3} e^2 a^2 \beta D^{3/2}} = \frac{F_{3/2}(\eta) a}{e^2 \beta D^{3/2}} \rightarrow \\
 &\rightarrow \frac{\langle v_e^2 \rangle}{\omega_p^2 a^2} = \frac{F_{3/2}(\eta)}{\Gamma D^{3/2}} \quad (5.82)
 \end{aligned}$$

mientras que el segundo

$$\begin{aligned}
 \left( \frac{\hbar}{2m_e} \right)^2 \frac{1}{\omega_p^2 a^4} &= \left( \frac{\hbar}{2m_e} \right)^2 \frac{1}{\left( \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m_e}} \right)^2 a^4} = \frac{\hbar^2}{4m_e^2} \frac{m_e}{4\pi n e^2 a^4} = \\
 &= \frac{\hbar^2}{4m_e} \frac{1}{4\pi \frac{3}{4\pi a^3} e^2 a^4} = \frac{\hbar^2}{12m_e} \frac{1}{e^2 a} = \frac{a_B}{12a} \rightarrow \\
 &\rightarrow \left( \frac{\hbar}{2m_e} \right)^2 \frac{1}{\omega_p^2 a^4} = \frac{1}{12r_s} \quad (5.83)
 \end{aligned}$$

finalmente, el tercer término se puede escribir como

$$\begin{aligned}
 \frac{v_{int}^2}{\omega_p^2 a^2} &= \frac{v_{int}^2}{\left( \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m_e}} \right)^2 a^2} = \frac{v_{int}^2 m_e}{4\pi \frac{3}{4\pi a^3} e^2 a^2} = \frac{v_{int}^2 m_e a}{3e^2} \rightarrow \\
 &\rightarrow \frac{v_{int}^2}{\omega_p^2 a^2} = \frac{v_{int}^2}{3\Gamma} \quad (5.84)
 \end{aligned}$$

Si se estudia la dimensión de  $v_{int}^2$  resulta sencillo comprobar que presenta unidades, pues  $\beta$  y  $m_e$  presentan, respectivamente, unidades de *ergio* y *gramo*, por lo que su dimensión es

$$v_{int}^2 = \frac{erg}{g} = \frac{g \cdot cm^2}{s^2 \cdot g} = \frac{cm^2}{s^2}$$

Dado que  $v_{int}^2$  presenta unidades, se debe adimensionalizar el término dividiéndolo entre otro con las mismas unidades, esto es, la velocidad de Fermi al cuadrado

$$\frac{v_{int}^2}{\omega_p^2 a^2} = \frac{v_{int}^2}{3\Gamma v_{th}^2} \quad (5.85)$$

Si se introducen estos cambios en (5.81), se obtiene

$$\omega_2(q) = \sqrt{\left[1 + \frac{F_{3/2}(\eta)q^2}{D^{3/2}\Gamma} + \frac{q^4}{12r_s} - \frac{v_{int}^2 q^2}{3\Gamma v_{th}^2}\right]} \quad (5.86)$$

Para el caso de TCP, la adimensionalización de  $\omega_2(k)$  resulta análoga al caso OCP, pues el factor  $H$  ya es adimensional. De este modo, para un TCP la expresión de  $\omega_2(q)$  adimensionalizada es

$$\omega_2(q) = \sqrt{\left[1 + \frac{F_{3/2}(\eta)q^2}{D^{3/2}\Gamma} + \frac{q^4}{12r_s} - \frac{v_{int}^2 q^2}{3\Gamma v_{th}^2} + H\right]} \quad (5.87)$$

Una vez adimensionalizadas las frecuencias características, se procede a seguir con las funciones y parámetros restantes. La *loss function* se puede escribir como

$$\mathcal{L}(q, \omega) = \frac{\omega_p^2 h_0(q)(\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q))}{[\omega(\omega^2 - \omega_2^2(q))]^2 + h_0^2(q)(\omega^2 - \omega_1^2(q))^2} \quad (5.88)$$

El factor  $h_0(q)$  ya resulta adimensional, dado que depende exclusivamente de las frecuencias  $\omega_1(q)$  y  $\omega_2(q)$ , que ya son adimensionales. Por otro lado, la *loss function* presenta como única dimensión frecuencia al cuadrado, ya que está multiplicada por  $\omega_p^2$ . Para adimensionalizarla, basta con dividirla entre  $\omega_p^2$ , con lo que se obtiene la expresión adimensional

$$\mathcal{L}(q, \omega) = \frac{h_0(q)(\omega_2^2(q) - \omega_1^2(q))}{[\omega(\omega^2 - \omega_2^2(q))]^2 + h_0^2(q)(\omega^2 - \omega_1^2(q))^2} \quad (5.89)$$



Finalmente, la expresión del *Stopping Power* es la siguiente

$$\left[\frac{dE}{dx}\right]^{pol} = \frac{2(Z_p e)^2}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} \omega^2 \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \quad (4.13)$$

En el proyecto se estudiará el parámetro para un valor de número atómico del proyectil genérico, de modo que se toda la ecuación se divide entre  $Z_p^2$ , con lo que se obtiene

$$\left[\frac{dE}{dx}\right]^{pol} = \frac{2e^2}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} \omega^2 \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \quad (5.90)$$

Tal y como se había mencionado anteriormente, se trabaja con la variable  $q = ka$ . Así mismo, la variable  $v$ , que representa la velocidad del proyectil, presenta unidades de velocidad, es decir, de  $cm/s$ , por lo que resulta necesario adimensionalizarla. Siguiendo un proceso similar al empleado con la variable  $k$ , para adimensionalizar la variable  $v$  se introduce la variable  $V = v/v_{th}$ , siendo  $v_{th}$  la velocidad de Fermi. Si se sustituye en la ecuación (5.90) las variables  $k$  y  $v$  por sus formas adimensionalizadas se obtiene

$$\left[\frac{dE}{dx}\right]^{pol} = \frac{2e^2}{\pi(V \cdot v_{th})^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{\frac{q}{a}v_{th} \cdot V} \omega^2 \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \quad (5.91)$$

Si se estudia el límite de la integral respecto a  $\omega$ , se observa que presenta, tal y como debe ser, unidades de frecuencia ( $s^{-1}$ ), por lo que para adimensionalizarlo se debe dividir entre otro parámetro con unidades de frecuencia, esto es  $\omega_p$ :

$$\begin{aligned} \frac{qv_{th}V}{\omega_p a} &= \frac{qV \sqrt{\frac{1}{m_e \beta}}}{a \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m_e}}} = \frac{qV}{a} \sqrt{\frac{1}{\beta 4\pi \frac{3}{4\pi a^3} e^2}} = \frac{qV}{a} a \sqrt{\frac{a}{3\beta e^2}} \rightarrow \\ & \frac{qv_{th}V}{\omega_p a} = \frac{qV}{\sqrt{3\Gamma}} \end{aligned} \quad (5.92)$$

Por otro lado, la dimensión del factor previo a las integrales es, ya realizado el cambio de variables

$$\frac{2e^2}{\pi(V \cdot v_{th})^2} = \frac{erg \cdot cm}{(cm/s)^2} = \frac{erg \cdot s^2}{cm}$$

Lo que no se corresponde con unidades las unidades que debería presentar el *Stopping Power*, que son energía por unidad de longitud (*erg/cm*). Para eliminar las unidades de frecuencia al cuadrado, se multiplica el factor por  $\omega_p^2$ , de modo que la dimensión queda como

$$\frac{2e^2}{\pi(V \cdot v_{th})^2} \omega_p^2 = \frac{erg \cdot s^2}{cm} s^{-2} = \frac{erg}{cm}$$

Algunos de los otros modelos con los que se compara el *Stopping Power* se encuentran en unidades de megaelectronvoltios por mm, por lo que, en dichos casos, se debe multiplicar por un factor de conversión el resultado. Este factor no es más que la equivalencia entre *erg/cm* y *MeV/mm*. Su valor es de 62415.1 .

En cualquier caso, como se ha mencionado anteriormente, si se realiza el estudio de forma adimensional se debe adimensionalizar por completo la expresión del *Stopping Power*. Puesto que los datos con los que se compara se encuentran adimensionalizados por la multiplicación de  $\beta a$ , se sigue el ejemplo y se procede del mismo modo

$$\frac{2e^2 \beta a}{\pi(V \cdot v_{th})^2} \omega_p^2 = \frac{erg}{cm} erg^{-1} cm = adimensional$$

Tras estos desarrollos, se puede finalmente llegar a la expresión del *Stopping Power* en forma adimensional, que presenta la forma

$$\left[ \frac{dE}{dx} \right]^{pol} = \frac{2e^2 \beta a}{\pi(V \cdot v_{th})^2} \omega_p^2 \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{\frac{qV}{\sqrt{3}F}} \omega^2 \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \quad (5.93)$$

## 6. Resultados numéricos

---

Una vez realizados los diferentes cálculos necesarios para reconstruir todos los parámetros que se requieren para aplicar la fórmula de Lindhard en forma adimensional y obtener estimaciones válidas del *Stopping Power*, se está en condiciones de llevar a cabo las pertinentes comparaciones, tanto en OCP como TCP, de este valor con respecto a otros modelos más sofisticados, además de con resultados experimentales reales o de simulación numérica, que permitirán poner de manifiesto la potencia del presente método de trabajo planteado.

Las diferentes representaciones gráficas se han llevado a cabo mediante el programa *Mathematica*. El código empleado con este fin es el que se encuentra en el Anexo II.

Los datos con los que se compara se han obtenido de un informe del Departamento de Física de Plasmas de la Universidad Nacional de Kazajstán llevado a cabo por A. B. Ashikbayeva y S. A. Syzganbayeva [34].

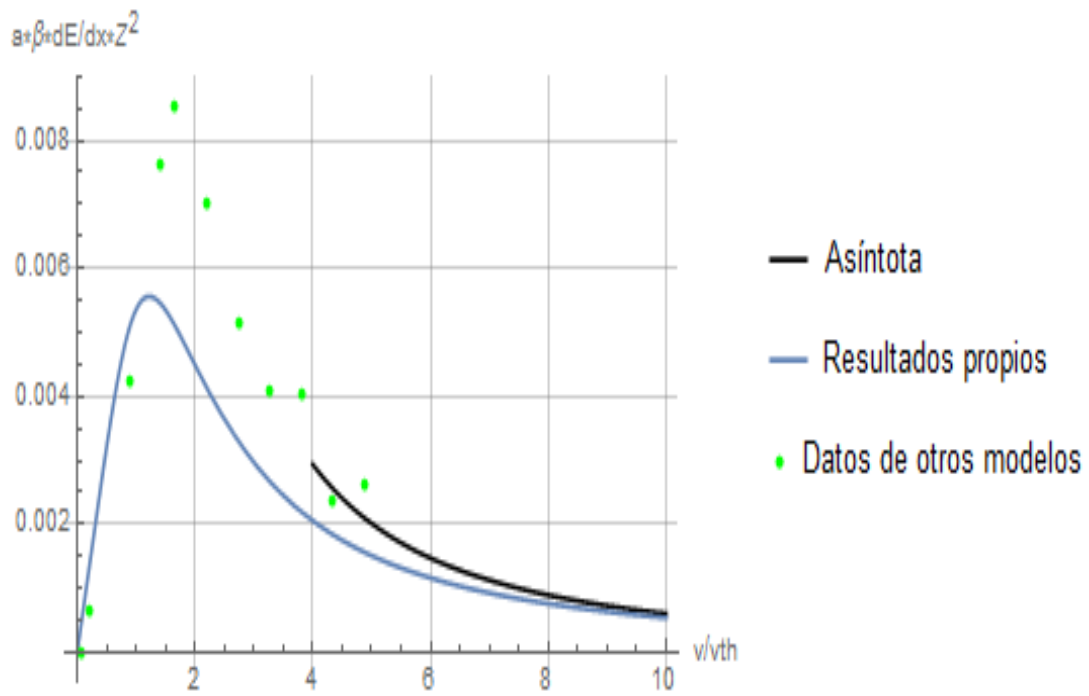
En general, se representa el poder de frenado adimensionalizado frente la velocidad, también adimensional. En algunos casos, tal y como se indica, se representa el *Stopping Power* con unidades de ( $MeV/mm$ ).

Como se podrá observar en las gráficas, según se incrementa la velocidad del proyectil la pérdida de energía por unidad de longitud del mismo se incrementa hasta llegar a un máximo. Este máximo suele alcanzarse cuando la velocidad del proyectil se acerca a la velocidad de Fermi. Una vez alcanzado el máximo, las pérdidas de energía se van reduciendo.

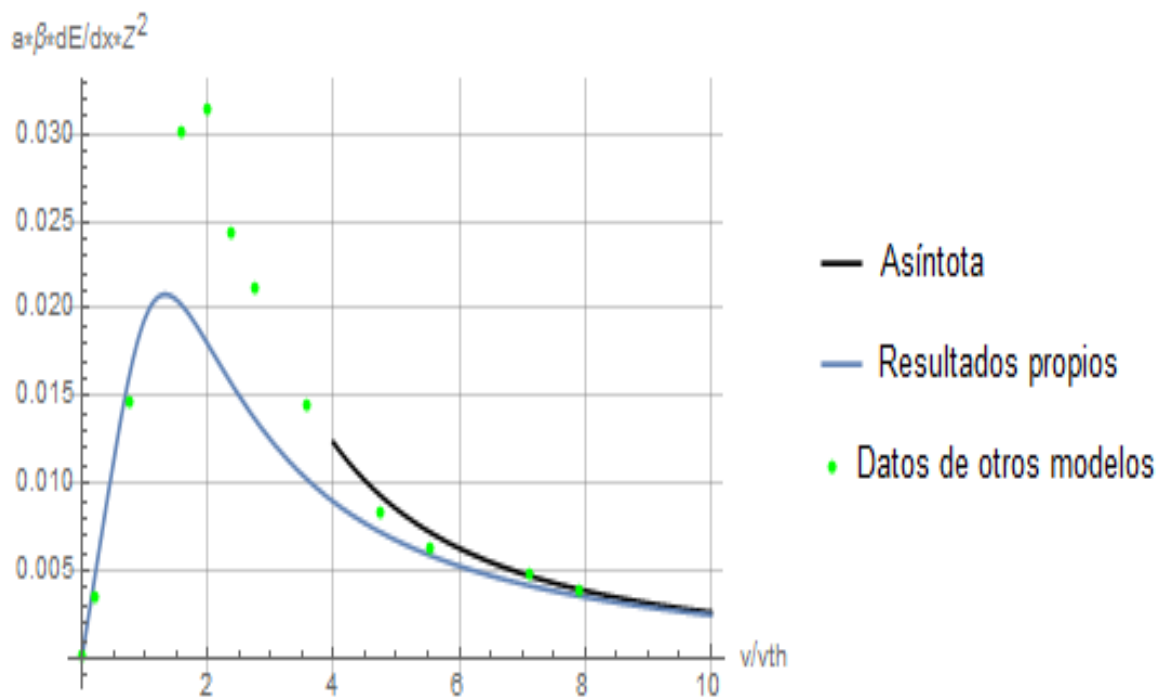
### 6.1. Resultados de *Stopping Power* para varios casos de OCP

En el presente apartado, se procederá a obtener resultados con las ecuaciones obtenidas a lo largo de este trabajo para plasmas de un componente, realizando así mismo una comparación de los mismos con otros resultados experimentales aportados por otros modelos.

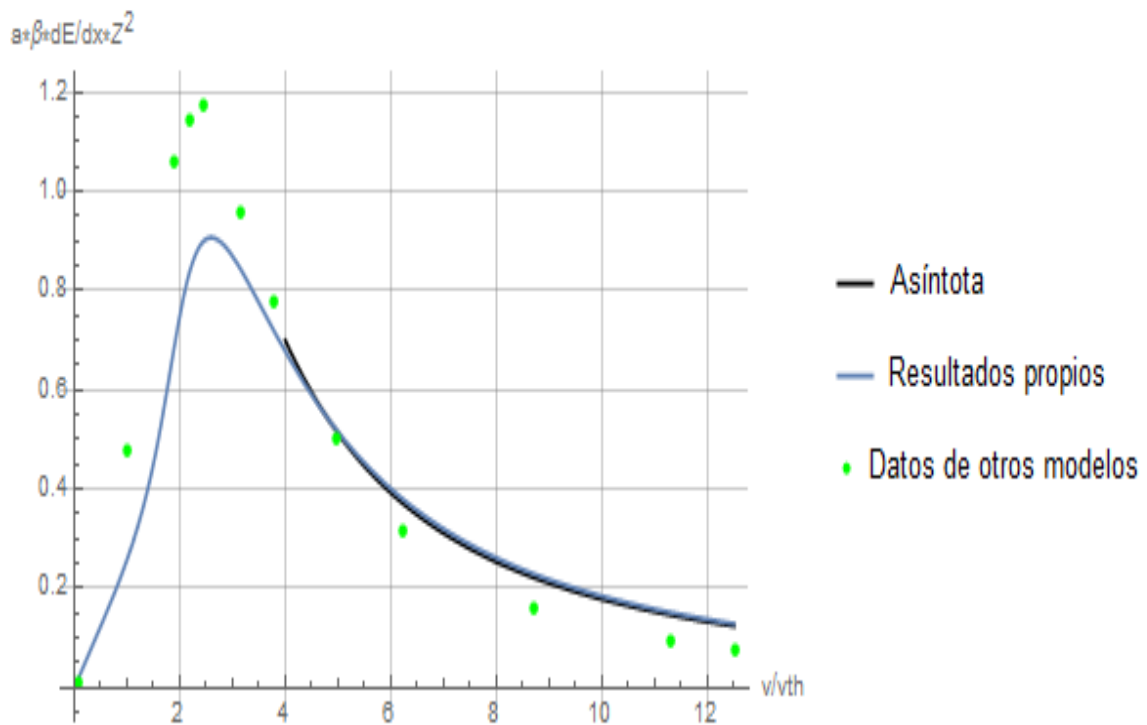
Primero, se presentan los datos comparados resultados de otros modelos representados adimensionalmente:



Gráfica 1. Caso  $r_s = 2.5256$  y  $\Gamma = 0.05$



Gráfica 2. Caso  $r_s = 2.5256$  y  $\Gamma = 0.11$



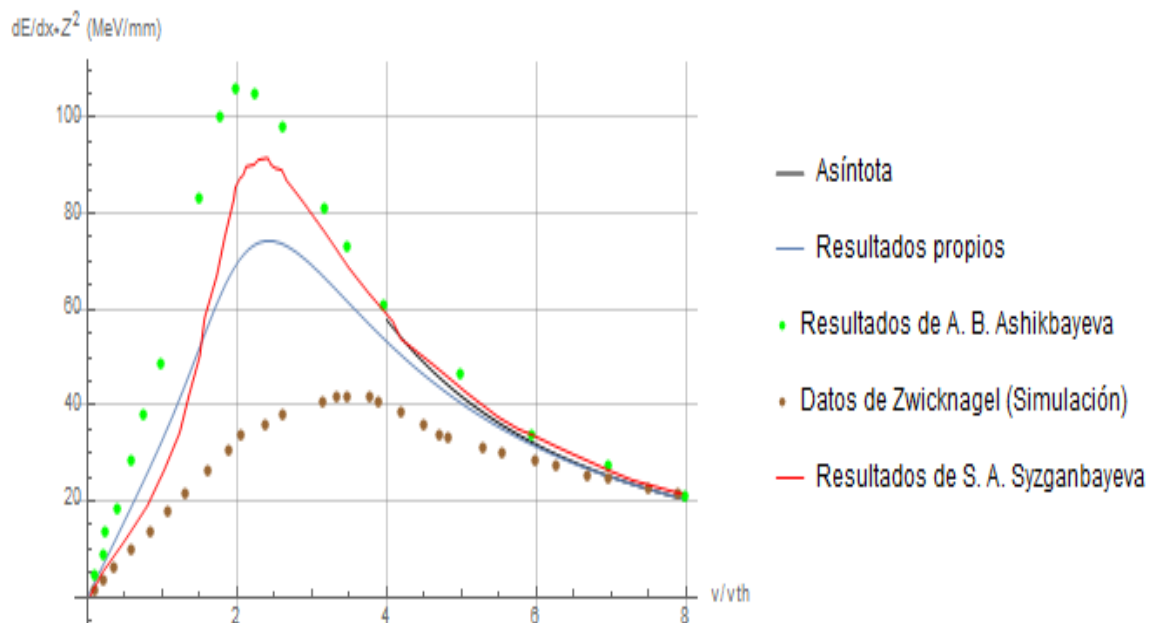
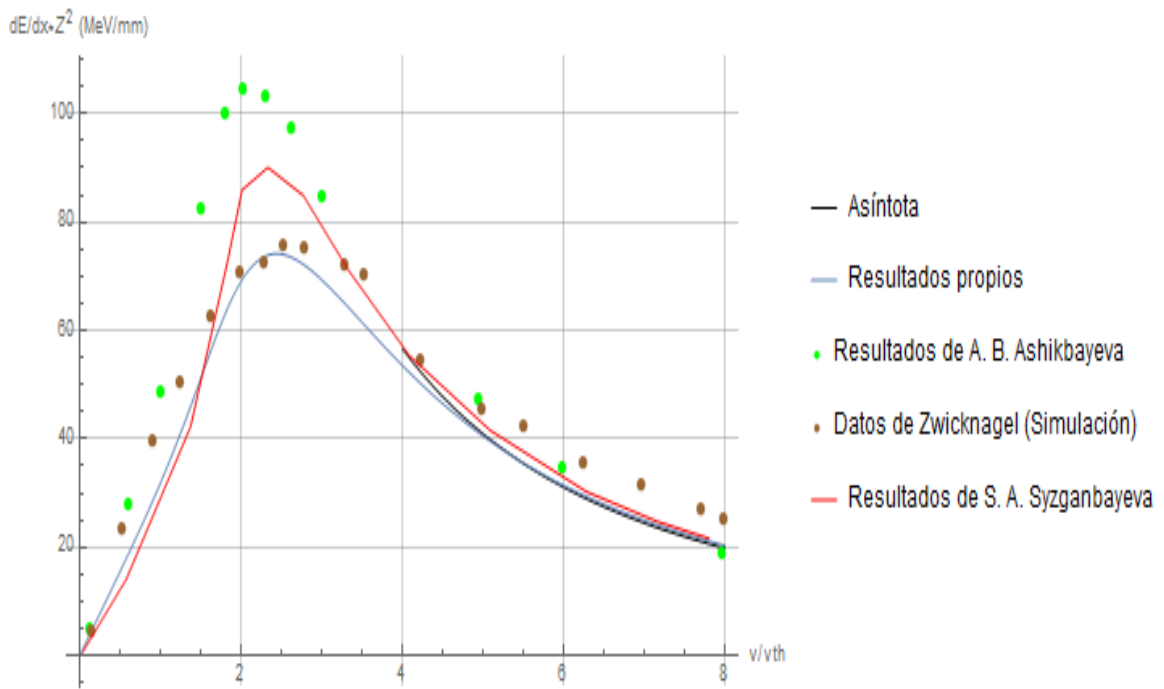
Gráfica 3. Caso  $r_s = 2.5256$  y  $\Gamma = 1.1$

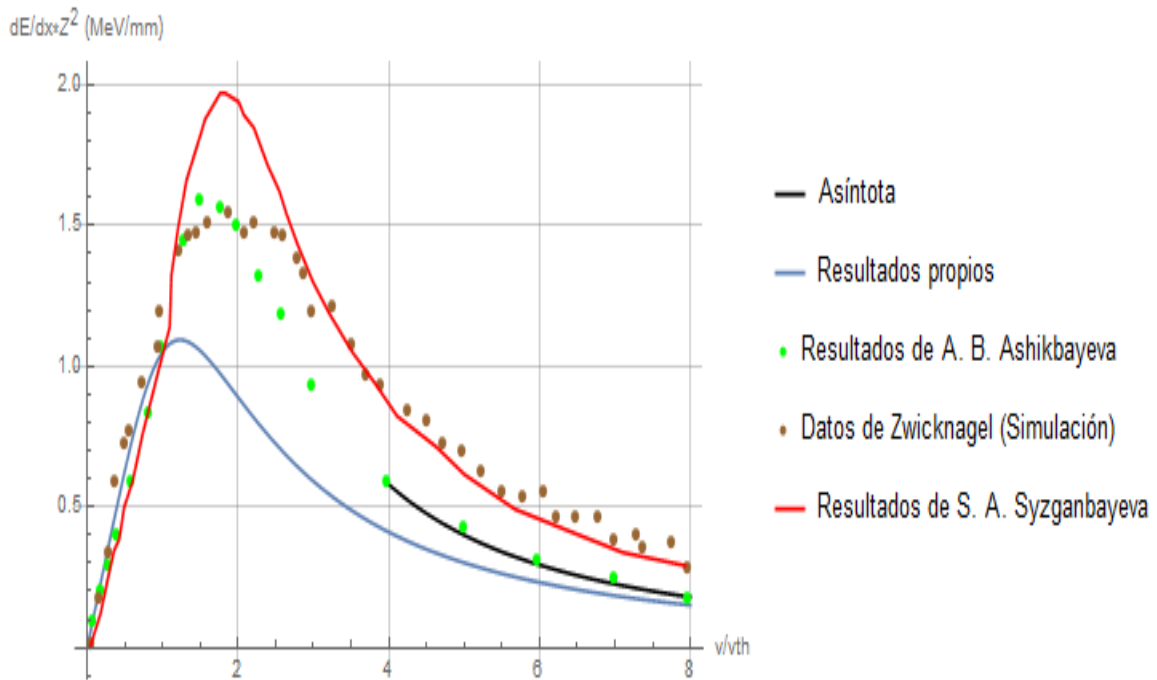
Atendiendo a los resultados de las *Gráficas 1, 2 y 3* se puede apreciar que la asíntota y los resultados del modelo aquí presentado tienen un alto grado de acoplamiento, especialmente cuando se trabaja a velocidades altas.

Por otro lado, los resultados de otros modelos presentan máximos más desplazados a la derecha, especialmente en las *Gráficas 1 y 2*, y significativamente superiores a los máximos del modelo.

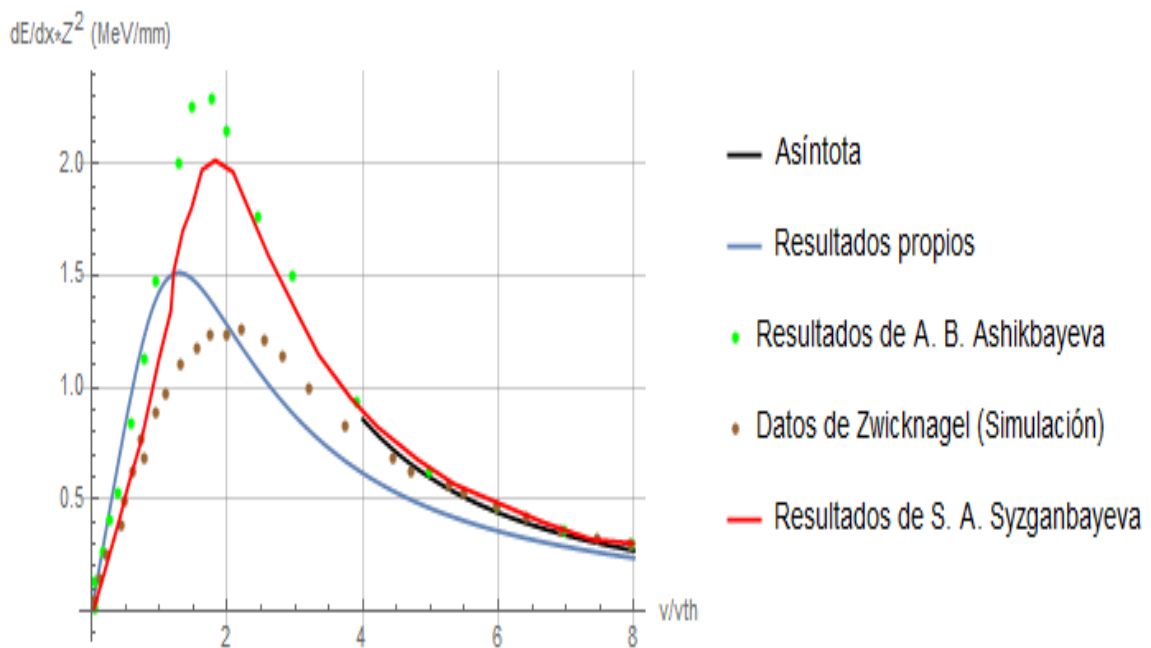
Además de estos resultados, en el informe se incluyen los resultados de una simulación realizada por H. Zwicknagel en [35] comparados con los valores obtenidos por A. B. Ashikbayeva y S. A. Syzganbayeva. Estas gráficas representan el poder de frenado con unidades de  $MeV/mm$  frente a la velocidad del proyectil adimensionalizada.

Puesto que los datos de Zwicknagel son una simulación y se consideran los más precisos, se tomarán como punto de referencia para evaluar la calidad del modelo aquí presentado.





Gráfica 6. Caso  $r_s = 11.797$  y  $\Gamma = 0.145$



Gráfica 7. Caso  $r_s = 11.797$  y  $\Gamma = 0.2365$

Nuevamente, los resultados del modelo de este proyecto se acoplan bien a la asíntota cuando se trabaja a velocidades altas. En general, los resultados del modelo resultan los más próximos a los de simulación. Cabe destacar el caso presentado en la *Gráfica 4*, donde el acoplamiento entre la simulación y el modelo es prácticamente total. Por otro lado, en las *Gráficas 5 y 7* el modelo se aleja de la simulación, especialmente en la zona de máxima energía, aunque resulta significativamente mejor a los modelos de S. A. Syzganbayeva y A. B. Ashikbayeva.

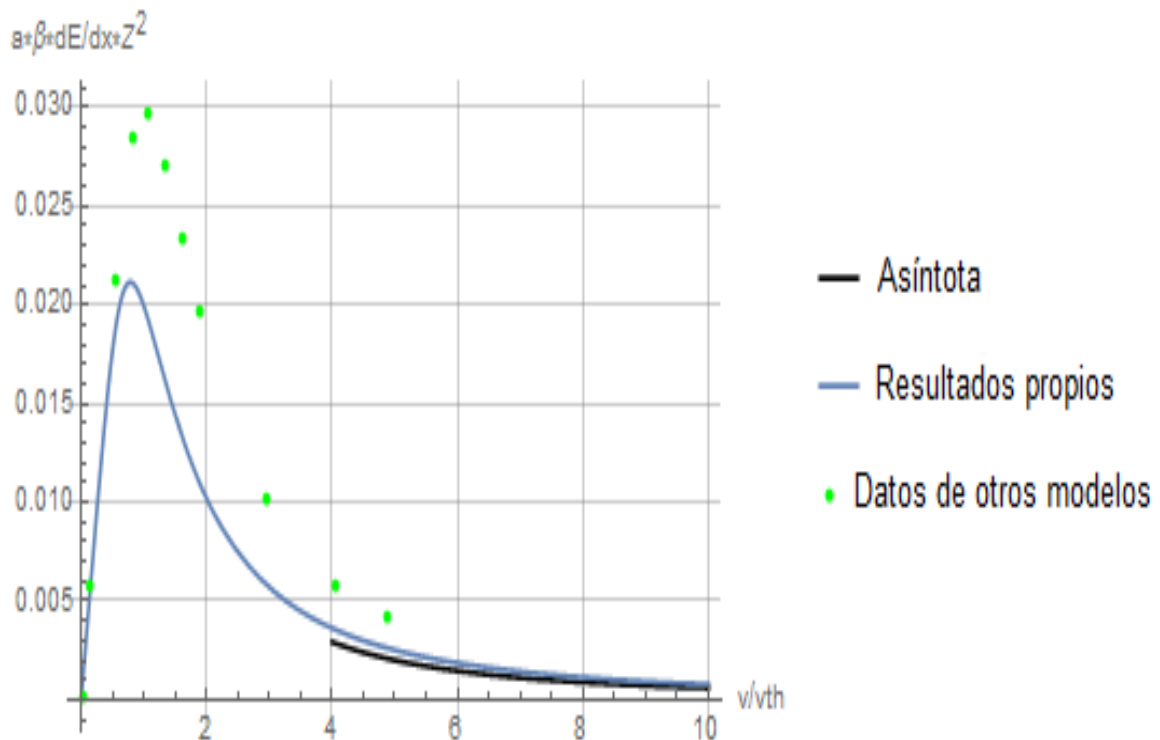
Finalmente, en la *Gráfica 6* se puede apreciar que los resultados del modelo no resultan muy precisos respecto a la simulación, lo que se puede deber a las condiciones de entrada: un factor  $\Gamma$  muy pequeño para un factor  $r_s$  muy grande. Para el mismo factor  $r_s$  y un  $\Gamma$  superior los resultados mejoran significativamente, como se puede comprobar en la *Gráfica 7*.

Puesto que los resultados se adaptan, generalmente, mejor que otros modelos a las simulaciones, tal y como se ha podido comprobar en las *Gráficas 4, 5 y 7*, se entiende que el modelo aquí expuesto produce resultados mejores que los modelos de otros equipos. De este modo, las discrepancias observadas en las *Gráficas 1, 2 y 3* con los resultados de otros equipos se puede deber al mal funcionamiento de los modelos de otros equipos para las condiciones de ensayo establecidas, o simplemente a las diferencias entre los dos métodos, que se ha podido apreciar en las *Gráficas 4, 5, 6 y 7*.

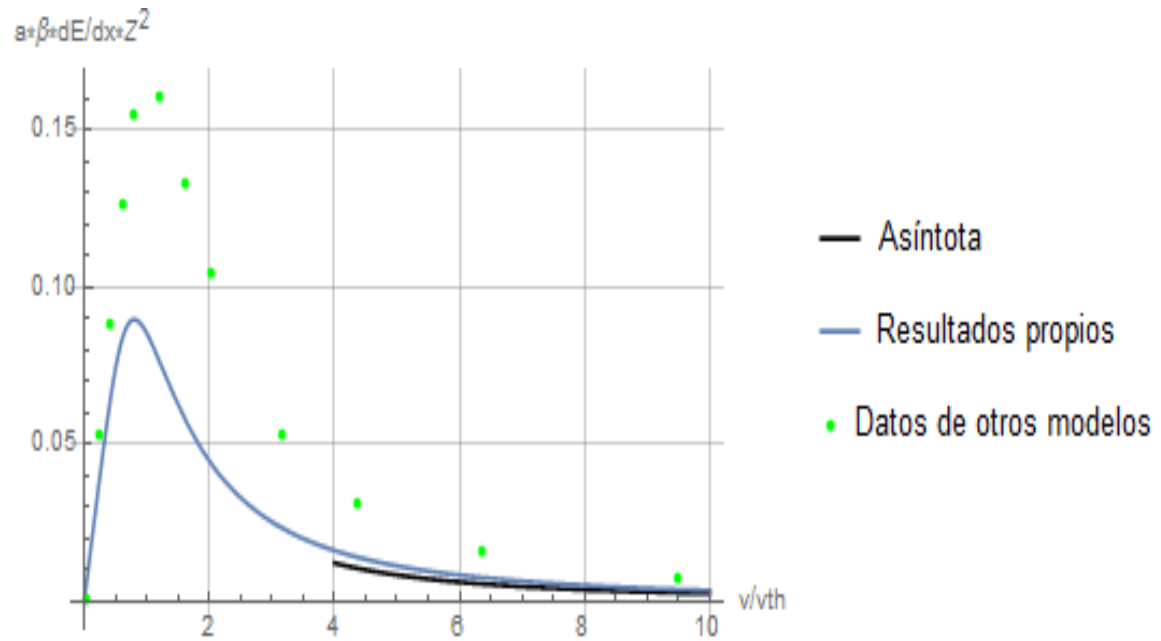


## 6.2. Resultados de *Stopping Power* para varios casos de TCP

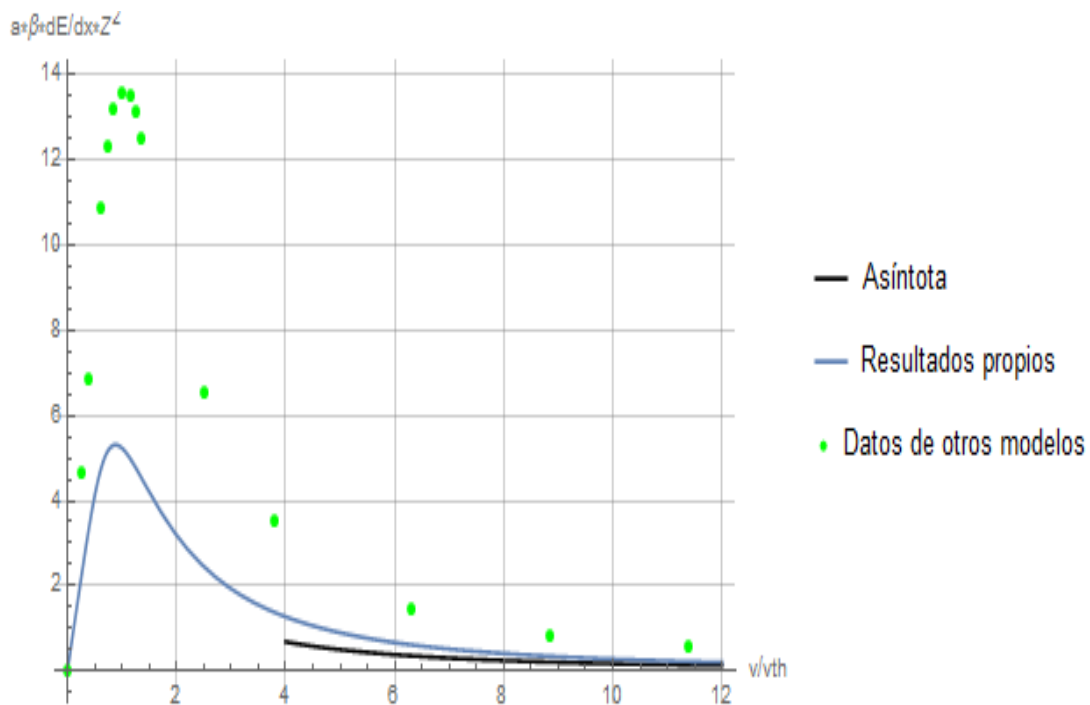
Análogamente al apartado anterior, se procederá a obtener resultados con las ecuaciones obtenidas a lo largo de este trabajo para plasmas de dos componentes, realizando, así mismo, una comparación de los mismos con otros resultados experimentales aportados por otros modelos.



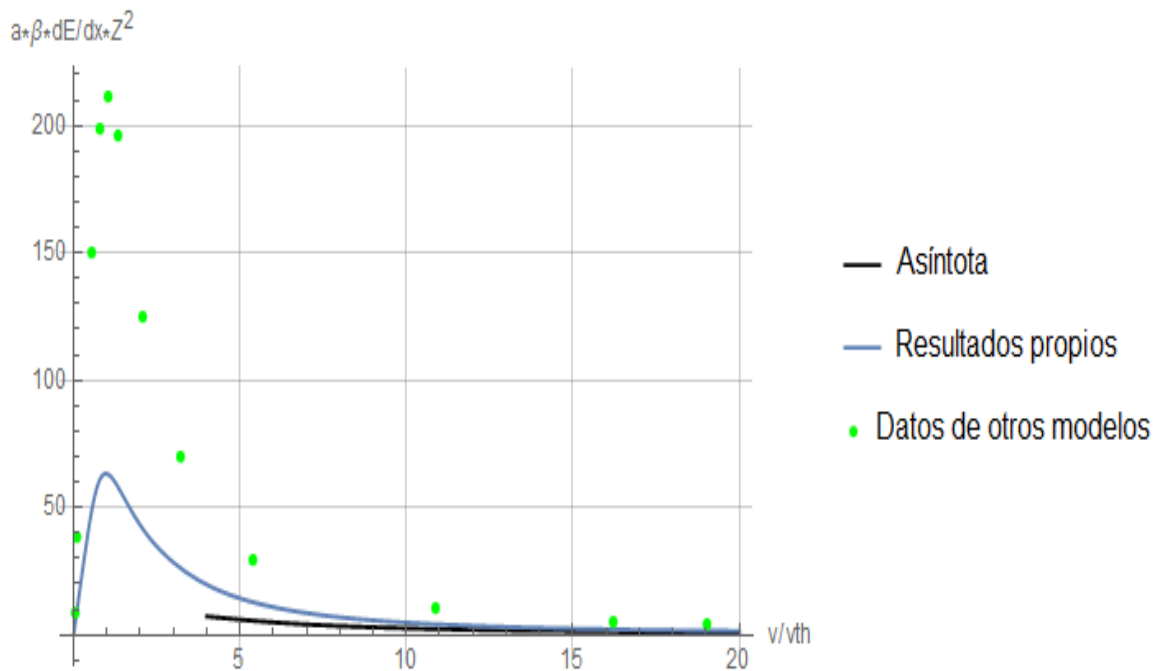
Gráfica 8. Caso  $r_s = 2.5256$  y  $\Gamma = 0.05$



Gráfica 9. Caso  $r_s = 2.5256$  y  $\Gamma = 0.11$



Gráfica 10. Caso  $r_s = 2.5256$  y  $\Gamma = 1.1$



Gráfica 11. Caso  $r_s = 2.5256$  y  $\Gamma = 5$

De forma similar a los casos estudiados en OCP, los resultados para TCP presentan un elevado grado de acoplamiento con la asíntota, especialmente a velocidades altas. Además, los máximos de los otros modelos presentan máximos significativamente superiores a los del modelo aquí presentado. También se encuentran ligeramente desplazados hacia la derecha, como puede apreciarse, especialmente, en las *Gráficas 8 y 9*.

En el caso de TCP no se dispone de datos sobre simulaciones, por lo que resulta difícil establecer si los resultados del modelo aquí presentado son generalmente mejores que los datos de otros modelos. Dado que el funcionamiento con OCP ha resultado generalmente mejor, se puede especular que los resultados de TCP también lo serán. En cualquier caso, el resultado no resulta concluyente por lo que se deberá esperar a que otros equipos publiquen nuevos resultados con los que comparar.

## 7. Conclusiones

---

Los resultados que se han podido comparar con datos de simulación presentan valores muy prometedores, por lo que se puede intuir que el modelo resulta aplicable para la caracterización del *Stopping Power* de una partícula en un plasma OCP fuertemente acoplado. En cualquier caso, debido a que el campo de estudio en el que se centra este proyecto resulta novedoso, no se disponen de suficientes datos en forma de simulaciones con los que dilucidar si el modelo resulta apto o no. Se habla de simulaciones porque los resultados de experimentos prácticos se encuentran, a no ser que cambien las cosas, aún más alejados en el tiempo. Así mismo, los resultados de los otros modelos se encuentran en la misma situación de falta de referencias fiables con las que compararse, por lo que tampoco se puede afirmar que sean mejores o peores.

Lo que sí que se ha podido comprobar en este proyecto es que, tal y como se ha mencionado en líneas anteriores, el modelo parece resultar mejor que otros cuando se trabaja con plasmas OCP en la mayoría de condiciones estudiadas. Teniendo en cuenta la sencillez del método de cálculo aquí presentado, en comparación a los de otros modelos, y el hecho de que es un método pensado para obtener resultados aproximados, estos valores son un pequeño éxito que indica la robustez y utilidad del método. En cualquier caso, la aplicabilidad del método a plasmas de uno y dos componentes en todo tipo de condiciones deberá esperar a nuevos resultados.

El trabajo previo realizado para el desarrollo y comprensión de este proyecto ha dado como resultado la publicación de cuatro artículos científicos: uno en Darmstadt, Alemania, en la revista *News and Reports from High Energy Density Generated by Heavy Ion and Laser Beams 2017* [1], y tres en Kazajstán, siendo dos de ellas publicadas en el “*Libro de Resúmenes del Congreso de Científicos Jóvenes del Ministerio de Educación y cultura de la República de Kazajstán*” [2], [3] y la tercera publicada en la revista *Open Systems* [4]. Además de las publicaciones realizadas, se ha conseguido afianzar una gran cantidad de conocimiento nuevo, tanto en las etapas previas al proyecto como durante la realización del mismo, como por ejemplo el manejo de programas informáticos como *Mathematica*, o la aplicación de nuevas técnicas de análisis matemático, como el formalismo del método de momentos para el tratamiento de funciones de respuesta. Es por esto que, desde un punto de vista personal, se han alcanzado con creces los objetivos planteados. En cualquier caso, puesto que los resultados concretos del trabajo no han resultado del todo concluyentes debido a la falta de evidencia experimental o de simulaciones, se siente la obligación de mantenerse en la línea de investigación a la espera de nuevos resultados con los que comparar para seguir mejorando.

## 8. Posibilidades de mejora

Si se tiene como meta la fusión por confinamiento inercial, se deberían estudiar numerosos fenómenos distintos al *Stopping Power*. Con el método aquí planteado para obtener la función dieléctrica, se podría llevar a cabo un estudio de los algunos de ellos:

La característica conocida como *Stragglng*, que representa una medida de la cantidad de partículas de un haz de partículas que quedan dispersadas sin alcanzar el objetivo que se había previsto teóricamente. La ecuación, similar a la del *Stopping Power*, es la presentada por C. K. Li y R. D. Petrasso en [36]

$$\Lambda^2 = \frac{2(Z\beta e)^2 a \hbar}{\pi v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} \omega^2 \text{Im} \epsilon^{-1}(k, \omega) \text{Coth} \left( \frac{\beta \hbar \omega}{2} \right) d\omega \quad (8.1)$$

Esta ecuación presenta especial interés en el estudio de algunas de las aplicaciones del *Stopping Power* que no se encuentran solamente relacionadas con la fusión nuclear, como la destrucción de células tumorales alojadas en la cavidad craneal, dado que se requiere una focalización óptima del haz para evitar daños en zonas que no presentan actividad tumoral.

Otro parámetro a tener en cuenta en futuras investigaciones es la reflectividad que crean las ondas de choque en la radiación láser por cada capa de plasma denso. Para el cálculo de este parámetro se emplean las ecuaciones presentadas por G. E. Norman e I. Saitov en [37]

$$R = \left| \frac{\sqrt{\epsilon(k, \omega)} - 1}{\sqrt{\epsilon(k, \omega)} + 1} \right|^2 \quad (8.2)$$

$$R_s = \left| \frac{\cos \phi - \sqrt{\epsilon(k, \omega) - \sin^2 \phi}}{\cos \phi + \sqrt{\epsilon(k, \omega) - \sin^2 \phi}} \right|^2 \quad (8.3)$$

$$R_p = \left| \frac{\epsilon(k, \omega) \cos \phi - \sqrt{\epsilon(k, \omega) - \sin^2 \phi}}{\epsilon(k, \omega) \cos \phi + \sqrt{\epsilon(k, \omega) - \sin^2 \phi}} \right|^2 \quad (8.4)$$

donde R representa la fórmula de A. Fresnel para la reflectividad normal de una onda electromagnética y  $R_s$  y  $R_p$  definen, respectivamente, las reflectividades para la polarización s y r.

Por otro lado, existen numerosas consideraciones que se pueden emplear en mejorar la precisión del método de obtención de la función dieléctrica inversa, como por ejemplo la utilización del potencial con el que se caracteriza el plasma,  $\zeta_{ee}(k)$ . En el caso de este proyecto es coulombiano, por lo que  $\zeta_{ee}(k) = 1$ . De cualquier modo, el trabajo podría seguir un enfoque en el cual se considerase un potencial que tomara en cuenta otras premisas, como por ejemplo el potencial de Deutsch, que es ampliamente utilizado y se define como:

$$\xi(k) = \frac{\kappa^2}{k_F^2 + \kappa^2} \quad (8.5)$$

donde

$$\kappa = \sqrt{\frac{2\pi m_e}{\beta \hbar^2}} \quad (8.6)$$

y

$$k_F(k) = (3\pi^2 n)^{1/3} \cdot k \quad (4.4)$$

es el número de ondas de Fermi, definido anteriormente.

En futuros trabajos se podría seguir este tratamiento, para tratar de ajustar aún más los resultados. Otro potencial que podría resultar interesante para el estudio de plasmas granulares sería el de Yukawa.

Por otro lado, también se podría tratar de obtener un método de cálculo del momento  $C_0(k)$  y, por extensión de  $\omega_1(k)$ , que no involucre ningún formalismo matemático externo al del método de momentos (Aquí se obtiene mediante aproximación por RPA).

## 9. Referencias

---

### 9.1. Referencias bibliográficas

- [1] Direct estimate of the hydrogen plasma polarizational stopping power I. M. Tkachenko, J. Ara, Ll. Coloma, Yu. V. Arkhipov, A. B. Ashikbayeva, A. Askaruly, A. E. Davletov, D. Yu. Dubovstev, S. Syzganbayeva; *News and Reports from High Energy Density Generated by Heavy Ion and Laser Beams*, (2017).
- [2] Dubovtsev D. Yu, Syzganbayeva S. A., Santybayev Kh., Ara J., Coloma Ll., pág 251 “*Las propiedades electrodinámicas de plasmas no ideales de un componente*” *Libro de Resúmenes del Congreso de Científicos Jóvenes del Ministerio de Educación y cultura de la República de Kazajstán*” (2018).
- [3] Syzganbayeva S. A., Dubovtsev D. Yu, Santybayev Kh., Ara J., Coloma Ll.; pág. 269 “*El poder de frenado de plasmas de dos componentes*”, *Libro de Resúmenes del Congreso de Científicos Jóvenes del Ministerio de Educación y cultura de la República de Kazajstán*” (2018).
- [4] Yu. V. Arkhipov, A. B. Ashikbayeva, A. Askaruly, A. E. Davletov, D. Yu. Dubovtsev, A. Bourtebaev, E.A. Grushevskaya, K. O. Lyabukhina, M. Nurseitova, S. Syzganbayeva, I. M. Tkachenko, J. Ara, Ll. Coloma; “*Collective processes in a dense one component plasma*”, *Open Systems* (2017).
- [5] Statistical plasma physics. Volume II: Condensed plasmas, S. Ichimaru.
- [6] Canal, R., J. Isern, & J. Labay, 1990, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* 28, 183.
- [7] Hora, H., 1991, *Plasmas at High Temperature and Density* (Springer, Berlin).
- [8] Fortov, V. E., 1982, *Usp. Phys. Nauk* 138, 361 [*Sov. Phys. Usp.* 25, 781 (1983)].
- [9] Pereira, N. R., J. Davis, & N. Rostoker, eds., 1989, *Dense Z-Pinches* (AIP Conference Proceedings 195, New York).
- [10] Mostovych, A. N., K. J. Kearney, J.A. Stamper, & A. J. Schmitt, 1991, *Phys. Rev. Lett.* 66, 612.
- [11] N. Bohr, *Philos. Mag.* 25, 10 (1913), pág. 38.
- [12] H. Bethe, *Ann. Phys. (Leipzig)*, 5, 325 (1930).
- [13] A. I. Larkin, *Zh. Éksp. Teor. Fiz.* 37, 264 (1959) [*Sov. Phys. JETP* 37, 186 (1960)].
- [14] D. Ballester, I. M. Tkachenko, “*Fast-projectile Stopping Power of Quantal Multicomponent Strongly Coupled Plasmas*”, *Phys. Rev. Lett* 101, 075002 (2008).

- [15] Curso de física de Landau, vol. 8: Electrodinámica de los medios continuos. Landau, L. D.; Lifshitz, E.M.
- [16] On the properties of a gas of charged particles, J. Lindhard, K. Dan. Vidensk.Selsk. Mat. Fys. Medd. 28,8 (1954).
- [17] <https://www.ingenieur.de/technik/fachbereiche/medizin/schwere-ionen-zerstoerentumoren-unvorstellbarer-praezision/>
- [18] G. Mahan, Many –Particle Physics, Plenum, New York (1981).
- [19] Investigation of dynamic properties if non-ideal one component plasmas by the method of moments, Abdiadil Askaruly.
- [20] *Curso de física de Landau vol. V: Física estadística*. L. D. Landau, E. M. Lifshitz.
- [21] Algoritmos de reconstrucción de funciones de distribución, I. M. Tkachenko, Marcel Urrea Núñez, Pedro Fdez. de Córdoba Castellá.
- [22] T. Stieltjes, “*Quelques recherches sur la théorie des quadratures dites mécaniques*” Ann. Éc. Norm., 1, 409-426 (1884).
- [23] T. J. Stieltjes, “*Recherches sur les fractions continues*”, Annals de la Faculté des Sciences de Toulouse, 9, 1 (1895).
- [24] R. Nevanlinna, “*Asymptotische Entwicklungen, beschränkter Funktionen und das Stieltjessche Momentproblem*”, Ann. Acad. Sci. Fenn. A, 18, 5 (1922).
- [25] R. Nevanlinna, “*Über beschränkte analytische Funktionen*”, Ann. Acad. Sci. Fenn. A, 32, 1-75 (1929).
- [26] The method of moments and its applications in plasma physics, I. M. Tkachenko, Y. V. Arkhipov, A. Askaruly.
- [27] D. Bohm and D. Pines, Phys. Rev. B 82, 625 (1951).
- [28] D. Pines and D. Bohm, Phys. Rev. B 85, 338 (1952).
- [29] D. Bohm and D. Pines, Phys. Rev. B 92, 609 (1953).
- [30] [https://www.researchgate.net/post/What\\_is\\_the\\_RPARandom-phase\\_approximation\\_Calculation\\_is\\_it\\_TDDFT\\_or\\_not](https://www.researchgate.net/post/What_is_the_RPARandom-phase_approximation_Calculation_is_it_TDDFT_or_not)
- [31] Yu.V. ARKHIPOV, A.B. ASHIKBAYEVA, A. ASKARULY, A.E. DAVLETOV, D.Yu. DUBOVTSEV, and I.M. TKACHENKO, “Screened Effective Interaction Potential for Two-Component Plasmas”, Contributions to Plasma Phys. 56 (2016) 403-410.
- [32] I. M. Tkachenko, Yu. V. Arkhipov, A. B. Ashikbayeva, A. Askaruly, and A. E. Davletov, PHYSICAL REVIEW E **90**, 053102 (2014).



- [33] G. Chabrier and A. Y. Potekhin, Phys. Rev. E 58, 4941 (1998).
- [34] [“*Stopping Power: Informe interno del departamento de física de plasmas de la Universidad Nacional de Kazajstán*”. A. B. Ashikbayeva.
- [35] Theory and simulation of heavy ion stopping in plasma, G. Zwicknagel, Lase and Particle Beams (2009), 27, 399-413.
- [36] Stopping, straggling, and blooming of directed energetic electrons in hydrogenic and arbitrary-Z plasmas, C. K. Li; R. D. Petrasso, Physical review E 73, 016402 (2006).
- [37] Influence of optical non-uniformity on the reflectance of dense plasmas, G.E. Norman, Ilnur Saitov.
- [38] M. G. Krein, A.A. Nudel'man, *The Markov moment problem and extremal problems*, Trans. Of Math. Monographs, 50, Amer. Math. Soc., Providence, R.I. (1977)
- [39] N.I. Akhiezer, *The classical moment problema and some related questions in analysis*, Hafner Publishing Company, N.Y. (1965)

## 9.2. Referencias de imágenes

- [I. 1] James D. Callen, Fundamentals of plasma physics
- [I. 2] <https://www.tiempo.com/ram/71922/rayos-que-no-truenan/>
- [I. 3] <http://www.astrophysics.fi/index.php?d=pr&p=head>
- [I. 4] <http://desenvolupamentsostenible.org/es/4-recursos-naturales-y-fuentes-de-energia/figura-415-evolucion-del-consumo-energetico-mundial-segun-tipo-de-fuente>
- [I. 5] [https://es.wikipedia.org/wiki/Fusi%C3%B3n\\_nuclear](https://es.wikipedia.org/wiki/Fusi%C3%B3n_nuclear)
- [I. 6] <https://energia-nuclear.net/que-es-la-energia-nuclear/fision-nuclear>
- [I. 7] <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/NucEne/nucbin.html>
- [I. 8] <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Forces/funfor.html>
- [I. 9] <http://cienciasolar.eu/tecnologia/articulos/fusionb.html>
- [I. 10] <https://lasers.llnl.gov/science/icf>
- [I. 11] <https://lasers.llnl.gov/science/icf/how-icf-works>
- [I.12] [https://warwick.ac.uk/fac/sci/physics/research/cfsa/people/gericke/projects/physplasmas\\_11\\_339.pdf](https://warwick.ac.uk/fac/sci/physics/research/cfsa/people/gericke/projects/physplasmas_11_339.pdf)
- [I. 13] Miyamoto, K. “*Plasma Physics for controlled fusion*”
- [I. 14] <https://www.ingenieur.de/technik/fachbereiche/medizin/schwere-ionen-zerstoeren-tumoren-unvorstellbarer-praезision>





UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA  
SUPERIOR INGENIEROS  
INDUSTRIALES VALENCIA

**TRABAJO DE FINAL DE GRADO DE INGENIERÍA QUÍMICA**

COLOMA DE LA FUENTE, LLUÍS

EVALUACIÓN DE LOS RESULTADOS DE DIAGNÓSTICO DE  
PLASMAS DENSOS BASADA EN EL MÉTODO DE MOMENTOS  
CLÁSICO

# ANEXOS

**Curso académico: 2017-18**

## **Índice de anexos:**

Anexo I: Desarrollo de los polinomios ortonormalizados empleados en la transformada lineal-fraccional de Nevanlinna.....	1
Anexo II: Código empleado en <i>Mathematica</i> para las representaciones del <i>Stopping Power</i> de OCP y TCP.....	9

## Índice de capturas de pantalla:

<i>Captura de pantalla 1.</i> Datos de entrada. ....	9
<i>Captura de pantalla 2.</i> Constantes físicas. ....	9
<i>Captura de pantalla 3.</i> Datos dependientes de la entrada I. ....	10
<i>Captura de pantalla 4.</i> Datos dependientes de la entrada II. ....	10
<i>Captura de pantalla 5.</i> Definición de $\omega_1(q)$ para OCP. ....	11
<i>Captura de pantalla 6.</i> Definición de $k_q$ y $\omega_1(q)$ para TCP. ....	11
<i>Captura de pantalla 7.</i> Cálculo del factor $\eta$ y resolución de $F_{3/2}(\eta)$ para $\omega_2(q)$ . .....	11
<i>Captura de pantalla 8.</i> Definición de los valores de $v_{int}^2$ para $\omega_2(q)$ . .....	12
<i>Captura de pantalla 9.</i> Definición de $\omega_2(q)$ para OCP. ....	12
<i>Captura de pantalla 10.</i> Definición del factor H y de $\omega_2(q)$ . ....	12
<i>Captura de pantalla 11.</i> Definición del parámetro $h_0(q)$ y de la <i>loss function</i> . .....	13
<i>Captura de pantalla 12.</i> Código para la representación del <i>Stopping Power</i> adimensional. Resultado en la gráfica para el caso TCP. ....	13
<i>Captura de pantalla 13.</i> Código para la representación del <i>Stopping Power</i> en (MeV/mm). Resultado en la gráfica para el caso OCP.....	14
<i>Captura de pantalla 14.</i> Código para la representación de la asíntota adimensional. .....	15
<i>Captura de pantalla 15.</i> Código para la representación de la asíntota en (MeV/mm). .....	15
<i>Captura de pantalla 16.</i> Código para importar y representar los datos de otros modelos. .....	16
<i>Captura de pantalla 17.</i> Código para comparar los resultados con otros modelos. .....	16



**Anexo I: Desarrollo de los polinomios ortonormalizados empleados en la transformada linear-fraccional de Nevanlinna**

Sea la función

$$E_j(z, k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D_j(\omega, k) - D(z, k)}{\omega - z} \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \quad (A1.1)$$

Los polinomios  $D_j(z, k)$ ,  $j = 0, 1, 2, 3$  son ortogonales respecto a  $\epsilon(k, \omega)$ , al igual que sus contrapartes conjugadas  $E_j(z, k)$ ,  $j = 0, 1, 2, 3$ , determinándose éstas mediante la ecuación anterior. Así mismo, los coeficientes de los polinomios  $D_j(z, k)$  y  $E_j(z, k)$  son todos reales, tal y como establecieron M. G. Krein y otros en [38] y N. I. Akhiezer en [39].

En referencia a la medida de la función  $d\mathcal{L}(k, \omega)$ , se tiene que los polinomios ortonormalizados  $D_j(z, k)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} D_n(z, k) D_m(z, k) d\mathcal{L}(z, k) = \delta_{nm} \quad n, m = 0, 1 \dots \quad (A1.2)$$

y que  $E_j(z, k)$  son sus polinomios conjugados

$$E_j(z, k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D_j(\omega, k) - D(z, k)}{\omega - z} \mathcal{L}(k, \omega) d\omega \quad (A1.1)$$

tales que

$$D_j(\omega, k) = \frac{1}{\sqrt{\Delta_j \Delta_{j-1}}} \det \begin{bmatrix} C_0 & \cdots & C_{j-1} & 1 \\ C_1 & \cdots & C_j & \omega \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ C_j & \cdots & C_{2j-1} & \omega^j \end{bmatrix} \quad j = 1, 2, \dots \quad (A1.3)$$

siendo

$$\Delta_j = \det \begin{bmatrix} C_0 & \cdots & C_j \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ C_j & \cdots & C_{2j} \end{bmatrix} \quad j = 1, 2, \dots \quad (A1.4)$$



Con el fin de que el desarrollo tenga consistencia matemática, se establece que

$$\Delta_{-1} = 1 \quad (A1.5)$$

y que

$$D_0(z, k) = \frac{1}{\sqrt{C_0(k)}} \quad (5.12)$$

Previo al desarrollo de los diferentes polinomios, resulta importante remarcar algunas de las propiedades más importantes de los polinomios ortonormalizados:

- Los ceros de los polinomios  $E_j(z, k)$  y  $D_j(z, k)$ ,  $j \in \mathbb{N}$ , son todos reales.
- Los ceros de los polinomios  $D_j(z, k)$  y  $D_{j-1}(z, k)$ ,  $j \in \mathbb{N}$ , son todos reales y alternados. Los ceros de los polinomios  $D_j(z, k)$  y  $E_j(z, k)$ ,  $j \in \mathbb{N}$ , son alternados.

Una vez consideradas estas premisas, se procede a ejecutar el cálculo de los diferentes polinomios. Puesto que se necesitan polinomios de  $E_j(z, k)$  y  $D_j(z, k)$  de segundo y tercer grado para reconstruir la función dieléctrica, se procede a resolver el problema comenzando por calcular los diferentes valores de  $\Delta_j$ , desde  $j = 0$  hasta  $j = 3$ :

$$\Delta_0 = \det[C_0] = C_0 \quad (A1.6)$$

$$\Delta_1 = \det \begin{bmatrix} C_0 & C_1 \\ C_1 & C_2 \end{bmatrix} = C_0 C_2 - C_1^2 \quad (A1.7)$$

$$\Delta_2 = \det \begin{bmatrix} C_0 & C_1 & C_2 \\ C_1 & C_2 & C_3 \\ C_2 & C_3 & C_4 \end{bmatrix} = C_0 C_2 C_4 + 2C_1 C_2 C_3 - C_2^3 - C_1^2 C_4 - C_0 C_3^2 \quad (A1.8)$$

$$\begin{aligned} \Delta_3 = \det \begin{bmatrix} C_0 & C_1 & C_2 & C_3 \\ C_1 & C_2 & C_3 & C_4 \\ C_2 & C_3 & C_4 & C_5 \\ C_3 & C_4 & C_5 & C_6 \end{bmatrix} = \\ = C_1^2 C_5^2 - C_6 C_1^2 C_4 + 2C_6 C_1 C_2 C_3 - 2C_1 C_2 C_4 C_5 - 2C_1 C_3^2 C_5 + 2C_1 C_3 C_4^2 \\ - C_6 C_2^3 + 2C_2^2 C_3 C_5 + C_2^2 C_4^2 - 3C_2 C_3^2 C_4 + C_0 C_6 C_2 C_4 - C_0 C_2 C_5^2 + C_3^4 \\ - C_0 C_6 C_3^2 + 2C_0 C_3 C_4 C_5 \\ - C_0 C_4^3 \end{aligned} \quad (A1.9)$$

Seguidamente, se procede al cálculo de  $D_j(z, k)$  mediante la ecuación (A1.3)

$$\begin{aligned}
 D_1(\omega, k) &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_1 \Delta_0}} \det \begin{bmatrix} C_0 & 1 \\ C_1 & \omega \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\Delta_0 \Delta_1}} \det \begin{bmatrix} C_0 & 1 \\ C_1 & \omega \end{bmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_0 \Delta_1}} (C_0 \omega - C_1) \rightarrow \\
 \rightarrow D_1(\omega, k) &= \frac{C_0 \omega - C_1}{\sqrt{\Delta_0 \Delta_1}} \quad (A1.10)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D_2(\omega, k) &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_1 \Delta_2}} \det \begin{bmatrix} C_0 & C_1 & 1 \\ C_1 & C_2 & \omega \\ C_2 & C_3 & \omega^2 \end{bmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_1 \Delta_2}} (\omega^2 C_0 C_2 + \omega C_1 C_2 + C_1 C_3 - C_2^2 - \omega^2 C_1^2 - \omega C_0 C_3) \rightarrow \\
 \rightarrow D_2(\omega, k) &= \frac{\omega^2 (C_0 C_2 - C_1^2) + \omega (C_1 C_2 - C_0 C_3) + (C_1 C_3 - C_2^2)}{\sqrt{\Delta_1 \Delta_2}} \quad (A1.11)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D_3(\omega, k) &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_3 \Delta_2}} \det \begin{bmatrix} C_0 & C_1 & C_2 & 1 \\ C_1 & C_2 & C_3 & \omega \\ C_2 & C_3 & C_4 & \omega^2 \\ C_3 & C_4 & C_5 & \omega^3 \end{bmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_3 \Delta_2}} (C_5 C_1^2 \omega^2 - C_1^2 C_4 \omega^3 + 2C_1 C_2 C_3 \omega^3 - C_1 C_2 C_4 \omega^2 - C_5 C_1 C_2 \omega - C_1 C_3^2 \omega^2 \\
 &\quad + C_1 C_3 C_4 \omega - C_5 C_1 C_3 + C_1 C_4^2 - C_2^3 \omega^3 + C_2^2 C_3 \omega^2 + C_2^2 C_4 \omega + C_5 C_2^2 \\
 &\quad - C_2 C_3^2 \omega - 2C_2 C_3 C_4 + C_0 C_2 C_4 \omega^3 - C_0 C_5 C_2 \omega^2 + C_3^3 - C_0 C_3^2 \omega^3 \\
 &\quad + C_0 C_3 C_4 \omega^2 + C_0 C_5 C_3 \omega - C_0 C_4^2 \omega) \rightarrow \\
 \rightarrow D_3(\omega, k) &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_3 \Delta_2}} [\omega^3 (2C_1 C_2 C_3 + C_0 C_2 C_4 - C_1^2 C_4 - C_2^3 - C_0 C_3^2) \\
 &\quad + \omega^2 (C_1^2 C_5 + C_2^2 C_3 + C_0 C_3 C_4 - C_1 C_2 C_4 - C_1 C_3^2 - C_0 C_2 C_5) \\
 &\quad + \omega (C_1 C_3 C_4 + C_2^2 C_4 + C_0 C_3 C_5 - C_1 C_2 C_5 - C_2 C_3^2 - C_0 C_4^2) + (C_1 C_4^2 \\
 &\quad + C_2^2 C_5 + C_3^3 - C_1 C_3 C_5 \\
 &\quad - 2C_2 C_3 C_4)] \quad (A1.12)
 \end{aligned}$$

Para simplificar, se toma la nomenclatura siguiente

$$\rho = 2C_1C_2C_3 + C_0C_2C_4 - C_1^2C_4 - C_2^3 - C_0C_3^2 \quad (A1.13)$$

$$\sigma = C_1^2C_5 + C_2^2C_3 + C_0C_3C_4 - C_1C_2C_4 - C_1C_3^2 - C_0C_2C_5 \quad (A1.14)$$

$$\vartheta = C_1C_3C_4 + C_2^2C_4 + C_0C_3C_5 - C_1C_2C_5 - C_2C_3^2 - C_0C_4^2 \quad (A1.15)$$

$$\varepsilon = C_1C_4^2 + C_2^2C_5 + C_3^3 - C_1C_3C_5 - 2C_2C_3C_4 \quad (A1.16)$$

Obteniéndose de este modo

$$D_3(\omega, k) = \frac{\omega^3\rho + \omega^2\sigma + \omega\vartheta + \varepsilon}{\sqrt{\Delta_3\Delta_2}} \quad (A1.17)$$

Una vez obtenidas las expresiones generales para los polinomios  $D_j(\omega, k)$  se procede a llevar a cabo el cálculo de los  $E_j(z, k)$

$$\begin{aligned} E_0(z, k) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{D_0(\omega, k) - D_0(t, k)}{z - \omega} d\mathcal{L}(\omega, k) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{1}{\sqrt{C_0}} - \frac{1}{\sqrt{C_0}}}{z - \omega} d\mathcal{L}(\omega, k) \rightarrow \\ &\rightarrow E_0(z, k) = 0 \end{aligned} \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} E_1(z, k) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{C_0z - C_1}{\sqrt{\Delta_0\Delta_1}} - \frac{C_0\omega - C_1}{\sqrt{\Delta_0\Delta_1}}}{z - \omega} d\mathcal{L}(\omega, k) = \\ &= \frac{C_0}{\sqrt{\Delta_0\Delta_1}} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{L}(t, k) = \frac{C_0}{\sqrt{\Delta_0\Delta_1}} C_0 \rightarrow \\ &\rightarrow E_1(z, k) = \frac{C_0^2}{\sqrt{\Delta_0\Delta_1}} \end{aligned} \quad (A1.18)$$

$$\begin{aligned}
 E_2(z, k) &= \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{z^2(C_0C_2 - C_1^2) + z(C_1C_2 - C_0C_3) + (C_1C_3 - C_2^2)}{\sqrt{\Delta_1\Delta_2}} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\omega^2(C_0C_2 - C_1^2) + \omega(C_1C_2 - C_0C_3) + (C_1C_3 - C_2^2)}{\sqrt{\Delta_1\Delta_2}} \right] d\mathcal{L}(\omega, k) = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{z^2(C_0C_2 - C_1^2) + z(C_1C_2 - C_0C_3) + (C_1C_3 - C_2^2)}{\sqrt{\Delta_1\Delta_2}} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\omega^2(C_0C_2 - C_1^2) + \omega(C_1C_2 - C_0C_3) + (C_1C_3 - C_2^2)}{\sqrt{\Delta_1\Delta_2}} \right] d\mathcal{L}(\omega, k) = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_1\Delta_2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(z^2 - \omega^2)(C_0C_2 - C_1^2) + (z - \omega)(C_1C_2 - C_0C_3)}{z - \omega} d\mathcal{L}(\omega, k) = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_1\Delta_2}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{(z - \omega)(z + \omega)(C_0C_2 - C_1^2)}{z - \omega} + \frac{(z - \omega)(C_1C_2 - C_0C_3)}{z - \omega} \right) d\mathcal{L}(\omega, k) \right) = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_1\Delta_2}} \left( \int_{-\infty}^{\infty} (z(C_0C_2 - C_1^2) + \omega(C_0C_2 - C_1^2) + (C_1C_2 - C_0C_3)) d\mathcal{L}(\omega, k) \right) = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_1\Delta_2}} \left( z(C_0C_2 - C_1^2) \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{L}(\omega, k) + (C_0C_2 - C_1^2) \int_{-\infty}^{\infty} \omega d\mathcal{L}(\omega, k) \right. \\
 &\quad \left. + (C_1C_2 - C_0C_3) \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{L}(\omega, k) \right) \rightarrow \\
 \rightarrow E_2(z, k) &= \frac{(z(C_0C_2 - C_1^2)C_0 + (C_0C_2 - C_1^2)C_1 + (C_1C_2 - C_0C_3)C_0)}{\sqrt{\Delta_1\Delta_2}} \quad (A1.19)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 E_3(z, k) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{z^3 \rho + z^2 \sigma + z \vartheta + \varepsilon}{\sqrt{\Delta_3 \Delta_2}} - \frac{\omega^3 \rho + \omega^2 \sigma + \omega \vartheta + \varepsilon}{\sqrt{\Delta_3 \Delta_2}}}{z - \omega} d\mathcal{L}(\omega, k) = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_3 \Delta_2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z^3 \rho + z^2 \sigma + z \vartheta - \omega^3 \rho + \omega^2 \sigma + \omega \vartheta}{z - \omega} d\mathcal{L}(\omega, k) = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_3 \Delta_2}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(z^3 - \omega^3) + \sigma(z^2 - \omega^2) + \vartheta(z - \omega)}{z - \omega} d\mathcal{L}(\omega, k) = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_3 \Delta_2}} \left( \rho \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(z - \omega)(z^2 + z\omega + \omega^2)}{z - \omega} d\mathcal{L}(\omega, k) + \sigma \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(z - \omega)(z + \omega)}{z - \omega} d\mathcal{L}(\omega, k) \right. \\
 &\quad \left. + \vartheta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{z - \omega}{z - \omega} d\mathcal{L}(\omega, k) \right) = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\Delta_3 \Delta_2}} (\rho z^2 C_0 + \rho z C_1 + \rho C_2 + \sigma z C_0 + \sigma C_1 + \vartheta C_0) \rightarrow \\
 \rightarrow E_3(z, k) &= \frac{\rho(z^2 C_0 + z C_1 + C_2) + \sigma(z C_0 + C_1) + \vartheta C_0}{\sqrt{\Delta_3 \Delta_2}} \quad (A1.20)
 \end{aligned}$$

Una vez obtenidos todos los polinomios de forma genérica para cualquier densidad, se procede a aplicar la condición de que, dado que la distribución del problema es una función de respuesta par, todos los momentos impares se anulan. De este modo, se obtienen los polinomios siguientes:

$$D_0(z, k) = \frac{1}{\sqrt{C_0(k)}} \quad (5.12)$$

$$D_1(z, k) = \frac{z}{\sqrt{C_2(k)}} \quad (5.13)$$

$$D_2(z, k) = \frac{z^2 C_0 C_2 - C_2^2}{\sqrt{(C_0 C_2)(C_0 C_2 C_4 - C_2^3)}} = \frac{C_2 C_0 \left( z^2 - \frac{C_2}{C_0} \right)}{C_2 \sqrt{(C_0^2 C_4 - C_2^2 C_0)}} \rightarrow$$

$$\rightarrow D_2(z, k) = W_2(k)(z^2 - \omega_1^2(k)) \quad (5.14)$$

donde

$$W_2(k) = \frac{C_0(k)}{\sqrt{(C_0^2(k) C_4(k) - C_2^2(k) C_0(k))}} \quad (5.20)$$

$$D_3(z, k) = \frac{z^3(C_0 C_2 C_4 - C_2^3) + z(C_2^2 C_4 - C_0 C_4^2)}{\sqrt{2C_0 C_2^3 C_4^3 - 2C_0 C_2^4 C_4 C_6 + C_0^2 C_2^2 C_4^2 C_6 - C_0^2 C_2 C_4^4 + C_2^6 C_6 - C_2^5 C_4^2}} =$$

$$= \frac{z^3(C_0 C_4 - C_2^2) C_2 - z(C_0 C_4 - C_2^2) C_4}{\sqrt{2C_0 C_2^3 C_4^3 - 2C_0 C_2^4 C_4 C_6 + C_0^2 C_2^2 C_4^2 C_6 - C_0^2 C_2 C_4^4 + C_2^6 C_6 - C_2^5 C_4^2}} =$$

$$= \frac{(C_0 C_4 - C_2^2)(C_2 z^3 - C_4 z)}{\sqrt{2C_0 C_2^3 C_4^3 - 2C_0 C_2^4 C_4 C_6 + C_0^2 C_2^2 C_4^2 C_6 - C_0^2 C_2 C_4^4 + C_2^6 C_6 - C_2^5 C_4^2}} =$$

$$= \frac{C_2(C_0 C_4 - C_2^2) \left( z^2 - \frac{C_4}{C_2} \right) z}{\sqrt{2C_0 C_2^3 C_4^3 - 2C_0 C_2^4 C_4 C_6 + C_0^2 C_2^2 C_4^2 C_6 - C_0^2 C_2 C_4^4 + C_2^6 C_6 - C_2^5 C_4^2}} =$$

$$= \frac{C_2(C_0 C_4 - C_2^2)(z^2 - \omega_2^2)z}{\sqrt{2C_0 C_2^3 C_4^3 - 2C_0 C_2^4 C_4 C_6 + C_0^2 C_2^2 C_4^2 C_6 - C_0^2 C_2 C_4^4 + C_2^6 C_6 - C_2^5 C_4^2}} \rightarrow$$

$$\rightarrow D_3(z, k) = W_3(k)(z^2 - \omega_2^2(k))z \quad (5.15)$$

donde

$$W_3(k) = \frac{C_2(C_0 C_4 - C_2^2)}{\sqrt{2C_0 C_2^3 C_4^3 - 2C_0 C_2^4 C_4 C_6 + C_0^2 C_2^2 C_4^2 C_6 - C_0^2 C_2 C_4^4 + C_2^6 C_6 - C_2^5 C_4^2}} \quad (5.21)$$

$$E_0(z, k) = 0 \quad (5.16)$$

$$E_1(z, k) = \frac{C_0(k)}{\sqrt{C_2}} \quad (5.17)$$

$$E_2(z, k) = \frac{z(C_0 C_2) C_0}{C_2 \sqrt{(C_0^2 C_4 - C_2^2 C_0)}} = \frac{z C_0^2}{\sqrt{(C_0^2 C_4 - C_2^2 C_0)}} \rightarrow$$

$$\rightarrow E_2(z, k) = z C_0(k) W_2(k) \quad (5.18)$$

$$\begin{aligned} E_3(z, k) &= \frac{(C_0 C_2 C_4 - C_2^3)(z^2 C_0 + C_2) + (C_2^2 C_4 - C_0 C_4^2) C_0}{\sqrt{(-C_6 C_2^3 + C_2^2 C_4^2 + C_0 C_6 C_2 C_4 - C_0 C_4^3)(C_0 C_2 C_4 - C_2^3)}} = \\ &= \frac{(C_0 C_4 - C_2^2)(z^2 C_0 C_2 + C_2^2) - (C_0 C_4 - C_2^2) C_0 C_4}{\sqrt{2 C_0 C_2^3 C_4^3 - 2 C_0 C_2^4 C_4 C_6 + C_0^2 C_2^2 C_4^2 C_6 - C_0^2 C_2 C_4^4 + C_2^6 C_6 - C_2^5 C_4^2}} = \\ &= \frac{(C_0 C_4 - C_2^2)(z^2 C_0 C_2 + C_2^2 - C_0 C_4)}{\sqrt{2 C_0 C_2^3 C_4^3 - 2 C_0 C_2^4 C_4 C_6 + C_0^2 C_2^2 C_4^2 C_6 - C_0^2 C_2 C_4^4 + C_2^6 C_6 - C_2^5 C_4^2}} = \\ &= \frac{C_2 (C_0 C_4 - C_2^2) \left( z^2 + \frac{C_2}{C_0} - \frac{C_4}{C_2} \right) C_0}{\sqrt{2 C_0 C_2^3 C_4^3 - 2 C_0 C_2^4 C_4 C_6 + C_0^2 C_2^2 C_4^2 C_6 - C_0^2 C_2 C_4^4 + C_2^6 C_6 - C_2^5 C_4^2}} = \end{aligned}$$

$$\rightarrow E_3(z, k) = C_0(k) (z^2 + \omega_1^2(k) - \omega_2^2(k)) W_3(k) \quad (5.19)$$

**Anexo II: Código empleado en *Mathematica* para las representaciones del *Stopping Power* de OCP y TCP**

A continuación se presenta el documento *Mathematica* que se emplea para llevar a cabo los cálculos. Se tomará como ejemplo para las gráficas un caso TCP con  $\Gamma = 1.1$  y  $r_S = 2.5256$ .

**Parámetro de degeneración del plasma;**

$$\Gamma = 1.1;$$

**Parámetro de Bruenecker;**

$$r_S = 2.5256;$$

**Número atómico;**

$$Z = 1;$$

*Captura de pantalla 1. Datos de entrada.*

**Carga del electrón ( $\text{erg}^{1/2} * \text{cm}^{1/2}$ );**

$$e = 4.803204 * 10^{-10};$$

**Masa del electrón (g);**

$$m_e = 9.1093829 * 10^{-28};$$

**Masa del protón (g);**

$$m_i = 1.672621 * 10^{-24};$$

**Radio de Bohr (cm);**

$$a_B = 5.291772 * 10^{-9};$$

**Constante de Planck reducida ( $\text{erg} * \text{s}$ );**

$$h_{red} = 6.62606896 * 10^{-27} / (2 * \pi);$$

**Constante de Boltzmann ( $\text{erg} / \text{k}$ );**

$$k_B = 1.38065 * 10^{-16};$$

*Captura de pantalla 2. Constantes físicas.*



**Radio de Wigner – Seitz (cm);**

$$a = r_s * a_B$$

$$1.33649 \times 10^{-8}$$

**Densidad numérica electrónica (cm<sup>-3</sup>);**

$$n = \frac{3}{4 * \pi * a^3}$$

$$1.00003 \times 10^{23}$$

**Factor  $\beta$  (erg<sup>-1</sup>);**

$$\beta = \Gamma * \frac{a}{Z^2 * e^2}$$

$$6.3723 \times 10^{10}$$

**Temperatura (Kelvin);**

$$T = \frac{1}{\beta * k_B}$$

$$113663.$$

**Velocidad de Fermi (cm/s);**

$$v_{th} = \sqrt{(k_B * T / m_e)}$$

$$1.31252 \times 10^8$$

Captura de pantalla 3. Datos dependientes de la entrada I.

**Número de ondas de Fermi (cm<sup>-1</sup>);**

$$k_f = (3 * \pi^2 * n)^{1/3}$$

$$1.43597 \times 10^8$$

**Energía de Fermi (erg \* cm);**

$$E_f = \frac{\hbar c k_f^2 * m_e}{2 * m_e}$$

$$8.76553 \times 10^{-20}$$

**Parámetro de degeneración del plasma;**

$$\theta = \frac{r_s}{\Gamma * 1.84159}$$

$$1.24675$$

**Inversa del parámetro de degeneración del plasma;**

$$d = \theta^{-1}$$

$$0.802086$$

**Frecuencia del plasma (s<sup>-1</sup>);**

$$\omega_p = \sqrt{\left( \frac{4 * \pi * n * e^2}{m_e} \right)}$$

$$1.78402 \times 10^{15}$$

Captura de pantalla 4. Datos dependientes de la entrada II.

**Definición de w1;**

$$\omega_1[q] = \sqrt{\left(1 + \frac{q^2}{3\Gamma} + \frac{q^4}{12rs}\right)};$$

Captura de pantalla 5. Definición de  $\omega_1(q)$  para OCP.

**Definición de kq;**

$$kq = \left(16 * \pi * \frac{e^2}{hred^2} * (n * me + Z * n * mi)\right)^{1/4}$$

**Definición de w1;**

$$\omega_1[q] = \sqrt{\left(1 + \frac{q^2}{3\Gamma(1+Z)} + \frac{q^4}{a^4 kq^4}\right)};$$

Captura de pantalla 6. Definición de  $k_q$  y  $\omega_1(q)$  para TCP.

**Condición inicial para v12;**

$$\text{Condicional} = \frac{2}{3} * d^{2/3}$$

0.575514

**Inclusión de la integral de Fermi para v12;**

$$\text{F12}[\eta_0] := \text{Integrate}\left[\frac{x^{1/2}}{\text{Exp}[x - \eta_0] + 1}, \{x, 0, \infty\}\right];$$

**Obtención de  $\eta$  de forma numérica gracias a la condición inicial;**

$$\eta = \text{Re}[\eta_1 / . \text{FindRoot}[\text{F12}[\eta_1] = \text{Condicional}, \{\eta_1, 1\}]]$$

-0.20416

**Integral de Fermi para v32;**

$$\text{F32} = \text{Re}\left[\text{NIntegrate}\left[\frac{x^{3/2}}{\text{Exp}[x - \eta] + 1}, \{x, 0, \infty\}\right]\right]$$

0.961198

Captura de pantalla 7. Cálculo del factor  $\eta$  y resolución de  $F_{3/2}(\eta)$  para  $\omega_2(q)$ .

**Coefficientes de ajuste;**

$$A1 = -0.9052$$

$$A2 = 0.6322$$

$$-0.9052$$

$$0.6322$$

$$A3 = \frac{-\sqrt{3}}{2} - \frac{A1}{\sqrt{A2}}$$

$$0.272433$$

**Parámetro de ajuste vint (cm/s);**

$$vint = \left( \frac{-4}{15} * \frac{\Gamma^{3/2}}{\beta * m_e} * \left( \frac{A1}{\sqrt{(A2 + \Gamma)}} + \frac{A3}{1 + \Gamma} \right) \right)^{1/2}$$

$$5.43839 \times 10^7$$

Captura de pantalla 8. Definición de los valores de  $v_{int}^2$  para  $\omega_2(q)$ .

**Definición de  $\omega_2$ ;**

$$\omega_2[q] = \sqrt{\left( \left( 1 + \frac{F32 * q^2}{\Gamma * d^{3/2}} + \frac{q^4}{12 * rs} - \frac{q^2 * vint^2}{3 * \Gamma * vth^2} \right) \right)}$$

Captura de pantalla 9. Definición de  $\omega_2(q)$  para OCP.

**Función H;**

$$H = \frac{Z * 4 * rs * \sqrt{\Gamma}}{3 * \sqrt{(3 * Z * \Gamma^2 + 4 * rs + 4 * \Gamma * \sqrt{(3 * (1 + Z) * rs)})}}$$

$$0.635767$$

**Definición de  $\omega_2$ ;**

$$\omega_2[q] = \sqrt{\left( \left( 1 + \frac{F32 * q^2}{\Gamma * d^{3/2}} + \frac{q^4}{12 * rs} - \frac{q^2 * vint^2}{3 * \Gamma * vth^2} + H \right) \right)}$$

Captura de pantalla 10. Definición del factor H y de  $\omega_2(q)$ .

**Parámetro  $h_0$ ;**

$$h_0[q] = \frac{\omega_2[q]^2}{\omega_1[q] * \sqrt{2}};$$

**Obtención de la loss function;**

$$L[q, \omega] = \frac{h_0[q] * (\omega_2[q]^2 - \omega_1[q]^2)}{(\omega * (\omega^2 - \omega_2[q]^2))^2 + h_0[q]^2 * (\omega^2 - \omega_1[q]^2)^2};$$

Captura de pantalla 11. Definición del parámetro  $h_0(q)$  y de la loss function.

**Ecuación del poder de frenado;**

$$dE_{pol}[v] := \frac{w p^2 * 2 * e^2 * \beta * a}{\pi * (v * v_{th})^2} * \text{Re} \left[ \int_{\omega} \frac{1}{q} * \omega^2 * L[q, \omega], \{q, 0, 5000000 * k f\}, \left\{ \omega, 0.00001, q * \frac{v}{\sqrt{(3 * \Gamma)}} \right\} \right]$$

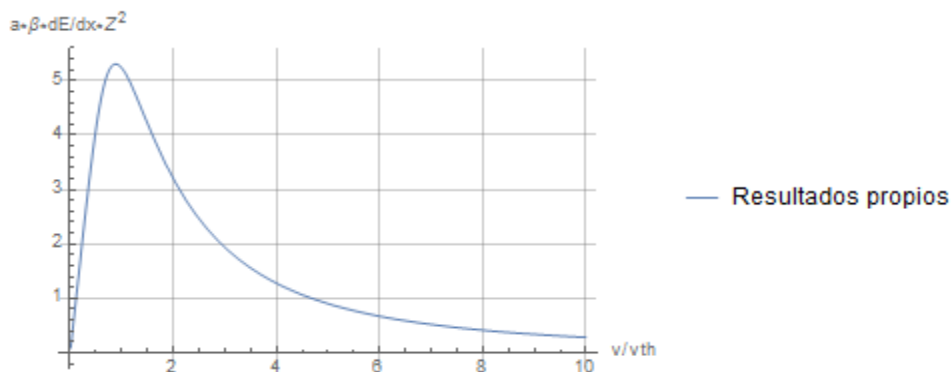
[integra numéricamente]      [parte real]

Se elige un número muy grande pero no infinito para el límite de la integral respecto a  $q$  con el fin de evitar errores de cálculo. Por el mismo motivo se elige un número muy pequeño pero distinto de cero para evitar errores en la integral respecto  $\omega$ . Por otro lado la función **Re** indica que se tomen solamente las soluciones reales de la integral.

**Representación de  $I$  poder de frenado adimensional;**

```
Grafstopping = Plot[dEpol[v], {v, 0.01, 10}, PlotStyle -> Point,
  GridLines -> Automatic, AxesLabel -> {"v/vth", "a+β*dE/dx*Z²"},
  PlotLegends -> {"Resultados propios"}]
```

[representación gráfica]      [estilo de repr...]      [punto]  
[parilla de lín...]      [automático]      [etiqueta de ejes]  
[leyendas de representación]



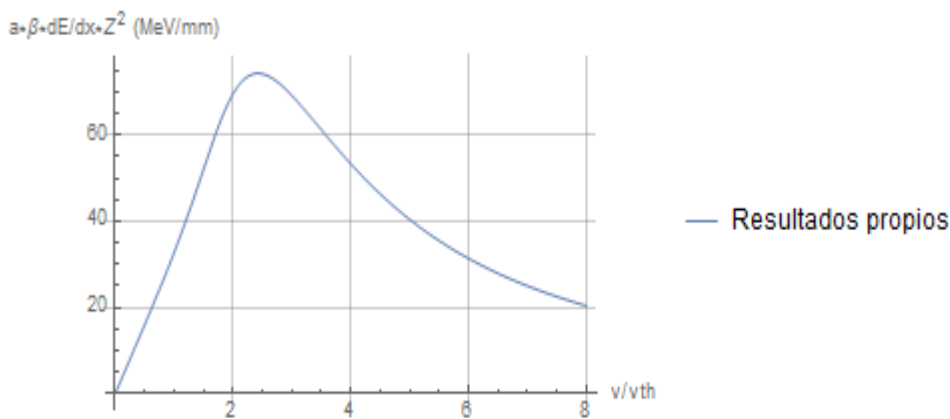
Captura de pantalla 12. Código para la representación del Stopping Power adimensional. Resultado en la gráfica para el caso TCP.

**Ecuación del poder de frenado;**

$$dE_{pol}[v_] := \frac{2 * e^2 * 62415.1}{\pi * (v * v_{th})^2 * Z^2} * \text{Re} \left[ \text{NIntegrate} \left[ \frac{1}{q} * \omega^2 * L[q, \omega], \{q, 0, 5000000 * kf\}, \left\{ \omega, 0.00001, q * \frac{v}{\sqrt{3 * r}} \right\} \right] \right]$$

**Representación de l poder de frenado e n MeV / mm;**

```
Grafstopping = Plot[dEpol[v], {v, 0.01, 8}, PlotStyle -> Point,
GridLines -> Automatic, AxesLabel -> {"v/vth", "a*beta*dE/dx*Z^2 (MeV/mm)"},
PlotLegends -> {"Resultados propios"}]
```



Captura de pantalla 13. Código para la representación del Stopping Power en (MeV/mm). Resultado en la gráfica para el caso OCP.

**Asíntota;**

$$\text{Asintota}[v\_]=\frac{\beta * a}{z^2} * \left(\frac{e * wp}{v * vth}\right)^2 * \text{Log}\left[\frac{2 * me * (v * vth)^2}{hred * wp * \sqrt{(1 + H)}}\right];$$

**Representación de la asíntota;**

```
Grafasintota = Plot[Asintota[v], {v, 4, 10},
  [representación gráfica
  AxesLabel -> {"v/vth", "a*β+dE/dx*Z²"}, GridLines -> Automatic,
  [etiqueta de ejes [parilla de lín... [automático
  PlotStyle -> Black, PlotRange -> All, AxesOrigin -> {0, 0},
  [estilo de repr... [negro [rango de repr... [todo [origen de ejes
  PlotLegends -> {"Asíntota"}];
  [leyendas de representación
```

Captura de pantalla 14. Código para la representación de la asíntota adimensional.

**Asíntota;**

$$\text{Asintota}[v\_]=\frac{62415.1}{z^2} * \left(\frac{e * wp}{v * vth}\right)^2 * \text{Log}\left[\frac{2 * me * (v * vth)^2}{hred * wp * \sqrt{(1 + H)}}\right];$$

**Representación de la asíntota;**

```
Grafasintota = Plot[Asintota[v], {v, 4, 8},
  [representación gráfica
  AxesLabel -> {"v/vth", "a*β+dE/dx*Z² (MeV/mm)"}, GridLines -> Automatic,
  [etiqueta de ejes [parilla de lín... [automático
  PlotStyle -> Black, PlotRange -> All, AxesOrigin -> {0, 0},
  [estilo de repr... [negro [rango de repr... [todo [origen de ejes
  PlotLegends -> {"Asíntota"}];
  [leyendas de representación
```

Captura de pantalla 15. Código para la representación de la asíntota en (MeV/mm).

**Cargado de datos de otros modelos;**

```

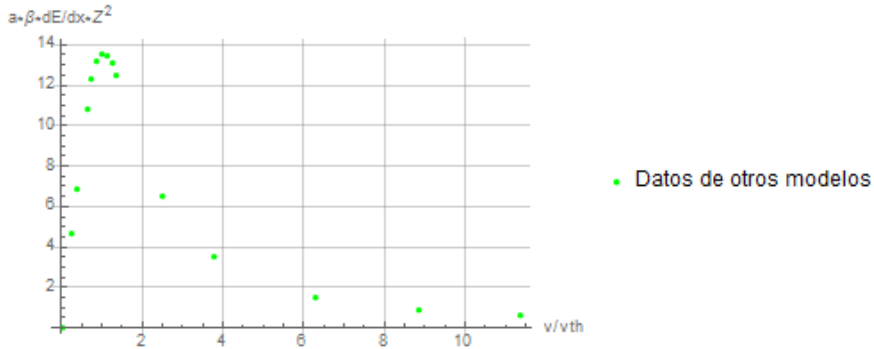
Import["C:\\Users\\LLUIS COLOMA\\Desktop\\Gamma=1.1   rs=2.5256.txt", "Table"];
[importa

Data = {{0.00174441`, 0.0313946`}, {0.241926`, 4.66139`}, {0.383209`, 6.87574`},
{0.62339`, 10.8515`}, {0.736417`, 12.3361`}, {0.849443`, 13.2168`},
{1.00485`, 13.5691`}, {1.14614`, 13.4936`}, {1.24504`, 13.1413`},
{1.34393`, 12.4871`}, {2.50246`, 6.52346`}, {3.78813`, 3.52906`},
{6.28884`, 1.49085`}, {8.84607`, 0.861775`}, {11.3892`, 0.584982`}};

Modelo2 = ListPlot[{Data}, PlotStyle -> Green, PlotStyle -> {PointSize[0.01]},
[representación de lista [estilo de repr... [verde [estilo de repr... [tamaño de punto

GridLines -> Automatic, AxesLabel -> {"v/vth", "a+β*dE/dx*Z²"},
[psrilla de lí... [automático [etiqueta de ejes

PlotLegends -> {"Datos de otros modelos"}]
[leyendas de representación
    
```

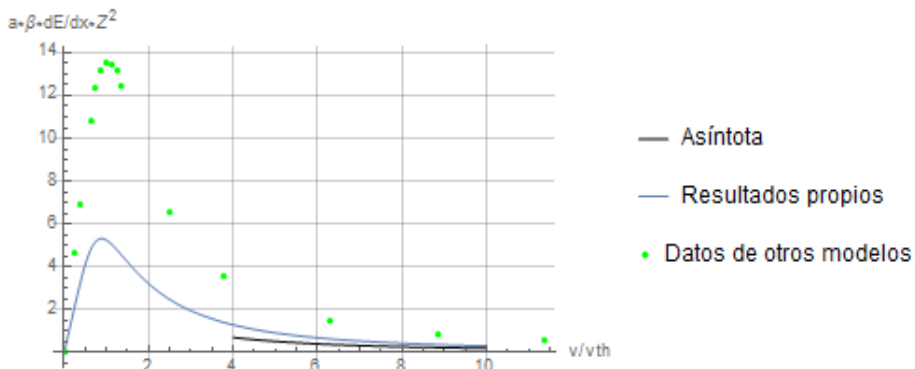


Captura de pantalla 16. Código para importar y representar los datos de otros modelos.

**Comparación final de todos los resultados;**

```

Show[Modelo, Modelo2]
[muestra
    
```



Captura de pantalla 17. Código para comparar los resultados con otros modelos.







UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA  
SUPERIOR INGENIEROS  
INDUSTRIALES VALENCIA

**TRABAJO DE FINAL DE GRADO DE INGENIERÍA QUÍMICA**

COLOMA DE LA FUENTE, LLUÍS

EVALUACIÓN DE LOS RESULTADOS DE DIAGNÓSTICO DE  
PLASMAS DENSOS BASADA EN EL MÉTODO DE MOMENTOS  
CLÁSICO

# **PRESUPUESTO**

**Curso académico: 2017-18**

## Índice del presupuesto:

1. Aclaraciones.....	1
2. Cálculo del precio de la mano de obra.....	1
3. Unidades de obra.....	3
3.1. F1- Publicaciones especializadas. ....	3
3.2. F2- Libros especializados. ....	4
3.3. F3- Búsqueda y asimilación de información y planteamiento del problema.....	4
3.4. F4-Compra de licencias de programas. ....	5
3.5. F5- Programación del código en <i>Mathematica</i> . ....	5
3.6. F6-Redacción del proyecto. ....	5
4. Presupuesto de ejecución material y presupuesto base de licitación.....	6



## 1. Aclaraciones

---

Se plantean los costes del proyecto como si no se hubiera realizado bajo el amparo de la Universitat Politècnica de València, es decir, prescindiendo de todo tipo de licencias de programas informáticos y de cobertura para la búsqueda de publicaciones y libros especializados.

Así mismo, numerosas publicaciones que se han empleado como fuente de información se encuentran disponibles de manera gratuita, por lo que se incluirán únicamente aquellas que no se encuentran en esta situación.

## 2. Cálculo del precio de la mano de obra

---

Para determinar el coste anual de la mano de obra de un Ingeniero Químico se debe tener en cuenta que:

- El sueldo bruto que percibirá el ingeniero será de 3,200.00 €/mes.
- Se trabaja para una empresa de la que recibe 12 mensualidades al año.
- Base mínima de cotización 1,199.10 €/mes.
- Base máxima de cotización 3,751.20 €/mes.
- Se posee un contrato indefinido.
- En el año 2018 hay 251 días laborales.
- La cotización por contingencias para la empresa se establecerá respecto a la base máxima según impone el Ministerio de Empleo y Seguridad Social:

Comunes (%)	23.60
Desempleo (%)	5.50
Formación profesional (%)	0.60
FOGASA (%)	0.20

*Tabla 1. Cotización por contingencias para la empresa.*

A partir de los datos de la *Tabla 1* se puede calcular el coste para la empresa de la mano de obra del ingeniero como se muestra a continuación

<b>Concepto</b>	<b>Unidad</b>	<b>Medición</b>
Sueldo bruto anual	€/año	38,400.00
Contingencias comunes	€/año	9,062.40
Desempleo	€/año	2,112.00
Formación profesional	€/año	230.40
FOGASA	€/año	76.80
<b>Coste bruto anual</b>	<b>€/año</b>	<b>49,881.60</b>

*Tabla 2.* Coste de la mano de obra.

- En el año 2018 hay 251 días laborables.
- La jornada laboral es de 8 horas.

Finalmente, el precio hora para la empresa de un ingeniero en estas condiciones es

<b>Concepto</b>	<b>Unidad</b>	<b>Medición</b>
Coste anual	€/año	49,881.60
Horas	Horas/año	2,008
<b>Precio de la mano de obra</b>	<b>€/hora</b>	<b>24.84</b>

*Tabla 3.* Precio de la mano de obra.

### 3. Unidades de obra

#### 3.1. F1- Publicaciones especializadas

<b>F1- Publicaciones especializadas</b>					
<b>Código</b>	<b>Unidad</b>	<b>Descripción</b>	<b>Cantidad</b>	<b>Precio (€)</b>	<b>Importe (€)</b>
Pu01	ud.	Phys. Rev. Lett. 66, 612	1	19.14	19.14
Pu02	ud.	Phys. Rev. Lett 101, 075002 (2008)	1	19.14	19.14
Pu03	ud.	Phys. Rev. B 82, 625 (1951)	1	19.14	19.14
Pu04	ud.	Phys. Rev. B 85, 338 (1952)	1	19.14	19.14
Pu05	ud.	Phys. Rev. B 92, 609 (1953)	1	19.14	19.14
Pu06	ud.	PHYSICAL REVIEW E 90, 053102 (2014)	1	19.14	19.14
Pu07	ud.	Phys. Rev. E 58, 4941 (1998)	1	19.14	19.14
Pu08	ud.	Laser and Particle Beams (2009), 27, 399-413	1	27.00	27.00
<b>TOTAL</b>					<b>160.98 €</b>

## 3.2. F2- Libros especializados

<b>F2- Libros especializados</b>					
<b>Código</b>	<b>Unidad</b>	<b>Descripción</b>	<b>Cantidad</b>	<b>Precio (€)</b>	<b>Importe (€)</b>
Lib01	ud.	Curso de física de Landau, Vol. 8: Electrodinámica de los medios continuos.	1	57.56	57.56
Lib02	ud.	Many –Particle Physics	1	168.47	168.47
Lib03	ud.	The Method of Moments and its Applications in Plasma Physics	1	56.66	56.66
Lib04	ud.	Statistical Plasma Physics vol. II: Condensed Plasmas	1	30.97	30.97
Lib05	ud.	Curso de física de Landau, Vol. 5: Física estadística.	1	44.02	44.02
Lib06	ud.	Plasma Physics for controlled nuclear fusion	1	106.44	106.44
<b>TOTAL</b>					<b>464.12 €</b>

## 3.3. F3- Búsqueda y asimilación de información y planteamiento del problema

<b>F3- Búsqueda y asimilación de información y planteamiento del problema</b>					
<b>Código</b>	<b>Unidad</b>	<b>Descripción</b>	<b>Cantidad</b>	<b>Precio (€)</b>	<b>Importe (€)</b>
MO01	h	Ingeniero realizando trabajo de análisis o estudio	225	24.84	5,589.00
AM01	h	Amortización de uso de ordenador portátil	225	0.3	67.50
GE01	h	Gastos de internet y electricidad	225	0.15	33.75
GE02	ud.	Gastos en papel y material de oficina	4	0.50	2.00
<b>TOTAL</b>					<b>5,692.25 €</b>

**3.4. F4- Compra de licencias de programas**

<b>F4-Compra de licencias de programas</b>					
<b>Código</b>	<b>Unidad</b>	<b>Descripción</b>	<b>Cantidad</b>	<b>Precio (€)</b>	<b>Importe (€)</b>
LP01	ud.	Licencia de <i>Mathematica</i>	1	145.00	145.00
LP02	ud.	Licencia de <i>Microsoft Office</i>	1	65.99	65.99
<b>TOTAL</b>					<b>210.99 €</b>

**3.5. F5- Programación del código en *Mathematica***

<b>F5- Programación del código en <i>Mathematica</i></b>					
<b>Código</b>	<b>Unidad</b>	<b>Descripción</b>	<b>Cantidad</b>	<b>Precio (€)</b>	<b>Importe (€)</b>
MO01	h	Ingeniero realizando trabajo de análisis o estudio	20	24.84	496.80
AM01	h	Amortización de uso de ordenador portátil	20	0.3	6.00
GE01	h	Gastos de internet y electricidad	20	0.15	3.00
<b>TOTAL</b>					<b>505.80 €</b>

**3.6. F6- Redacción del proyecto**

<b>F6-Redacción del proyecto</b>					
<b>Código</b>	<b>Unidad</b>	<b>Descripción</b>	<b>Cantidad</b>	<b>Precio (€)</b>	<b>Importe (€)</b>
MO01	h	Ingeniero realizando trabajo de análisis o estudio	55	24.84	1,366.20
AM01	h	Amortización de uso de ordenador portátil	55	0.3	16.50
GE01	h	Gastos de internet y electricidad	55	0.15	8.25
<b>TOTAL</b>					<b>1,390.95 €</b>



## 4. Presupuesto de ejecución material y presupuesto base de licitación

Se suponen gastos generales del 10% en concepto de gastos de envío para las publicaciones y los libros. Así mismo, para el resto de fases se suponen gastos generales para considerar posibles imprevistos como la rotura del ordenador portátil. Como beneficio industrial se considera un 4%.

CONCEPTO	COSTE (€)
F1 -Publicaciones especializadas	160.98
F2 -Libros especializados	464.12
F3 -Búsqueda y asimilación de información y planteamiento del problema	5,692.25
F4 -Compra de licencias de programas	210.99
F5 -Programación del código en <i>Mathematica</i>	505.80
F6 -Redacción del proyecto	1,390.95
<b>PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN MATERIAL (F1 Y F2)</b>	<b>625.10</b>
<b>PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN MATERIAL (F3, F4, F5 Y F6)</b>	<b>7,799.99</b>
<b>PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN MATERIAL (TOTAL)</b>	<b>8,425.09</b>
<b>GASTOS GENERALES (F1 Y F2)</b>	62.51
<b>GASTOS GENERALES (F3, F4, F5 Y F6)</b>	780.00
<b>BENEFICIO INDUSTRIAL (F1 Y F2)</b>	25.00
<b>BENEFICIO INDUSTRIAL (F3, F4, F5 Y F6)</b>	312.00
<b>PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN POR CONTRATA (F1 Y F2)</b>	712.61
<b>PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN POR CONTRATA (F3, F4, F5 Y F6)</b>	8,891.99
<b>I.V.A. para libros y publicaciones (10%)</b>	71.26
<b>I.V.A. (21%)</b>	1,867.32
<b>PRESUPUESTO BASE DE LICITACIÓN</b>	<b>11,543.18</b>

Asciende por tanto el presupuesto del proyecto a la cantidad de:

**ONCE MIL QUINIENTOS CUARENTA Y TRES EUROS CON DIECIOCHO CÉNTIMOS.**

