

评论《关于慢反质子在 LiF 中电子停止的异常》，arXiv:2501.14381

G. Schiwietz

*Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie GmbH,
Albert-Einstein-Str. 15, 12489, Berlin, Germany*

P.L. Grande

*Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul,
Av. Bento Gonçalves, Porto Alegre, 9500, Brazil*

(10Dated: 2025 年 4 月)

摘要

本工作详细讨论了 Phys.Rev.Lett.134 [1] 的内容，在下文中将其简称为 PRL134。在本评论中，我们重新审视并详述了反粒子在物质中的能量损失的绝热电离模型 (AIM)，特别是参考了 Ref.[2–4] 中建立的理论基础。AIM 框架在描述作者在 Ref.[1] 中考虑的低速区域内的电离动力学方面起到了核心作用。计算得到的 $\bar{p}$ 在 LiF 晶体中的能量损失的 AIM 结果与实验数据及其他不同模型进行了比较，表明 PRL134 的结果存在严重问题。

除了这项特定的比较理论研究之外，我们还批判性地审查了参考文献 [1] 中提出的若干声明和假设。其中某些主张似乎与已建立的理论原则不一致，或者没有充分的数据和论据来证明其合理性。因此，我们认为有必要进一步澄清，在某些情况下，则需要更严格的论证来支持这些观点。

绝热电离模型应用于固体中的 pLiF

以下，我们讨论了在晶体内部存在额外粒子（例如质子或反质子）的情况下 LiF 的局部绝热能隙。这些结果与未受扰动固体中已知的电子密度状态有所不同，因为额外的带电粒子破坏了晶格对称性并引入了电子性质的局部准原子特性。从这个绝热图景出发，我们介绍了 $\bar{p}$ 速度在 LiF 中的简单影响，并讨论了不同的理论能量损失结果与在 CERN[5] 测量的实验数据 $\bar{p}$ 的比较。

李氟中的绝热能隙

图 1 显示了来自不同模型的不同物理情况下固态 LiF 的电子激发阈值。虚线绿色线条显示未受扰动的 LiF 带隙。它们是从多配置自洽场解 (MCSCF, 长虚线 [3]) 获得的，该解假设非常精确，并且还从时间依赖密度泛函方法的线性响应版本 (TDDF, 短虚线 [6]) 获得。最近实验确定的带隙范围从 $E_{gap}=13.0$ 到 13.6 eV [7]。然而，该图的主要观点是讨论如果将一个单电荷重粒子以绝热方式置于距离邻近的 F^- 离子为 R 处的离子晶体中会发生什么。靠近 F^- 的占据 2p 轨道决定了激发间隙，并且对质子（红线和符号）或反质子（蓝线和符号）造成的这种扰动最为敏感。尽管在技术上非常不同，这两种理论给出了相似的结果。

在文献中，人们对于 LiF 中质子的能量损失行为达成了一致。根据 PRL134 [1]，这似乎不适用于 LiF 中的 $\bar{p}$ 。因此，从此以后，我们只关注反质子的结果。从图 1 可以看出，在有反质子存在的情况下，LiF 的电子激发阈值显著降低。 $\bar{p}$ 和 F^- 离子之间的距离越小，最低激发能量就越低。如 SCF 计算 [3] 所示，这主要与部分占据的 F-2p 轨道的能量正向移动（一种提升）有关。这种能量位移最早由费米和泰勒为绝缘体所预测 [2]。这种原子氢的位移后来在先进的准分子轨道处理中得到了确认，并且也计算了其他偶极碰撞系统，如 $\bar{p}+H_2$ 和 $\bar{p}+He$ [4, 8]。

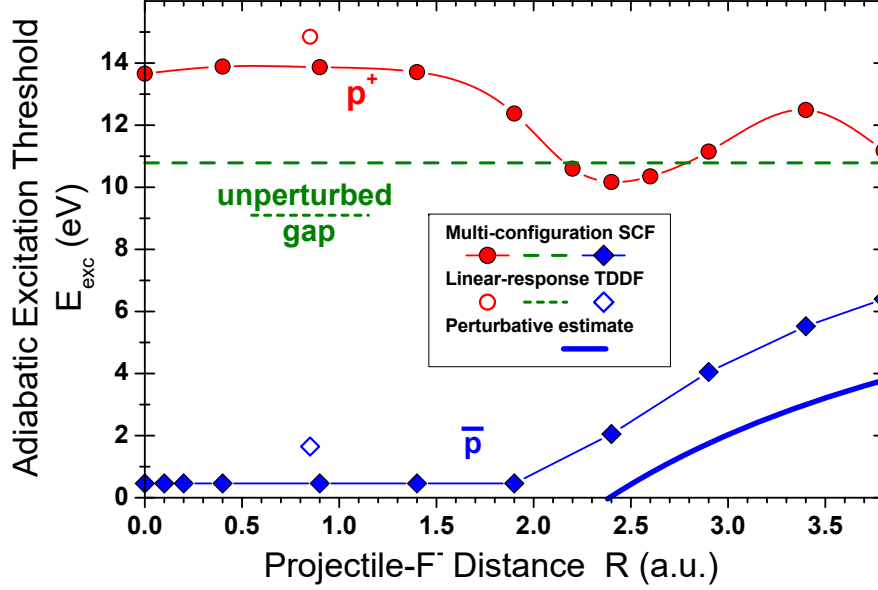


图 1. 静态激发能隙值与点电荷 q (带有 $q = +e, 0$, or $-e$) 和 LiF 晶体中的一个 F^- 离子之间的距离的关系 (见正文)

图 1 中的实蓝曲线代表了一个由反质子引起的 (偶极) 能量位移的近似一级解。忽略反质子附近电子密度的极化和爆涨, 并考虑到无限体材料中的连续能量对局部扰动不敏感, 我们简单地考虑了最上层 $F^-(2p)$ 轨道的对角相互作用矩阵元, 使用

$$E_{exc}(eV) = E_{gap} - \langle 2p | 1/(\vec{R} - \vec{r}) | 2p \rangle \approx E_{gap} - 1/(R^2 + r_{mean}^2)^{0.5}, \quad (1)$$

与 $r_{mean} = 1/\langle 2p | 1/r | 2p \rangle = 0.808 a.u.$, 后者从原子 F^- 的自洽哈特里-福克-斯莱特解中获得。除了大约 25% 的距离偏移外, 该曲线与图中的先进 MCSCF 结果以及反质子接近原子 F^- 时的准分子轨道结果相当吻合, 后者使用 U.Wille 提供的代码 [8] 计算。因此, 在大距离处, $\bar{p}$ 和束缚电子之间的排斥相互作用导致坐标空间极化 (所谓的 Barkas 效应), 但在较小的距离下, 束缚电子的能量也可以显著提升。这种能量提升似乎主要由反质子附近的电势降低所主导。考虑 MCSCF 基组和簇尺寸效应 [3], 这些结果与激发能隙趋于消失导致在距离 $R < 2 a.u.$ 处单个电子电离一致。这是对费米和泰勒估计的直接确认。

碰撞展宽和反质子能量损失

图 2 展示了最近接办法距离 (或相应的撞击参数) 下的 MCSCF 结果 [3] 以及对速度为 0.15、0.5 和 1 个原子单位的射弹的碰撞展宽估计。这种展宽关系将有限的相互作用时间 τ (使用玻尔的处方 [4] 来定义特征相互作用长度) 与电子能量分布 Γ 联系起来。 $\Gamma/2$ 与蓝色激发曲线相交表明, 平均非绝热能量波动等于绝热阈值, 并且在相应的临界撞击参数 b_c 以下发生显著的非弹性能量损失。这种阶跃函数假设使 LiF 中的能量损失截面估计变得简单。具体的能量损失是通过一个简化后的积分导出的, 该积分可以近似为 [4]

$$S_e^{\bar{p}}(v) = \pi P_{cont} \Delta E_{trans} b_c^2. \quad (2)$$

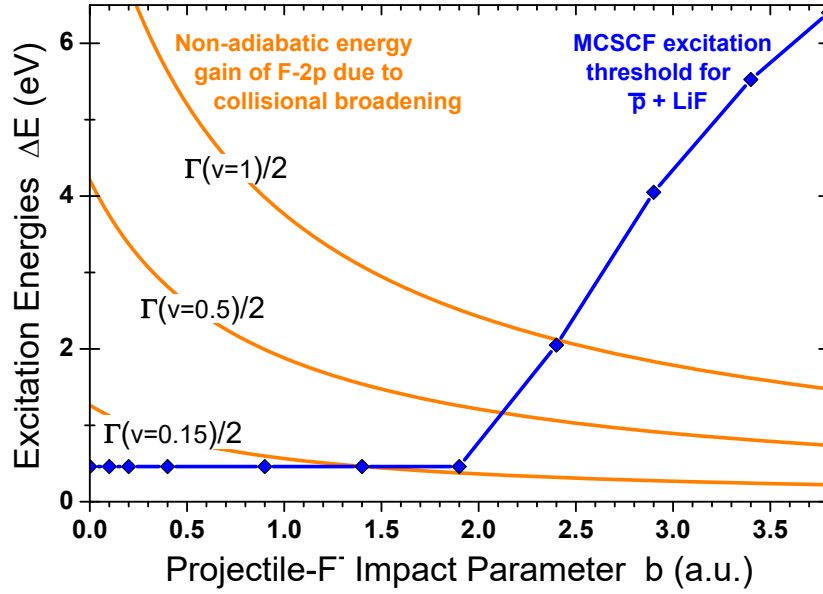


图 2. 提取固定反质子速度下电子激发的冲击参数阈值方案 b_{cv}

这定义了绝热电离模型 (AIM)。[4] 对于 LiF 中的 $\bar{p}$ ，我们将能量转移 ΔE_{trans} 设为实验的（未扰动的）能隙加上 1 eV 作为离子化电子的平均多余能量 ($\Delta E_{trans} = 14.5 \text{ eV}$)。进一步，从计算出的态密度 [9, 10] 估算得出，在阈值以上最低连续能量下的平均电离抑制因子为 $P_{cont} \approx 58\%$ 。强调指出，在几十年对低射线速度（低于 1 个原子单位）下离子-原子碰撞中的准分子激发、电离和能量损失过程的深入研究中，碰撞展宽的概念已成功应用 [11]。

请注意，用于碰撞加宽的阶跃函数可能被基于虚拟量子 Weizsäcker-Williams 方法生成激发频率谱及与能量增益相关的激发概率的更高级处理所取代 [12]。另外，可以考虑过量动能 $\Gamma/2 - E_{exc}$ 的偏移参数依赖性（而不仅仅是平均值）来计算更为准确的 ΔE 以及 P_{cont} 值。对于这两种效应的另一种假设方法，可以使用时依扰动定态理论 [13]。

反质子在低速时的能量损失比较

图 3 在对数尺度上展示了低速下 LiF 中 $\bar{p}$ 的特定能量损失，低于停止功率的最大值。我们通过将 Møller 等人的实验数据 [5] 乘以因子 1.13 来调整 $\bar{p}$ ，使其与最近最精确的质子测量结果对齐（更多细节请参见 [14]）。这种可能的系统偏差已在他们最初的出版物中注意到，可能是由于 LiF 的观察到的晶粒结构，或者由于半覆盖目标箔片制备（一半是薄碳箔，另一半没有蒸发掉的 LiF 以进行同时参考测量）。[5] 此外，图表还包括以下介绍的四种不同的理论结果：

- CasP 停止功率结果 [15] 对于 $\bar{p}$ 显示为一条紫色曲线。这些计算是在单一卷积近似 (UCA) 模式下针对 LiF 化合物进行的，包括壳校正和 Barkas 二进制选项。在高速下下降到停止功率最大值以下时，这些计算应该非常可靠 [14]，因为它们包含了超出 1^{st} 阶微扰理论的一些重要附加项，即与粒子电荷 q^3 成比例的 Barkas 项以及一系列 q 的偶数幂，对应于 Bloch 或强势场 Born 理论。然而，在更低的速度下，微扰展开应该考

考虑 q 的更高奇数和偶数幂次，这限制了其有效范围，并解释了在大约 $v \approx 1 a.u.$ 下，CasP 结果与实验 $\bar{p}$ 数据的偏差。

- 实线蓝色曲线显示了所谓的实时时间依赖密度泛函理论 (rt-TDDFT) 的结果。[6] 这些非微扰计算使用了反质子轨迹在 $\langle 111 \rangle$ 方向上的加权碰撞参数平均值。与 $\langle 001 \rangle$ 情况以及不同聚类尺寸和碰撞参数步长的比较表明数值不确定性约为 5%。在这个不确定度范围内，结果完全符合实验数据，并且在高粒子速度下也与 CasP 结果相符。本文及其相应结果在以下内容中表示为 PRL128。
- 虚线橄榄色曲线展示了另一个 rt-TDDFT 解，即 PRL134 的结果 [1]，这是我们批评的重点。[14] 这些 PRL134 计算似乎沿不可公度晶体方向使用了一个单一轨迹。我们同意大量非通道化轨迹在某种程度上更接近实验情况，但除了其他问题之外，单一轨迹可能导致高达 100% 的误差，这是本文下一主要部分所展示的。PRL134 的作者声称他们的结果优于 PRL128 的结果（蓝色曲线），这显然与图 3 不一致并且从现有实验数据的偏差在低速时甚至达到 3 的数量级。
- 如图 3 中以实橙色曲线所示的 AIM 能量损失结果直接来自方程 2，临界影响参数是从图 2 中激发阈值与各种碰撞展宽曲线之间的交叉点导出的。与 CasP 的有效范围相反，绝热电离模型在低速度下应该是可靠的，在这种情况下，非绝热相互作用项非常小。在 0.5 个原子单位以下的速度，AIM 与现有的实验数据和 PRL128 计算结果相当吻合。

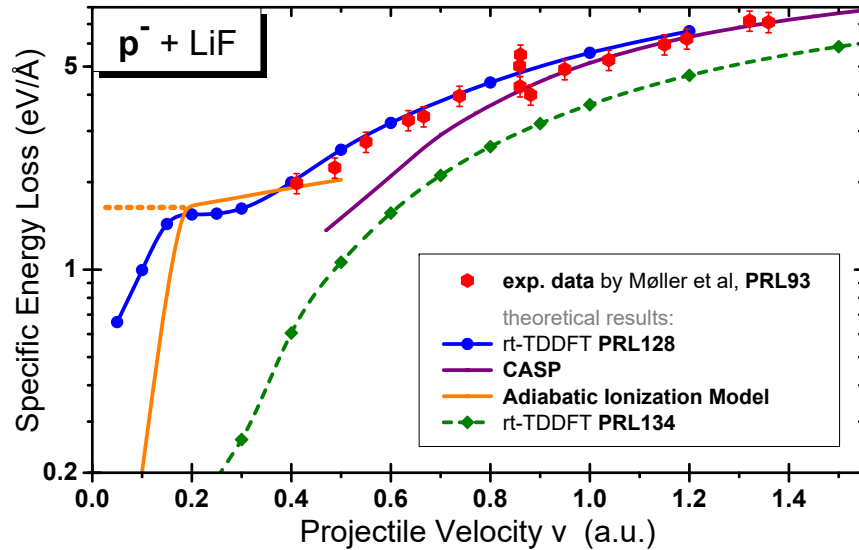


图 3. 锂氟停止功率与 $\bar{p}$ 速度。红色符号：修正后的 CERN 数据 [5]（见正文）。曲线：CASP 理论（紫色）[15]，两种 rt-TDDFT 代码的结果（蓝色和绿色）以及上述讨论的 AIM（橙色）。

由于 PRL134 中的矛盾陈述主要涉及 LiF 中 $\bar{p}$ 停止能力的低速行为，我们将仅限于讨论图 3 的这一部分内容。PRL128 的结果（蓝色曲线）在速度低于 $0.3 a.u.$ 时包含一个有趣的类似膝盖的结构。AIM 结果中也可见到类似的但稍微更尖锐的膝盖结构，并且这一点很容易理解。这个 AIM 膝盖直接与图 2 中的蓝色激发阈值曲线关于碰撞参数的依赖性相关。阈值曲线在 $b = 2 a.u.$ 以上部分的陡峭部分导致了图 2 中 $v = 0.2 a.u.$ 以上的 AIM 结果几乎平坦，并且该平台产生了图 3 中向低速方向的 AIM 急剧下降。

在一个更为高级的 AIM 解决方案中, 上述提到的 AIM 碰撞展宽的阶跃函数假设可以被一个平滑的概率分布所取代。在这种情况下, AIM 的结果预计会更接近于低速时蓝色 PRL128 曲线的拐点结构。另一个更加显著的结果是可能存在的恒定能量损失直到反质子捕获极限, 这由虚线橙色线表示。这条线基于图 2 中平台实际上与距离小于 $2 a.u.$ 时消失的能隙一致的假设, 相当于一个被占据的 F^-2p 轨道与 LiF 导带合并。因此, 这条虚线橙色线完全符合费米和泰勒 [2] 的预测, 并且与索雷德等人 [3] 假设的消失能隙一致。所有这些结果都与 PRL134[1] 中的结果和陈述不一致, 这一点可以从绿色虚线曲线与实验数据 (红色符号)、AIM 结果 (橙色曲线) 以及从 PRL128[6] 提取的蓝色 rt-TDDFT 曲线的巨大偏差中明显看出。对于 PRL134 与其他被广泛接受的文献和他们自己小组之外的定量结果不一致的原因将在下一节讨论。

PHYS.REV.LETT. 134 论文中额外的不确定性 [1]

在以下内容中, 我们强调了 PRL134 论文中似乎不正确或至少需要进一步澄清的特定陈述。

关于反质子在氟化锂晶体中的捕获和共振效应

- 论文中关于反质子捕获的陈述似乎毫无意义。 $\bar{p}$ 绕 F 核运动显然与 TDDFT 计算中使用的直线轨迹不符 [1, 6]。从实验角度来看, 这也是没有意义的, 因为被捕获的反质子很可能会逃过检测。正如 Fermi 和 Teller 所讨论的 [2] 对于 π^- , 捕获只有在总动能与未变形的能量间隙相当的情况下才有可能对应于 $v_{capture} \approx 0.03 a.u.$ 的 $\bar{p}$ 。因此, 如果这个捕获语句是选择仅远离 F^- 离子的轨迹的论据, 那么从所有角度来看这都是错误的。
- 所谓的 Horsfield 模型 (由方程 1 定义, 并作为拟合曲线显示在 PRL134 的图 3 中) 考虑了通道粒子与间隙中心附近的一个去定位状态的相互作用。据我们所知, 没有其他出版物报告或假设存在这种状态于原始 LiF 晶体结构中。价激子能量, 例如, 远高于间隙中心, 并且弗伦克尔型激子结构被固定在原来的 F^- 离子上。[16] 另一方面, 反质子经历单独和局部的能量损失, 在空间和时间上与其他相互作用位点和事件明显分离。特别是在小撞击参数和低速度的情况下, 一个 F^- 离子上的单个占据 $2p$ 轨道的电子激发可能会导致导带填充 (具有有限能量损失) 或该轨道在反质子离开期间退回到主机 F 核中的未受干扰的 $2p$ 状态。[3] 后者导致零能量损失, 因为没有先前相互作用事件的记忆, 进一步耦合甚至共振实际上是不可能的。因此, Horsfield 模型只能应用于超密集 $\bar{p}$ 脉冲包, 在这种情况下, $\bar{p}$ 包的空间结构与 LiF 晶格结构一致。然而, 这是一个非常不现实的情景。

完全不同的反对应用 Horsfield 模型的论点是其直接依赖于晶体中周期性原子结构的共振条件 (见 PRL134 的等式 1)。在 PRL128 论文 [6] 的补充在线材料中, 可以找到沿着 $\langle 111 \rangle$ 和 $\langle 001 \rangle$ 方向运动的 $\bar{p}$ 阻止功率的比较。这些结果显示没有强烈的依赖于运动的方向, 因此也没有依赖于周期性。此外, 我们的 AIM 结果并不依赖于任何特定方向, 但与低速下的测量反质子数据相当吻合。

- PRL134 的主要观点之一是对 TDDFT 时间积分沿高度对称轨迹 (平行于晶体方向) 使用的批评, 如在 PRL128 中所示的 [6]。给定大量局域化的间隙态密度和非常特定的电子传输特性, 在原则上可能存在不同类型的动态共振效应。然而, 正如上面讨论的那样, 这些状态在纯 LiF (无论有无 $\bar{p}$ 或 p) 中不起作用。例如, 反质子可以在大的撞击参数下激发价激子 [3] (或在小的撞击参数下使它们去占据), 但这些激子实际上是不动的 [16] 并且不能贡献于共振效应。在通道条件下的共振相干激发离子 [17] 已知会激发和/或电离束缚的射入粒子状态, 导致能量损失谱显著变化 [18]。但是, 排斥的 $\bar{p} - e^-$ 相互作用禁止了反质子上的束缚射入电子态。人们还可以推测长程库仑相互作用或集体效应可能会耦合相邻的离子 F^- 状态, 例如, 通

过反质子后面的尾流电位振荡。然而，在射入粒子速度低于材料费米速度的情况下，尾流电位振荡并不存在，并且已知电子相互作用是短程的。后者曾在 LiF 中提及 $\bar{p}$ ，在 PRL134 作者组的一篇论文中：“观察到射入粒子的能量损失机制极其局部” [19]。

关于不共度轨迹的重要性和准确性

rt-TDDFT 计算在 PRL [1] 和 [6] 中的一个关键差异在于确定完全随机方向的停止能力所使用的方法，从而最小化方向效应。然而，如上所述，在低速下，方向效应对 $\bar{p}$ 应该不起重要作用。经过仔细审查手稿后，不能确定，但 PRL134[1] 似乎仅沿不共度晶体方向使用了一个轨迹。原则上，这样的程序消除了对撞击参数采样的需求。然而，它引入了难以量化的统计不确定性，因为它取决于与撞击参数相关的能量损失 $\Delta E(b)$ 的细节。另一方面， $\Delta E(b)$ 与射弹速度相关，并相应地与能量损失机制有关。

- 图 3 中的数据点围绕一条假设的光滑曲线没有波动。因此，可能仅使用了一组或几组固定的轨迹。论文中并未明确说明这一点，对于该研究小组以外的任何读者来说这是具有误导性的。
- 这里我们给出了对 PRL134 评估的一个不共格轨迹的统计不确定性定量估计，路径长度约为 $48\text{\AA}$ ，如图 2 所示。在 AIM 指导下，我们假设了一个简化的低能激发机制，该机制导致在一个特定的最近接近距离以下能量损失固定，而在其他情况下无能量损失（对于更大的碰撞参数）。在图 4 和图 5 中，我们给出了两个直方图，用于展示由直线轨迹与 LiF 中的 F 原子之间定义的关键碰撞参数 $b_c = 2\text{ a.u.}$ 决定的小碰撞参数事件数量分布，沿着一个固定的 $\bar{p}$ 速度矢量。每个轨迹对应于不同的随机起始位置。使用有限轨迹长度 $L \approx 48\text{\AA}$ ，氟原子密度为 $\rho_F = 0.06088\text{ 个}/\text{\AA}^3$ 以及反应截面 $\sigma_{react} = \pi b_c^2$ ，我们估计每个随机轨迹的平均碰撞次数为 $N_{react} = L \cdot \rho_F \cdot \sigma_{react} = 10.3$ 。在大约 4% 的范围内，这与图 4（10.9 次碰撞）和图 5（10.6 次碰撞）中从 10^5 计算出的轨迹所确定的平均碰撞次数一致。然而，这些图形显示出非常不同的形状，尽管两个直方图仅在两个固定的三维轨迹方向上有所不同。这些方向是 $[1\phi\phi^2]$ ，正如 A.A. Correa [20] 所建议的那样（在 PRL134 中引用并可能使用），以及 $[1\pi/3\text{ e}/2]$ ，我们仅为了比较目的引入的另一个可能的非公度方向。图 5 中的一个具有随机起始位置的典型轨迹涉及平均误差为 12%，这低于对 10.6 个事件预期的计数统计量。然而，图 4 的评估却得出平均误差为 43%，且非对称数量分布从 0 个电离事件（误差=-100%）延伸到 16 个电离事件（对应的误差=+47%）。因此，对于调整到 PRL134 的测试条件，基于黄金比例 [20] 在图 4 中的轨迹方向对随机起始坐标具有非常强的敏感性。对于单个轨迹而言，此过程可能导致总体误差极大。
- 在 PRL134 中指出，“非公度轨道方法已被证明是最简单且令人满意的准确方法”，但 PRL134 的作者仅引用了他们自己和一个专注于通过机器学习提高计算速度的外部小组。我们上述对有限长度轨迹在 LiF 晶格中的非公度轨道方法可靠性的定量调查为准确性问题提供了新的视角。对于由近碰撞确定的反应截面，大约需要 10 个或更多的此类轨迹才能获得具有百分之几精度的结果。然而，选择一个数学上有趣的非公度方向 [20]，甚至可能恶化准确性问题。

关于 PRL134 量子计算的方法论

- 关于相互作用势，PRL134 的作者指出“对于质子，使用了氢的局部库仑伪势，而对于反质子，则使用了等效的排斥伪势。”伪势用于阻塞特定的束缚态和/或限制某些相互作用项。这可能正是导致在高速度下缺失 20% 的停止功率贡献（如果消除了奇点）的原因，以及部分导致在 $v = 0.4\text{ a.u.}$ 处 200% 的贡献（如果抑制了长程偶极子相互作用）。

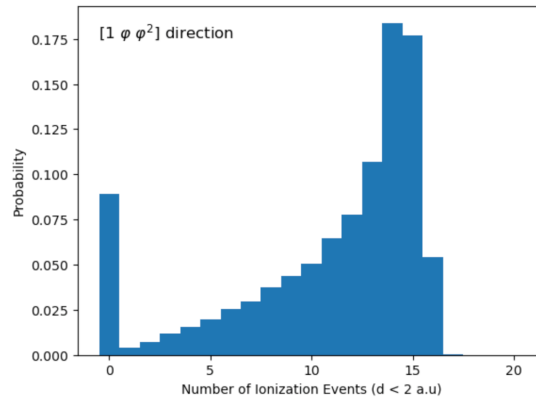


图 4. F 原子碰撞事件分布的直方图，使用了一组沿不共度 $[1\phi\phi^2]$ 方向的直线轨迹，并采用了 $\phi = (1 + \sqrt{5})/2$ 和随机空间偏移 (参见 [20])。

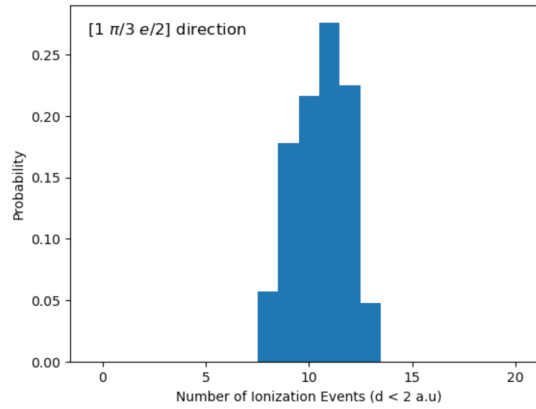


图 5. 如图 4 所示的直方图，但针对的是另一种不相容 $[1\pi/3 e/2]$ 方向。

- 到目前为止我们理解的是，进行 PRL134 计算跟踪由 p 和 $\bar{p}$ 诱导的激发沿大约 $48\text{\AA}$ 长度的不相称轨迹的时间依赖性。如此长的轨迹改善了碰撞统计并简化了提取阻止能力的线性回归。然而，这涉及到一个缺点，即同一 $3\times 3\times 3$ 超晶胞会被同一个粒子（在不同位置）穿透几次。取决于超晶胞边界性质（如简单的周期性或吸收型超晶胞表面），第一次通过后，超晶胞可能不再代表未受扰动的固体。价带人口会发生变化，并且可能会出现填充错误传导带状态的演变，这可能导致混沌连续波结构的建立或阻止进一步在超晶胞内的离子化事件。这两种效应都会降低最终阻止能力结果的准确性。

结论

总结而言，我们的调查发现 PRL134 论文中存在几个值得注意的不一致和误解。鉴于这些问题，我们认为使用 PRL134 作为参考时应谨慎。

-
- [1] G. Massillon-JL, A. A. Correa, X. Andrade, and E. Artacho, “Anomalies in the electronic stopping of slow antiprotons in lif,” arXiv:2501.14381 and *Physical Review Letters*, vol. 134/7, p. 076401, 2025.
- [2] E. Fermi and E. Teller, “The capture of negative mesotrons in matter,” *Physical Review*, vol. 72/5, p. 399, 1947.

- [3] B. Solleder, L. Wirtz, and J. Burgdörfer, “Vanishing gap in lif for electronic excitations by slow antiprotons,” *Physical Review B*, vol. 79, p. 125107, 2009.
- [4] G. Schiwietz, U. Wille, R. Díez Muiño, P. D. Fainstein, and P. L. Grande, “Comprehensive analysis of the stopping power of antiprotons and negative muons in he and h2 gas targets,” *Journal of Physics B: At. Mol. Opt. Phys.*, vol. 29, p. 307, 1996.
- [5] S.P. Møller, A. Csete, T. Ichioka, H. Knudsen, U.I. Uggerhøj, and H.H. Andersen, “Stopping Power in Insulators and Metals without Charge Exchange,” *Physical Review Letters* 93/4, p. 042502, 2004.
- [6] X. Qi, F. Bruneval, and I. Maliyov, “Ab initio prediction of a negative barkas coefficient for slow protons and antiprotons in lif,” *Physical Review Letters*, vol. 128, p. 043401, 2022.
- [7] S. Samarin, O. Artamonov, A. Suvorova, A. Sergeant, and J. Williams, “Measurements of insulator band parameters using a combination of single-electron and two-electron spectroscopy,” *Solid State Communications*, vol. 129, p. 389, 2004. see also references therein.
- [8] U. Wille, “Adiabatic orbitals of the ion-image-charge system in ion-metal-surface scattering,” *Z Phys D - Atoms, Molecules and Clusters 21 (Suppl 1)*, vol. 21, p. S353, 1991.
- [9] A. Sajid, G. Murtaza, and A. Reshak, “Shift of band gap from direct to indirect and optical response of lif under pressure,” *Modern Physics Letters B*, vol. 27/9, p. 1350061, 2013.
- [10] M. Guo, X. Zhang, H. Gu, and N. Wang, “Ab initio calculations of electronic and optical properties in o-doped lif crystal,” *Central European Journal of Physics*, vol. 6, p. 321, 2008.
- [11] G. Schiwietz, B. Skogvall, J. Tanis, and D. Schneider, “Investigation of simultaneous inner- and outer-shell ionization and auger-electron emission in slow ar+ + ar collisions at intermediate impact parameters,” *Physical Review A*, vol. 38, p. 5552, 1988. see also references therein.
- [12] J. D. Jackson, “Classical electrodynamics,” 1981.
- [13] G. Basbas, W. Brandt, and R. H. Ritchie, “Perturbed-stationary-state theory of atomic inner-shell ionization by heavy charged particles,” *Phys. Rev. A*, vol. 7, pp. 1971–1976, Jun 1973.
- [14] G. Schiwietz and P. L. Grande, publication in preparation, 2025
- [15] 2025 “<http://www.casp-program.org>”. $\bar{p}$ calculations with the stopping-power program (version 6.0) by Grande and Schiwietz. See, e.g., Nucl. Instr. Meth. B267, 859 (2009) or NIM-B273, 1 (2012).
- [16] P. Abbamonte, T. Graber, J. Reed, S. Smadici, C.-L. Yeh, A. Shukla, J.-P. Rueff, and W. Ku, “Dynamical reconstruction of the exciton in lif with inelastic x-ray scattering,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 105, no. 34, pp. 12159–12163, 2008.
- [17] S. Datz, C. D. Moak, O. H. Crawford, H. F. Krause, P. F. Dittner, J. G. del Campo, J. A. Biggerstaff, P. D. Miller, P. Hvelplund, and H. Knudsen, “Resonant coherent excitation of channeled ions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 40, pp. 843–847, Mar 1978.
- [18] C. Moak, J. Biggerstaff, O. Crawford, P. Dittner, S. Datz, J. Del Campo, P. Hvelplund, H. Knudsen, H. Krause, P. Miller, and S. Overbury, “Resonant coherent excitation of fast heavy ions in crystals,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, vol. 194, no. 1, pp. 327–336, 1982.
- [19] J. M. Pruneda, D. Sánchez-Portal, A. Arnau, J. I. Juaristi, and E. Artacho, “Electronic stopping power in lif from first principles,” *Physical Review Letters*, vol. 99/23, p. 235501, 2007.
- [20] A. A. Correa, “Calculating electronic stopping power in materials from first principles,” *Computational Materials Science*, vol. 150, pp. 291–303, 2018.