

**UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA**

**DEPARTAMENTO DE FÍSICA**



**TESIS DOCTORAL**

**PROPUESTA DE UN POTENCIAL EFECTIVO  
ANALÍTICO PARA IONES INMERSOS EN PLASMAS**

**JUAN MIGUEL GIL DE LA FE**

Las Palmas de Gran Canaria, octubre 2000

16/2000-01  
UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA  
UNIDAD DE TERCER CICLO Y POSTGRADO

Reunido el día de la fecha, el Tribunal nombrado por el Excmo. Sr. Rector Magfco. de esta Universidad, el/a aspirante expuso esta TESIS DOCTORAL.

Terminada la lectura y contestadas por el/a Doctorando/a las objeciones formuladas por los señores miembros del Tribunal, éste calificó dicho trabajo con la nota de *Sobresaliente. Cum Laude. Con distinción*

Las Palmas de Gran Canaria, a 20 de diciembre de 2000.

El/a Presidente/a: Dr. D. Francisco Rubio Royo,

El/a Secretario/a: Dr.D. Antonio Luis González Guerra,

El/a Vocal: Dr.D. Francisco Mauricio Domínguez,

El/a Vocal: Dr.D. José Manuel Perlado Martín,

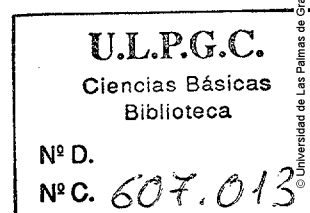
El/a Vocal: Dr.D. Bernardo Zurro Hernández,

El Doctorando: D. Juan Miguel Gil de la Fé,



UNIVERSIDAD DE LAS PALMAS DE GRAN CANARIA  
DOCTORADO EN FÍSICA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE FÍSICA FUNDAMENTAL Y APLICADA

**PROPUESTA DE UN POTENCIAL EFECTIVO ANALÍTICO  
PARA IONES INMERSOS EN PLASMAS**



*Tesis doctoral presentada por Juan Miguel Gil de la Fe  
Dirigida por el Dr. D. Pablo Martel Escobar y por el Dr. D. Emilio Mínguez Torres.*

Los directores,

El doctorando.

Fdo.: Dr. Martel Escobar y Dr. Mínguez Torres

Fdo.: Juan Miguel Gil de la Fe

Las Palmas de Gran Canaria a 23 de octubre de 2000

A la memoria de mi Padre

A mi Madre

A Julia, Juan y Pedro

## **Agradecimientos**

---

Este trabajo de Tesis se ha realizado bajo la dirección de los doctores D. Pablo Martel Escobar y D. Emilio Mínguez Torres, a quienes deseo expresar mi más profunda gratitud por su apoyo científico, su amistad, y por los medios puestos a mi alcance.

Así mismo, agradezco a mis compañeros del grupo de investigación de Interacción Radiación Materia de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, Jesús García Rubiano, Rafael Rodríguez Pérez y Francisco Hernández Ruano, la ayuda prestada en todo momento. A este último compañero debo la idea que se recoge en el apéndice 4 de esta Tesis Doctoral.

También quiero manifestar mi agradecimiento por mis compañeros del Departamento de Física de la Universidad de Las Palmas de Gran Canaria, cuya amistad y camaradería han creado el ambiente propicio para poder realizar este trabajo.

Igualmente, deseo agradecer al profesor D. Guillermo Velarde, director del Instituto de Fusión Nuclear de la Universidad Politécnica de Madrid, las facilidades que me han sido dadas en dicho centro.

Por último, deseo expresar mi agradecimiento a mi mujer Julia y mis hijos Juan Miguel y Pedro Manuel quienes, sobre todo en los últimos meses de elaboración de esta Tesis, han sabido disculpar mis ausencias y animarme en los momentos más difíciles.

## Índice

<b>1.- Introducción General.....</b>	<b>1</b>
<b>2.- Átomos en plasmas. Potenciales efectivos.....</b>	<b>7</b>
2.1.- Introducción.....	7
2.2.- Descripción del movimiento de las partículas en un plasma.....	11
2.2.1.- Sistema de Ecuaciones de Klimotovich. Descripción en el espacio $\Gamma$ .....	11
2.2.2.- Sistema de Ecuaciones de Boltzmann-Vlasov. Descripción en el espacio $\mu$ .....	14
2.2.3.- Teoría de los dos fluidos. Descripción en el espacio real.....	16
2.3.- Átomos inmersos en plasmas.....	22
2.3.1.- Plasma ideal. Átomo multielectrónico aislado.....	24
2.3.2.- Plasma no ideal. Átomo multielectrónico no aislado.....	30
2.3.3.- Determinación de las abundancias de las distintas especies iónicas: Ecuación de Saha generalizada.....	37
2.4.- Interacción entre iones. Distancias características en plasmas.....	47
2.5.- Potenciales efectivos para átomos inmersos en plasmas.....	54
2.5.1.- Potenciales efectivos no aislados autoconsistentes.....	56
2.5.1.1.- Potencial efectivo de átomo o configuración detallada.....	56
2.5.1.2.- Potencial efectivo de átomo o configuración media.....	61
2.5.2.- Potenciales efectivos no aislados analíticos.....	64
2.5.2.1.- Potencial de coulomb apantallado para iones hidrogenoides.....	65

2.5.2.2.- Potencial de coulomb apantallado para átomos multielectrónicos.....	72
<b>3.- Método para generar potenciales efectivos analíticos para átomos no aislados.....</b>	<b>79</b>
3.1.- Introducción.....	79
3.2.- Modelo de interacción del átomo con el plasma.....	81
3.3.- La función de carga efectiva: diversas aproximaciones.....	92
3.3.1.- Aproximación de electrón óptico hidrogenoide.....	94
3.3.2.- Aproximación de electrón óptico asintótico.....	96
3.3.3.- Aproximación de orden cero.....	97
3.4.- Aproximación analítica de orden cero con electrón óptico asintótico.....	100
3.5.- Aproximación analítica de orden cero con electrón óptico hidrogenoide.....	105
3.6.- Propuesta de un potencial efectivo analítico para iones en plasmas.....	106
<b>4.- Estudio del potencial efectivo analítico no aislado propuesto.....</b>	<b>111</b>
4.1.- Introducción.....	111
4.2.- Resolución numérica de la ecuación radial de Dirac. Cálculo de las energías y funciones de onda monoeléctricas.....	112
4.3.- Emisión de línea. Energías de transición y fuerzas de oscilador.....	119
4.4.- Efectos del plasma sobre el potencial efectivo.....	125
4.5.- Efectos del plasma sobre las energías de nivel.....	157
4.6.- Efectos del plasma sobre las energías totales.....	197
4.7.- Efectos del plasma sobre las funciones de onda y la densidad radial.....	202
4.8.- Efectos del plasma sobre las energías de transición y las fuerzas de oscilador.....	216
<b>5. Conclusiones y líneas futuras.....</b>	<b>237</b>
5.1.- Conclusiones.....	237
5.2.- Líneas futuras.....	243

---

<b>Apéndices</b> .....	<b>245</b>
Apéndice 1. Determinación del potencial efectivo en la aproximación de electrón óptico asintótico.....	245
Apéndice 2. Determinación del potencial efectivo en la aproximación de electrón óptico hidrogenoide no relativista.....	249
Apéndice 3. Parámetros del potencial analítico de átomo aislado.....	261
Apéndice 4. Aproximación analítica de la función $\eta(r)$ .....	267
<b>Bibliografía</b> .....	<b>271</b>





# Capítulo 1

## Introducción general.

---

Durante los últimos 25 años se ha progresado gradualmente en el entendimiento de las condiciones que han de darse para alcanzar la ignición de blancos de fusión inercial con el mínimo requerimiento energético, mediante láseres o haces de iones usados como conductores de dicho proceso de ignición. Este progreso ha supuesto en la década que finaliza un extraordinario y rápido desarrollo de las teorías, de los modelos de simulación y de la instrumentación. Resultado de ello son los avances en materia de láseres de alta potencia, haces de iones e instalaciones de potencia pulsadas que han aparecido durante los años 80. Por estos motivos, el campo de la ciencia relacionado con la fusión inercial y sus aplicaciones dará lugar a nuevas capacidades en el próximo siglo.

Láseres, haces de iones y potencia pulsada son mecanismos que permiten concentrar alta energía en espacio y tiempo, y originan plasmas muy densos cuya existencia se ha diagnosticado entre las decenas de picosegundos y los microsegundos. En tales experimentos se pueden alcanzar temperaturas del plasma, tanto de los electrones como de los iones superiores a  $10^8$  K, presiones por encima de las  $10^{11}$  atm, y temperaturas de la radiación mayores que  $10^6$  K. Por ejemplo, temperaturas de radiación de 100 eV e incluso cercanas a 300 eV se han encontrado en blancos cilíndricos (*hohlraums*) de diámetros entre 4 y 1 mm. Los flujos

resultantes de estos blancos, del orden de  $10^5$  GW/cm<sup>2</sup> sr pueden emplearse para alcanzar la compresión necesaria de blancos esféricos de deuterio-tritio y alcanzar la ignición, o para efectuar medidas de propiedades de materiales, o conocer procesos físicos asociados.

Tales experimentos se han efectuado en instalaciones como Nova (actualmente parado), Omega y Nike en los Estados Unidos, Gekko-XII en Japón, Phebus (desmantelado) y LULI en Francia, Helen y Vulcan en Inglaterra e Iskra en Rusia. En la actualidad se encuentran en fase de construcción el LMJ (Laser MegaJoule) en Francia y el NIF (National Ignition Facility) en Estados Unidos, los cuales permitirán demostrar la viabilidad científica de la Fusión Inercial, y establecer la base para el desarrollo de un reactor que lo demuestre.

Los nuevos experimentos realizados en las instalaciones anteriores han sido y son de gran valor para la ciencia y tecnología de la materia sometida a alta densidad de energía. Las condiciones, antes mencionadas, de los plasmas obtenidos en estos experimentos alcanzan situaciones similares a las que se dan en el sol y en las atmósferas estelares.

Los resultados de estos experimentos son aplicables a una amplia variedad de parcelas científico-tecnológicas, como la astrofísica, el estudio de materiales sometidos a altas densidades y temperaturas, o el desarrollo de los láseres de femtosegundos.

Las condiciones que se encuentran en los blancos usados en fusión inercial son similares a las de algunos fenómenos estudiados en astrofísica, encontrándose analogías entre los procesos físicos que tienen lugar, así por ejemplo, se pueden establecer símiles entre las explosiones hidrodinámicas y las supernovas.

Con el desarrollo de dispositivos de amplificación de pulsos se han alcanzado potencias superiores a  $10^{15}$  W en tiempos menores de  $10^{-12}$  s, produciendo intensidades en blancos del orden de  $10^{21}$  W/cm<sup>2</sup>. Esta tecnología abre posibilidades para estudiar situaciones de ignición, así como la posibilidad de crear fuentes de neutrones que permitan usarse como prueba de materiales para fusión; así como aplicaciones en materiales cerámicos, materiales biológicos y en procesos de fabricación de materiales.

Sin duda existen muchas áreas de la ciencia involucradas en estos procesos y en las numerosas aplicaciones que de ellos se derivan. En especial, la física atómica de la materia sometida a estas condiciones extremas tiene aspectos que todavía son materia de investigación en la actualidad.

El análisis de los resultados experimentales ha impulsado el desarrollo de nuevos modelos cinéticos para explicar la diagnosis del plasma, lo que conlleva la necesidad de mejorar los modelos atómicos para que éstos incorporen los efectos del plasma. En este sentido, la tesis plantea un procedimiento para introducir los efectos de densidad y temperatura en los potenciales analíticos de átomo aislado, y propone un potencial efectivo analítico concreto que contempla los efectos del plasma y que es determinado a partir de uno de átomo aislado que fue determinado por los directores de este trabajo.

En estas condiciones de alta temperatura y elevada densidad, la estructura de los niveles energéticos de los átomos del plasma sufre cambios muy importantes. En el medio existirán iones, electrones y el campo de radiación producido térmicamente. Así se producirán colisiones entre los electrones libres y los electrones ligados, así como la interacción de la radiación con los electrones ligados. Por estos mecanismos tendrán lugar excitaciones, ionizaciones, decaimiento radiativo, y desexcitaciones, además de procesos de recombinación.

Cuando el medio se encuentra en equilibrio termodinámico se ha podido determinar mediante la ecuación de Saha la abundancia de iones en estado fundamental, mientras que mediante la distribución de Boltzmann es posible conocer la abundancia de estados excitados. Sin embargo en medios menos ionizados y cuando predominan los procesos colisionales y radiativos, el medio se encuentra en situación de no equilibrio, lo cual obliga a evaluar dichas abundancias iónicas mediante ecuaciones de balance.

Así pues, un primer paso para conocer las propiedades ópticas del medio será conocer como es la distribución de iones del mismo. Se ha llegado a estimar que el número distinto de configuraciones de un plasma de  $Z$  alto puede ser del orden de  $10^5$ , lo cual es muy complejo de determinar.

El conocimiento de estas propiedades tiene dos motivos fundamentales: uno determinar las secciones eficaces de la interacción de la radiación con el plasma y el otro es obtener el espectro de emisión o absorción con el cual diagnosticar la densidad y temperatura del plasma.

En ambos casos es necesario tratar un elevado número de configuraciones, lo cual implica determinar para cada una, las energías de nivel, funciones de onda, las transiciones y sus intensidades, además de los mecanismos de anchura de las líneas, para el cálculo de opacidades, y el transporte de líneas en el caso de la espectroscopía de rayos X.

En los últimos diez años se ha avanzado mucho en el conocimiento teórico de las opacidades de radiación, desarrollándose números programas de cálculo que han permitido conocer las propiedades ópticas de los plasmas en temperaturas y densidades similares a las que se obtienen en los plasmas de fusión. A este respecto cabe mencionar las distintas reuniones internacionales para comparar códigos de opacidades realizadas desde 1989 hasta 1997. Desde la última celebrada en Madrid,

no se ha vuelto a realizar ninguna otra, pero sí se han incrementado los resultados experimentales en laboratorios europeos, fundamentalmente L'Ecole Polytechnique de Francia, que permiten evaluar los modelos teóricos.

Ahora bien, debido al elevado número de configuraciones atómicas que es necesario contemplar en estos cálculos de las propiedades ópticas del plasma es aconsejable utilizar para la resolución de las ecuaciones atómicas modelos menos complejos que el autoconsistente de Dirac-Hartree-Fock (DHF), que requiere cálculos complicados, por tener un término en el potencial de intercambio no local, y por necesitar un proceso iterativo.

Una línea de interés y de la que existen antecedentes no muy abundantes consiste en el desarrollo de modelos que emplean potenciales analíticos o paramétricos, lo cual permite conocer las propiedades de átomos o iones y sus estados excitados, con un coste computacional considerablemente menor que el requerido al usar los modelos autoconsistentes.

Como dijimos, esta Tesis Doctoral se basa en una debida a los directores de este trabajo y con la que se iniciaba esta línea de investigación, y en ella se pretende proponer un potencial analítico de átomo no aislado que incorpore la influencia del plasma en el que se encuentra inmerso

En el siguiente capítulo planteamos el problema atómico multielectrónico para átomos inmersos en plasmas en equilibrio local termodinámico, tanto en el caso de plasmas ideales como no ideales. En él presentamos los métodos más relevantes de construcción de los potenciales efectivos atómicos dentro del contexto del modelo de partícula independiente en un campo central medio, centrándonos fundamentalmente en aquellos métodos que utilizan potenciales efectivos analíticos con efectos de densidad y temperatura.

El capítulo tercero lo dedicamos a explicar el método propuesto en esta Tesis para la construcción de potenciales efectivos analíticos que incorporen los efectos de plasma. En este capítulo estudiamos el comportamiento que estos potenciales efectivos tienen a cortas y largas distancias del núcleo. El esquema desarrollado es válido para plasmas a altas temperaturas y con densidades bajas e intermedias (correspondientes a un parámetro de acoplamiento  $\Gamma < 1$ ). Terminamos proponiendo un potencial efectivo analítico concreto.

A continuación, en el capítulo cuarto después de dedicar algunas páginas a exponer las técnicas y algoritmos utilizados para el cálculo de las diversas magnitudes atómicas, nos centramos en el análisis de los resultados obtenidos con el potencial efectivo propuesto en este trabajo. En concreto se analizan las energías de nivel, las funciones de onda, las densidades de carga radial de los electrones ligados, las energías totales, así como las energías de transición y fuerzas de oscilador, cantidades que son la base del cálculo de opacidades. Para todas estas magnitudes estudiamos como es la influencia del plasma.

Por último, el capítulo quinto lo dedicamos a enumerar las principales conclusiones, así como a exponer las líneas de investigación abiertas con esta Tesis.

Al margen de las comparaciones que en el capítulo de resultados se hacen con otros modelos, queremos dejar constancia de que como muestra de la aplicación de la Tesis, está previsto que los desarrollos se validen con un experimento original, no realizado aún, que se propondrá a la UE, para realizar en el laboratorio LULI (Laboratoire pour l'Utilisation des Lasers Intenses), durante el 2001-2002, con el fin de comparar los resultados obtenidos en la Tesis, y otros realizados por investigadores de la Universidad Marie Curie de Paris, y contrastarlos con los experimentales que se obtengan.

# Capítulo 2

## Átomos en plasmas. Potenciales efectivos.

---

### 2.1.- Introducción.

En general se define un plasma como un sistema formado por constituyentes neutros, como átomos o neutrones, y constituyentes cargados, como los electrones, iones o protones. Es considerado el cuarto estado de la materia además de los tres estados considerados habitualmente como son el estado líquido, sólido y gaseoso, y aunque es el más desconocido y el último que se ha estudiado en profundidad, es el estado de la materia que más abunda en el universo, estimándose que el 99% de la materia se encuentra estado de plasma. Podemos situar cronológicamente el inicio del estudio de los plasmas en el año 1929, cuando Tonsks y Langmuir generan plasmas en tubos de descargas de gases para observar oscilaciones eléctricas. Los progresos en la Física de Plasmas se dan a partir de la segunda mitad de este siglo debido fundamentalmente a las investigaciones relacionadas con la exploración del espacio y de los procesos termonucleares.

Se considera (Nishikawa y Wakatani, 1994) que para formar un plasma se tiene que cumplir que la energía cinética media de un electrón, estimada como  $kT_e$ , sea sustancialmente mayor que su energía coulombiana media, dada por  $e^2/4\pi\epsilon_0 d$ ,



donde  $d$  es la distancia media entre el electrón y el ion más cercano y puede estimarse considerando que dentro de una esfera de radio  $d$  exista un solo ion y neutralidad de carga. Por tanto, si denotamos por  $n_{ion}$  a la densidad de iones por unidad de volumen, y consideramos iones simplemente ionizados se tiene  $(4\pi d^3/3)n_{ion} = 1$ . Entonces, tenemos la siguiente condición para la formación de un plasma

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d} \ll kT_e \Rightarrow \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{4\pi n_{ion}}{3} \right)^{1/3} \frac{1}{kT_e} \ll 1 \quad (2.1)$$

Si despreciamos en la ecuación anterior el factor  $4\pi\sqrt{3}$  e introducimos en la misma la denominada longitud de Debye para un plasma,  $\lambda_D$ , definida como

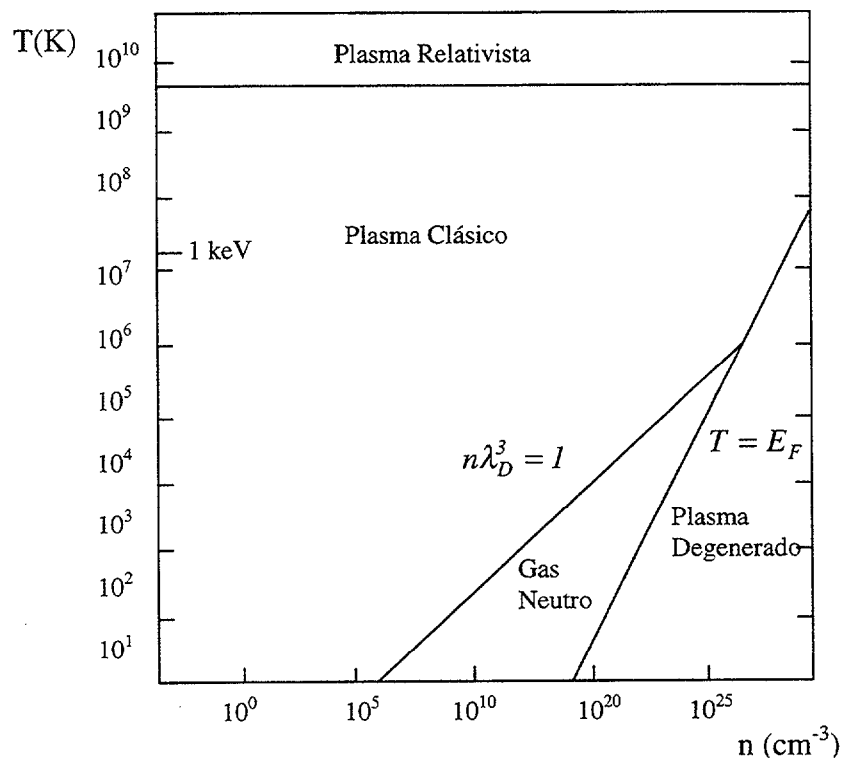
$$\lambda_D = \left( \frac{\epsilon_0 T_e}{n_{ion} e^2} \right)^{1/2} \quad (2.2)$$

entonces la condición de formación de un plasma se puede expresar como

$$n_{ion} \lambda_D^3 \gg 1 \quad (2.3)$$

Existe una gran variedad de tipos de plasmas en el universo, y desde un punto de vista físico, su comportamiento es también muy variado y depende de la región de densidad y temperatura. En la siguiente figura mostramos una posible clasificación de los plasmas atendiendo a distintas regiones de densidad y temperatura, restringiéndonos al intervalo de temperaturas comprendido entre  $10-10^{10}$  K aproximadamente y un intervalo de densidades de partículas por  $\text{cm}^3$  de  $1-10^{25}$   $\text{cm}^{-3}$ . El interés de esta clasificación radica en que en cada una de las regiones consideradas predominan unos efectos físicos determinados, y consta de tres regiones distintas. Una primera región denominada plasmas clásicos, donde se tienen temperaturas y densidades moderadas, que se caracteriza porque no se necesita considerar los efectos relativistas ni la estadística cuántica (esencialmente para el tratamiento de los electrones libres y del movimiento de traslación de iones, ya que sean cuales sean las condiciones de densidad y temperatura del plasma, el tratamiento de los electrones

ligados entra siempre dentro del dominio de la mecánica cuántica y en el caso de iones con número atómico alto se deben considerar también efectos relativistas). Una segunda región denominada plasmas relativistas, de muy altas temperaturas, donde debe considerarse los efectos relativistas, y por último una tercera región, denominada plasmas cuánticos o degenerados, donde debe considerarse la estadística cuántica.



En el estudio de los plasmas podemos distinguir diferentes aspectos. Por un lado se encuentra el estudio de la dinámica de los constituyentes del plasma y de la evolución de los campos electromagnéticos presentes en el mismo. Por otro lado podemos estudiar, para el caso de plasmas en equilibrio termodinámico o en equilibrio local termodinámico, los aspectos termodinámicos del plasma entre los que se encuentran la determinación de las ecuaciones de estado o la determinación de las abundancias de los distintos constituyentes. También podemos estudiar las propiedades ópticas de un plasma, tanto el espectro de absorción de cómo de emisión

o propiedades como las opacidades medias de Rosseland y Planck. Otro aspecto a estudiar y que tiene una relevancia fundamental en el estudio de las propiedades anteriores, es la estructura interna de los átomos e iones inmersos en plasmas, aspecto este último que es el objeto de estudio de esta Tesis Doctoral.

En los siguientes apartados de este capítulo comenzaremos mostrando las principales descripciones utilizadas para estudiar la dinámica de los constituyentes de un plasma (iones y electrones libres), para el caso de plasmas no relativistas y no degenerados donde además se considera a los constituyentes como entes puntuales y por tanto sin estructura interna. Aunque es una fuerte restricción el considerar a los iones sin estructura interna, es una aproximación válida para estudiar el movimiento de los centros de masa de estas partículas así como la distribución de los campos electromagnéticos.

A continuación pasamos a estudiar cuál es el hamiltoniano de los átomos e iones inmersos en plasmas en equilibrio termodinámico para plasmas formados por una sola especie química (que se puede encontrar en sus diferentes estados de ionización) y por electrones libres, haciendo especial énfasis en el hamiltoniano interno y en el potencial asociado a este hamiltoniano. Primero para un plasma en el que no existen interacciones entre los distintos constituyentes, o plasma ideal, a continuación para un plasma en el que existen interacciones entre los diferentes constituyentes, o plasma no ideal. A continuación veremos la ecuación que determina la abundancia de los diferentes estados de ionización según el método de minimización de la energía libre de Helmholtz. Con este análisis no sólo veremos cuál es el hamiltoniano asociado a un átomo no aislado, sino que además apreciaremos su importancia en la determinación de las propiedades termodinámicas (y ópticas) de los plasmas. Además se analizará como determinadas consideraciones sobre la dependencia funcional de los términos no ideales de la energía libre, pueden

influir en la función de partición interna de un ion y evitar su divergencia, como ocurre para la función de partición de un ion aislado.

En la siguiente parte del capítulo nos centraremos en los diferentes métodos de resolución del hamiltoniano multielectrónico no aislado de un ion o átomo inmerso en un plasma, centrándonos en los métodos basados en el empleo de potenciales efectivos analíticos para átomos no aislados.

## 2.2.- Descripción del movimiento de las partículas en un plasma.

### 2.2.1.- Sistema de Ecuaciones de Klimotovich. Descripción en el Espacio $\Gamma$ .

Consideremos un plasma formado por  $N$  partículas y sea  $N_s$  el número de partículas del tipo  $s$ , de modo que se cumple que  $\sum_s N_s = N$ . El número de partículas del tipo  $s$  que se encuentran en la región del espacio comprendida entre  $\vec{r}$  y  $\vec{r} + d\vec{r}$  con velocidades comprendidas entre  $\vec{v}$  y  $\vec{v} + d\vec{v}$  en el instante  $t$  viene dado por

$$\hat{F}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{r} d\vec{v} \quad (2.4)$$

donde  $\hat{F}_s$  es la función de distribución de partículas del tipo  $s$ . Si tomamos el volumen diferencial  $d\vec{r}d\vec{v}$  lo suficientemente pequeño para que en su interior se pueda encontrar como máximo una partícula en cada instante de tiempo, entonces la función de distribución se puede expresar como

$$\hat{F}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) = \sum_{j=1}^{N_s} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j(t)) \delta(\vec{v} - \vec{v}_j(t)) \quad (2.5)$$

siendo  $\delta$  la función Delta de Dirac, que para el caso de un vector  $\vec{a}$  está dada por

$$\delta(\vec{a}) = \delta(a_x)\delta(a_y)\delta(a_z) \quad (2.6)$$

Diferenciando respecto del tiempo la expresión (2.4) se obtiene

$$\frac{\partial \hat{F}_s}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N_s} \left( \vec{v}_j \cdot \vec{\nabla}_{r,j} \hat{F}_s + \hat{a}_{j,s}(\vec{r}_j, \vec{v}_j, t) \cdot \vec{\nabla}_{v,j} \hat{F}_s \right) \quad (2.7)$$

siendo  $\vec{\nabla}_{r,j}$  y  $\vec{\nabla}_{v,j}$  respectivamente, el operador gradiente en el espacio de posiciones y en el de velocidades de la partícula  $j$ . Si consideramos que cada partícula está sometida al campo eléctrico y magnético creado por el resto de partículas del plasma, tendremos que la aceleración de la partícula  $j$  del tipo  $s$  se puede expresar, a través de la Segunda Ley de Newton del Movimiento, como

$$\hat{a}_{j,s} = \frac{q_s}{m_s} \left( \hat{E}(\vec{r}_j, t) + \vec{v}_j \times \hat{B}(\vec{r}_j, t) \right) \quad (2.8)$$

donde  $q_s$  y  $m_s$  son la carga y la masa respectivamente de las partículas del tipo  $s$ . Como la función de distribución está formada por una suma de funciones, en (2.5) desaparece la sumatoria en  $j$  y se obtiene la siguiente ecuación

$$\frac{\partial \hat{F}_s}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r \hat{F}_s + \hat{a}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot \vec{\nabla}_v \hat{F}_s = 0 \quad (2.9)$$

que recibe el nombre de Ecuación de Klimontovich para las partículas del tipo  $s$ . Además hay que tener en cuenta las ecuaciones de Maxwell para determinar el campo eléctrico y el campo magnético dadas por

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \times \hat{\vec{E}}(\vec{r}, t) &= -\frac{\partial \hat{\vec{B}}(\vec{r}, t)}{\partial t} \\
 \vec{\nabla} \times \hat{\vec{B}}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial \hat{\vec{E}}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \mu_o \hat{\vec{J}}(\vec{r}, t) \\
 \vec{\nabla} \cdot \hat{\vec{B}}(\vec{r}, t) &= 0 \\
 \vec{\nabla} \cdot \hat{\vec{E}}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\epsilon_o} \hat{\rho}(\vec{r}, t)
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

donde  $\hat{\vec{J}}$   $\hat{\rho}$  y son la densidad de corriente y densidad de carga respectivamente, y están dadas en términos de la función de distribución de cada uno de los tipos de partículas como

$$\hat{\vec{J}}(\vec{r}, t) = \sum_s q_s \int \vec{v} \hat{F}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} \tag{2.11}$$

$$\hat{\rho}(\vec{r}, t) = \sum_s q_s \int \hat{F}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} \tag{2.12}$$

donde  $s$  corre sobre todos los tipos de partículas que hay en el plasma. Las ecuaciones (2.9), (2.10), (2.11) y (2.12) constituyen el denominado sistema de ecuaciones de Klimontovich. Se trata de un sistema de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, por lo que para obtener una solución se necesita fijar unas condiciones iniciales para las posiciones y velocidades de cada una de las partículas del plasma y unas condiciones de contorno para el campo electromagnético. A continuación se comienza el proceso de resolución del sistema de ecuaciones dando una función de distribución con la que se determina la densidad de corriente y de carga a través de (2.11) y (2.12) respectivamente. Entonces si se tiene el siguiente conjunto de condiciones iniciales para las partículas del plasma  $\{\vec{r}_{j,0}, \vec{v}_{j,0}\} = \{\vec{r}_1(t=0), \vec{v}_1(t=0), \dots, \vec{r}_N(t=0), \vec{v}_N(t=0)\}$ , las magnitudes que resultan de la solución del sistema dependen de éstas, de modo que es conveniente introducir esta dependencia. Por ejemplo para la función de distribución o el campo eléctrico se tendría

$$\hat{F}(\vec{r}, \vec{v}; \{\vec{r}_{j,0}, \vec{v}_{j,0}\}) \quad ; \quad \hat{E}(\vec{r}, \vec{v}; \{\vec{r}_{j,0}, \vec{v}_{j,0}\}) \quad (2.13)$$

La dependencia con las condiciones iniciales, que son  $6N$  para un sistema de  $N$  partículas, hace que estas ecuaciones no puedan ser resueltas en la práctica para sistemas con un número elevado de partículas, e incluso en el caso de poder encontrar una solución, sería dudosa la utilidad de una información tan detallada.

### 2.2.2.- Sistema de Ecuaciones de Boltzmann-Vlasov. Descripción en el Espacio $\mu$ .

Este sistema de ecuaciones se puede obtener promediando el sistema de ecuaciones de Klimontovich respecto de las  $6N$  condiciones iniciales, con lo que la función de distribución y el resto de magnitudes no dependerán de ellas, y además, serán funciones suaves de la posición  $\vec{r}$  y de la velocidad  $\vec{v}$ . Representaremos este promedio con el símbolo  $\langle \rangle$ , y a la magnitud promediada le quitaremos el símbolo ' $\hat{\cdot}$ ' además de quitar la dependencia con los parámetros iniciales. Así por ejemplo, para el promedio de la función de distribución se tiene

$$F(\vec{r}, \vec{v}) = \langle \hat{F}(\vec{r}, \vec{v}; \{\vec{r}_{j,0}, \vec{v}_{j,0}\}) \rangle \quad (2.14)$$

Empezaremos analizando el promedio de la ecuación (2.9), que da lugar a la ecuación

$$\left\langle \frac{\partial \hat{F}_s}{\partial t} \right\rangle + \langle \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r \hat{F}_s \rangle + \langle \hat{a}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot \vec{\nabla}_v \hat{F}_s \rangle = 0 \quad (2.15)$$

Como consecuencia de la linealidad del promedio respecto de la derivada y de que la velocidad, que es una variable independiente, no depende de las condiciones iniciales, se cumple

$$\left\langle \frac{\partial \hat{F}_s}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \langle \hat{F}_s \rangle}{\partial t} = \frac{\partial F_s}{\partial t} \quad ; \quad \langle \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r \hat{F}_s \rangle = \vec{v} \cdot \langle \vec{\nabla}_r \hat{F}_s \rangle = \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r \langle \hat{F}_s \rangle = \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r F_s \quad (2.16)$$

Esto no ocurre para el último término de (2.15) debido a que la aceleración  $\hat{a}_s$  depende también de las condiciones iniciales y entonces

$$\langle \hat{a}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot \vec{\nabla}_v \hat{F}_s \rangle \neq \bar{a}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot \vec{\nabla}_v F_s \quad (2.17)$$

Llamando a la diferencia entre las dos cantidades de (2.17) término de correlación a dos cuerpos, que denotamos por

$$\langle \hat{a}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot \vec{\nabla}_v \hat{F}_s \rangle_{corr} = \langle \hat{a}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot \vec{\nabla}_v \hat{F}_s \rangle - \bar{a}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot \vec{\nabla}_v F_s \quad (2.18)$$

podemos escribir finalmente (2.9) promediada respecto a las condiciones iniciales como

$$\frac{\partial F_s}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r F_s + \bar{a}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot \vec{\nabla}_v F_s = \langle \hat{a}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot \vec{\nabla}_v \hat{F}_s \rangle_{corr} \quad (2.19)$$

El término del segundo miembro de la ecuación anterior representa la correlación entre dos partículas o la influencia de las colisiones entre dos partículas en la dinámica del plasma. En el caso de plasmas ideales o cercanos a la idealidad está justificado el suponer que el movimiento de cada partícula es independiente del resto, y entonces, este último término es aproximadamente cero. En esta situación la ecuación queda

$$\frac{\partial F_s}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r F_s + \bar{a}_s(\vec{r}, \vec{v}, t) \cdot \vec{\nabla}_v F_s = 0 \quad (2.20)$$

El sistema de ecuaciones en esta descripción se completa promediando las ecuaciones (2.10), (2.11) y (2.12), que quedan formalmente igual salvo que las



magnitudes que aparecen están promediadas respecto de las condiciones iniciales. Esto es

$$\begin{aligned}\bar{\nabla} \times \bar{E}(\bar{r}, t) &= -\frac{\partial \bar{B}(\bar{r}, t)}{\partial t} \\ \bar{\nabla} \times \bar{B}(\bar{r}, t) &= \frac{1}{c^2} \frac{\partial \bar{E}(\bar{r}, t)}{\partial t} + \mu_o \bar{J}(\bar{r}, t)\end{aligned}\quad (2.21)$$

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{B}(\bar{r}, t) = 0$$

$$\bar{\nabla} \cdot \bar{E}(\bar{r}, t) = \frac{1}{\epsilon_o} \rho(\bar{r}, t)$$

$$\bar{J}(\bar{r}, t) = \sum_s q_s \int \bar{v} F_s(\bar{r}, \bar{v}, t) d\bar{v}\quad (2.22)$$

$$\rho(\bar{r}, t) = \sum_s q_s \int F_s(\bar{r}, \bar{v}, t) d\bar{v}\quad (2.23)$$

Este nuevo sistema de ecuaciones recibe el nombre de sistema de ecuaciones de Vlasov o de Boltzmann no colisional.

### 2.2.3.- Teoría de los dos Fluidos. Descripción en el espacio real.

En las dos descripciones anteriores, a partir de la función de distribución que resultaba de la solución de los sistemas de ecuaciones se obtenía para un instante  $t$  el número de partículas del tipo  $s$  que había en un cierto volumen del espacio con una cierta velocidad. En la primera descripción esta cantidad dependía de las condiciones iniciales, mientras que en la segunda, como consecuencia de un promedio sobre las condiciones iniciales, no había tal dependencia. En ambas descripciones se consideraba al plasma formado por partículas, cuerpos discretos dispuestos en el espacio. En la Teoría de los dos fluidos, la forma de describir las partículas del tipo  $s$  en un plasma es considerar que éstas forman un medio continuo en el espacio real, de modo que cada tipo de partículas viene representado por la densidad de partículas en un punto del espacio. Para las partículas del tipo  $s$  la función densidad se puede

obtener promediando la función de distribución de partículas del tipo  $s$  que proporciona la descripción del plasma en el espacio- $\mu$ , es decir, las ecuaciones de Vlasov. Entonces, llamando  $n_s(\vec{r}, t)$  a esta densidad se tiene

$$n_s(\vec{r}, t) = \int F_s(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} \quad (2.24)$$

El flujo de partículas viene dado por

$$\Gamma_s(\vec{r}, t) = \int \vec{v} F_s(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} \quad (2.25)$$

y definiendo el valor medio de una magnitud  $A$  como

$$A_m = \frac{\int A F(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v}}{\int F(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v}} = \frac{1}{n(\vec{r}, t)} \int A F(\vec{r}, \vec{v}, t) d\vec{v} \quad (2.26)$$

podemos expresar el flujo de partículas del tipo  $s$  como

$$\Gamma_s(\vec{r}, t) = n_s(\vec{r}, t) \vec{v}_{s,m}(\vec{r}, t) \quad (2.27)$$

donde  $\vec{v}_{s,m}$  es la velocidad media de dicho tipo de partículas. Un balance de partículas sobre un volumen  $d^3\vec{r}$  en el espacio real, da lugar a la siguiente ecuación de continuidad

$$\frac{\partial n_s(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \Gamma_s = 0 \quad (2.28)$$

La ecuación anterior expresa la ley de conservación de la masa, y se ha tomado cero el segundo miembro por haberse considerado compensados los procesos de ionización de átomos (fuentes) y de recombinación entre electrones e iones (sumideros).

Sea  $v^l$  la componente de la velocidad a lo largo de la dirección  $l$  en coordenadas cartesianas. El momento lineal en la dirección  $l$ ,  $\pi_s^l$ , está dado por

$$\pi_s^l(\vec{r}, t) = \int m_s v^l F_s(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3\vec{v} = n_s(\vec{r}, t) m_s \langle v_s^l(\vec{r}, t) \rangle \quad (2.29)$$

La componente  $l$  del flujo de momento en la unidad de área perpendicular a la dirección  $k$  está dado por

$$P_s^{lk}(\vec{r}, t) = \int m_s v^l v^k F_s(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3\vec{v} = n_s(\vec{r}, t) m_s \langle v_s^l(\vec{r}, t) v_s^k(\vec{r}, t) \rangle \quad (2.30)$$

Esta cantidad se llama tensor de momento transferido y está relacionado con el tensor de presión. El vector velocidad puede descomponerse en la suma de un vector velocidad medio  $\langle \vec{v}_s \rangle$  y una fluctuación  $\tilde{v}$ , es decir,  $\vec{v}_s(\vec{r}, t) = \langle \vec{v}_s(\vec{r}, t) \rangle + \tilde{v}_s(\vec{r}, t)$ .

Usando esta descomposición, la expresión anterior puede escribirse como

$$P_s^{lk}(\vec{r}, t) = n_s(\vec{r}, t) m_s \langle v_s^l(\vec{r}, t) \rangle \langle v_s^k(\vec{r}, t) \rangle + \tilde{P}_s^{lk}(\vec{r}, t) \quad (2.31)$$

donde  $\tilde{P}_s^{lk}$  se denomina tensor presión y viene dado por

$$\tilde{P}_s^{lk}(\vec{r}, t) = m_s \int \tilde{v}^l(\vec{r}, t) \tilde{v}^k(\vec{r}, t) F_s(\vec{r}, t) d^3\vec{v} \quad (2.32)$$

En adelante asumiremos una función de distribución Maxwelliana local con temperatura  $T_s$  para cada tipo de partícula  $s$ , dada por

$$F_s(\vec{r}, t) = n_s(\vec{r}) \left[ \frac{m_s}{2\pi T_s(\vec{r})} \right] e^{-m_s (\vec{v} - \langle \vec{v}_s \rangle)^2 / 2T_s(\vec{r})} \quad (2.33)$$

Se denomina función de distribución local debido a que las propiedades promediadas,  $n_s$ ,  $T_s$  y  $\langle \vec{v}_s \rangle$ , dependen del punto del espacio. Introduciendo la relación anterior en la ecuación que da el tensor presión se obtiene

$$\tilde{P}_s^{lk} = \begin{pmatrix} n_s T_s & 0 & 0 \\ 0 & n_s T_s & 0 \\ 0 & 0 & n_s T_s \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

Por tanto, para una distribución maxwelliana el tensor presión es isótropo y se corresponde con la presión escalar  $P_s = n_s T_s$ . Ocasionalmente, pequeñas desviaciones de la distribución de Maxwell son importantes, por lo que es conveniente escribir el tensor presión como

$$\tilde{P}_s^{lk} = P_s \delta_{lk} + \delta \tilde{P}_s^{lk} \quad (2.35)$$

siendo  $\delta_{kl}$  la delta de Kronecker y  $\delta \tilde{P}_s^{lk}$  la componente no diagonal del tensor presión que da cuenta de la desviación de la función de distribución respecto de la distribución maxwelliana. Ésta viene dada por

$$\delta \tilde{P}_s^{kl} = \int m_s \left( \tilde{v}^l \tilde{v}^k - (\tilde{v}^l)^2 \delta_{lk} \right) F_s(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 \vec{v} \quad (2.36)$$

Esta cantidad está relacionada con el tensor viscosidad. En las aplicaciones prácticas esta desviación normalmente se desprecia ya que la descripción de las propiedades macroscópicas promediadas es poco sensible a los detalles de la distribución.

Ahora consideremos el balance de momento en el espacio real. Cuando los efectos de colisión entre iones y electrones son despreciados, el balance de momento es

$$\frac{\partial \pi_s^l}{\partial t} + \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} P_s^{kl} = F_s^l \quad (2.37)$$

donde el segundo término de la izquierda corresponde al flujo de momento. El término  $F_s^l$  es la fuerza electromagnética por unidad de volumen. Ésta se obtiene

promediando la fuerza  $q_s(\vec{E} + \vec{v}_s \times \vec{B})$  para electrones e iones sobre el espacio de velocidad

$$F_s^l = q_s n_s (\vec{E} + \vec{v}_s \times \vec{B})^l \quad (2.38)$$

La fuerza de la gravedad entre las partículas del plasma se desprecia al ser mucho menos intensas que las electromagnéticas. Entonces el balance de momentos queda como

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_s m_s \langle v_s^l \rangle) + \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} (n_s m_s \langle v_s^l \rangle \langle v_s^k \rangle) = - \sum_k \frac{\partial}{\partial x_k} \tilde{P}_s^{lk} + q_s n_s (\vec{E} + \vec{v}_s \times \vec{B})^l \quad (2.39)$$

Si ahora consideramos la distribución de maxwell, el tensor de presión se convierte en un escalar y entonces la ecuación anterior queda como

$$n_s m_s \frac{d\langle \vec{v}_s \rangle}{dt} = -\bar{\nabla} P_s + q_s n_s (\vec{E} + \langle \vec{v}_s \times \vec{B} \rangle) \quad (2.40)$$

donde hemos considerado

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \langle \vec{v}_s \rangle \cdot \bar{\nabla} \quad (2.41)$$

La ecuación anterior ha sido obtenida considerando las siguientes hipótesis:

- a) Los componentes del plasma son puntuales y están distribuidos de forma continua en el espacio.
- b) Las magnitudes macroscópicas han sido promediadas respecto a la velocidad.
- c) No existen transformaciones netas de un tipo de partículas en otras.
- d) Las distribuciones de velocidades para los componentes del plasma es mawxelliana.
- e) No hay colisiones entre iones y electrones.

A continuación realizaremos algunas consideraciones más con el objeto de obtener las distribuciones de densidad de las distintas partículas del plasma. Estas consideraciones son:

- a) La velocidad media de cada tipo de partícula es constante, por lo que  $\frac{d\langle \vec{v}_s \rangle}{dt} = \vec{0}$ .
- b) El campo magnético es nulo ( $\vec{B} = \vec{0}$ ).
- c) El campo eléctrico es conservativo, de modo que  $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi$  siendo  $\phi$  el potencial electrostático.
- d) Respuesta isoterma del plasma, es decir consideraremos que no hay dependencia de la temperatura  $T_s$  con ninguna variable.

Introduciendo estas nuevas consideraciones en la ecuación (2.40), se obtiene

$$\vec{0} = -\vec{\nabla}(n_s(\vec{r})T_s) + q_s n_s(\vec{r})(-\vec{\nabla}\phi(\vec{r})) \Rightarrow \frac{1}{n_s(\vec{r})} \vec{\nabla}n_s(\vec{r}) = -\frac{q_s}{T_s} \vec{\nabla}\phi(\vec{r}) \quad (2.42)$$

Si multiplicamos escalarmente la ecuación anterior por  $d\vec{r}$ , la ecuación anterior queda como

$$\frac{1}{n_s(\vec{r})} \vec{\nabla}n_s(\vec{r}) \cdot d\vec{r} = -\frac{q_s}{T_s} \vec{\nabla}\phi(\vec{r}) \cdot d\vec{r} \Rightarrow \frac{1}{n_s(\vec{r})} dn_s(\vec{r}) = -\frac{q_s}{T_s} d\phi(\vec{r}) \quad (2.43)$$

y finalmente, integrando entre un punto arbitrario del espacio y el infinito se tiene

$$n_s(\vec{r}) = n_s(\infty) e^{-q_s \phi(\vec{r})/T_s} \quad (2.44)$$

donde se ha tomado el origen de potencial en el infinito. Las densidades dadas por la ecuación anterior reciben el nombre de distribución de densidad de Boltzmann.

En el capítulo 3 desarrollaremos las ideas conducentes a introducir los efectos de densidad y temperatura en el potencial efectivo atómico, relacionado con las

coordenadas internas de un ion, para lo cual utilizaremos la densidad de partículas dada por la expresión anterior para los componentes del plasma.

### **2.3.- Átomos inmersos en plasmas.**

En el estudio de los plasmas en equilibrio termodinámico es de gran interés determinar la ecuación de estado, la composición o abundancia de cada una de las especies químicas presentes en el plasma así como la de sus correspondientes estados de ionización, o las propiedades ópticas de los mismos. Para ello, y desde el punto de vista termodinámico, se puede optar por dos descripciones del plasma. La descripción física (Rogers, 1979, 1981 a) en la que se considera al plasma formado por los constituyentes fundamentales, electrones y núcleos, y para su desarrollo se parte de la función de partición macrocanónica. Y la descripción química (Harris, Roberts y Trulio 1960; Harris ,1962,1964; Graboske, Harwood y Rogers 1969; Graboske, Harwood y DeWitt 1971; Fontaine, Graboske y van Horn 1977; Dappen 1980) en la que se considera al plasma formado por electrones libres y además por constituyentes que pueden tener estructura interna como átomos, iones y moléculas, utilizándose para el desarrollo de esta descripción la función de partición canónica.

Nosotros estamos interesados en la descripción química del plasma, ya que queremos introducir los efectos de densidad y temperatura del plasma en el potencial analítico correspondiente a átomos e iones en situación aislada, es decir, en constituyentes del plasma no fundamentales.

En la descripción química, una vez definidos los constituyentes del plasma, se pasa a construir el hamiltoniano  $H$  del plasma teniendo en cuenta las interacciones entre los diferentes constituyentes. Este hamiltoniano depende de los vectores de

posición,  $\vec{s}$ , y de los momentos de cada uno de los constituyentes,  $\vec{p}$ , de modo que  $H = H(\vec{s}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{s}_N, \vec{p}_N)$ , siendo  $N$  el número de constituyentes.

La función de partición canónica para un plasma a una temperatura  $T$ , un volumen  $V$  y con  $N$  constituyentes,  $Z(T, V, N)$ , se obtiene a partir de este hamiltoniano como

$$Z = \text{Tr}(H) = \sum_{\{J\}} e^{-E_J/kT} \quad (2.45)$$

donde la sumatoria en  $\{J\}$  corre sobre todos los posibles estados del plasma y  $E_J$  es la energía del plasma o autovalor de  $H$  en el estado  $J$ . Hemos escrito la función de partición canónica en un formalismo cuántico, aunque como veremos en apartados siguientes, en algunas ocasiones hagamos consideraciones semiclásicas.

Finalmente, las propiedades termodinámicas del plasma se obtienen a partir de la energía libre de Helmholtz

$$F = -kT \ln Z \quad (2.46)$$

En el caso de un plasma formado por una sola especie química (que será el caso que abordemos) la función de partición, y por tanto la energía libre, van a depender del número de iones que existan en el estado de ionización  $s$ ,  $N_s$ , y del número de electrones libres,  $N_e$ , por lo que se tendrán las siguientes dependencias funcionales:  $Z = Z(T, V, \{N_s\}, N_e)$  y  $F = F(T, V, \{N_s\}, N_e)$ . Para una temperatura y un volumen dado, las cantidades  $N_s$  y  $N_e$  se pueden obtener minimizando la energía libre respecto de dichas variables, sujeta la minimización a las condiciones impuestas por las relaciones estequiométricas que gobiernan las posibles transformaciones de los constituyentes del plasma. Por ejemplo, en el caso de un plasma monocomponente en el que se consideran átomos, iones y electrones libres (no se



consideran moléculas), las posibles transformaciones son los procesos de ionización o recombinación electrónica.

Los próximos dos apartados los dedicaremos a construir el hamiltoniano de un plasma, a expresar de forma adecuada la energía total del plasma con el fin de poder construir la función de partición canónica y a determinar la ecuación de Schrödinger de un electrón perteneciente a un ion inmerso en un plasma, ecuación que contiene el potencial efectivo objeto de estudio en este trabajo.

### 2.3.1- Plasma ideal. Átomo multielectrónico aislado.

Consideraremos un plasma formado por iones pertenecientes a una especie química con carga nuclear  $Z$  y por electrones libres, y además, que no existe ningún tipo de interacción entre los mismos. El hamiltoniano del plasma ideal,  $H^o$ , viene dado por la suma del hamiltoniano de los iones,  $H_I^o$ , y el hamiltoniano de los electrones libres,  $H_e^o$ ,

$$H^o = H_I^o + H_e^o = \sum_{i=1}^{N_I} H_{I,i}^o + \sum_{q=1}^{N_e} H_{e,q}^o \quad (2.47)$$

donde  $H_{I,i}^o$  es el hamiltoniano del ion  $i$ -ésimo,  $N_I$  es el número de iones presentes en el plasma,  $H_{e,i}^o$  es el hamiltonianos de los electrones libres y  $N_e$  es el número de electrones libres. El hamiltoniano de los electrones libres viene dado por

$$H_{e,q}^o = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{e,q}^2 \quad (2.48)$$

siendo  $\nabla_{e,q}$  el operador nabla asociada a las coordenadas del electrón libre  $q$ -ésimo y  $m_e$  su masa. La energía de los electrones libres se obtiene resolviendo la ecuación de Schrödinger para el hamiltoniano de partícula libre dado por (2.48).

Como los iones se pueden encontrar en los diferentes estados de ionización, es conveniente expresar el hamiltoniano de los iones como

$$H_I^o = \sum_{l=1}^Z \sum_{i=1}^{N_l} H_{I,i,l}^o \quad (2.49)$$

siendo  $H_{I,i,l}^o$  el hamiltoniano del ion  $i$ -ésimo en el estado de ionización  $l$ , definido por tener el ion un número de electrones ligados,  $n_{e,l}$ , dado por  $n_{e,l} = Z - l + 1$ , además el ion tiene una ionización,  $\chi_l$ , dada por  $\chi_l = Z - n_{e,l} = l - 1$ , y el número de iones presentes en el plasma en el estado de ionización  $l$ ,  $N_l$ , verifica la condición

$\sum_{l=1}^Z N_l = N_I$ . El hamiltoniano del ion  $i$ -ésimo, que coincide con el de un ion aislado por encontrarse en un plasma ideal, viene dado por

$$H_{I,i,l}^o = -\frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_{o,i,l}^2 - \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{j,i,l}^2 - \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \frac{Ze}{s_{j,o,i,l}} + \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \sum_{k=1}^{n_{e,l}} \frac{e^2}{s_{j,k,i,l}} \quad (2.50)$$

donde  $m_e$  y  $m_n$  son respectivamente la masa del electrón y del núcleo,  $s_{j,k,i,l} = |\vec{s}_{j,i,l} - \vec{s}_{k,i,l}|$  y  $s_{j,o,i,l} = |\vec{s}_{j,i,l} - \vec{s}_{o,i,l}|$ , siendo  $\vec{s}_{o,i,l}, \vec{s}_{1,i,l}, \dots, \vec{s}_{n_{e,l},i,l}$  los vectores de posición del núcleo y de los  $n_{e,l}$  electrones ligados, y  $\nabla_{o,i,l}$  y  $\nabla_{j,i,l}$  son los operadores nabla asociado a las coordenadas del núcleo y del electrón  $j$ -ésimo respectivamente. En la ecuación (2.50) el primer término representa la energía cinética del núcleo, el segundo la energía cinética de los electrones, el tercero representa la energía potencial de interacción electrostática entre el electrón  $j$ -ésimo y el núcleo, y el cuarto término la energía potencial de interacción electrostática entre

el electrón  $j$ -ésimo y el  $k$ -ésimo. Con el fin de simplificar el problema usaremos para cada ion las correspondientes coordenadas del centro de masa y relativas o internas definidas como

$$\bar{R}_{i,l} = \frac{m_n \bar{s}_{o,i,l} + \sum_{j=1}^N m_e \bar{s}_{j,i,l}}{m_n + n_{e,l} m_e} \quad ; \quad \bar{r}_{j,i,l} = \bar{s}_{j,i,l} - \bar{s}_{o,i,l} \quad (2.51)$$

con lo que el hamiltoniano (2.50) se transforma en

$$H_{I,i,l}^o = -\frac{\hbar^2}{2(m_n + n_{e,l} m_e)} \nabla_{i,l}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \nabla_{j,i,l}^2 - \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \frac{Ze^2}{r_{j,i,l}} + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^{n_{e,l}} \frac{e^2}{r_{j,k,i,l}} + \frac{1}{m_n} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^{n_{e,l}} \nabla_{j,i,l} \nabla_{k,i,l} \quad (2.52)$$

donde ahora los operadores nabla son los operadores asociados a las nuevas coordenadas ( $\nabla_{i,l} \leftrightarrow \bar{R}_{i,l}, \nabla_{j,i,l} \leftrightarrow \bar{r}_{j,i,l}$ ),  $r_{j,k,i,l} = |\bar{r}_{j,i,l} - \bar{r}_{k,i,l}|$ , y  $\mu$  es la masa reducida del sistema electrón-núcleo y viene dada por

$$\mu = \frac{m_e m_n}{m_e + m_n} \quad (2.53)$$

En lo sucesivo supondremos que la masa reducida es aproximadamente igual a la masa del electrón  $m_e$ , y no consideraremos el último término de la ecuación (2.52) denominado término de polarización de masa o de Hughes-Eckart, ya que su efecto es despreciable en las situaciones de interés físico (Condon y Shortley, 1957). El hamiltoniano (2.52) se puede separar como suma de dos términos: uno que sólo depende de las coordenadas del centro de masa,  $H_{CM}$ , y otro que sólo depende de las coordenadas relativas o internas,  $H_{INT}$ . Es decir,

$$H_{I,i,l}^o = H_{CM,i,l}^o + H_{INT,i,l}^o \quad (2.54)$$

donde

$$H_{CM,i,l}^o = -\frac{\hbar^2}{2(m_n + n_{e,l}m_e)} \nabla_{i,l}^2 \quad (2.55)$$

$$H_{INT,i,l}^o = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \nabla_{ji,l}^2 - \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \frac{Ze^2}{r_{ji,l}} + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^{n_{e,l}} \frac{e^2}{r_{jk,l}} \quad (2.56)$$

Esta descomposición del hamiltoniano dada por (2.54) junto con las relaciones dadas por (2.55) y (2.56) permite determinar la energía total del plasma como

$$E^o = E_I^o + E_e^o = \sum_{l=1}^Z \sum_{i=1}^{N_l} E_{i,l}^o + \sum_{q=1}^{N_e} E_{q,e}^o = \sum_{l=1}^Z \sum_{i=1}^{N_{l,i}} (E_{CM,i,l}^o + E_{INT,i,l}^o) + \sum_{q=1}^{N_e} E_{q,e}^o \quad (2.57)$$

ya que se ha logrado separar las coordenadas de los constituyentes del plasma, y además para los iones, en coordenadas del centro de masa e internas. Como consecuencia de esta separación en el hamiltoniano del plasma, además de la descomposición en la energía dada por la ecuación anterior, se tiene la siguiente descomposición en los posibles estados accesibles al plasma

$$\begin{aligned} \{J\} &= \{J_I\} \{J_e\} = \{J_{I,1,1}\} \dots \{J_{I,N_I,1}\} \dots \{J_{I,1,Z}\} \dots \{J_{I,N_I,Z}\} \{J_{e,1}\} \dots \{J_{e,N_e}\} \\ &= \{J_{CM,1,1}\} \dots \{J_{CM,N_I,1}\} \dots \{J_{CM,1,Z}\} \dots \{J_{CM,N_I,Z}\} \\ &\quad \{J_{INT,1,1}\} \dots \{J_{INT,N_I,1}\} \dots \{J_{INT,1,Z}\} \dots \{J_{INT,N_I,Z}\} \\ &\quad \{J_{e,1}\} \dots \{J_{e,N_e}\} \end{aligned} \quad (2.58)$$

donde  $\{J_I\}$  y  $\{J_e\}$  son los estados accesibles a los iones y electrones libres respectivamente,  $\{J_{CM,i,l}\}$  y  $\{J_{INT,i,l}\}$  son los estados accesibles para los grados de libertad del centro de masa e interno respectivamente, del ion  $i$ -ésimo en el estado de ionización  $l$ , y por último,  $\{J_{e,q}\}$  son los estados accesibles al electrón libre  $q$ -ésimo. Las relaciones (2.57) y (2.58) serán fundamentales, como veremos en el apartado 2.2.3., para determinar la función de partición canónica.

La resolución de los hamiltonianos (2.48) y (2.55) es sencilla por corresponder ambos al movimiento de una partícula libre, en el primer caso un electrón libre y en el segundo el centro de masa de un ion en el estado de ionización  $l$  al que se le asocia una masa  $m_n + n_{e,l}m_e$ . Por tanto el problema de resolución del hamiltoniano atómico aislado se reduce a resolver el hamiltoniano interno, dado por (2.56), que consiste en resolver la ecuación de Schrödinger estacionaria asociada a dicho hamiltoniano. Ésta en unidades atómicas ( $\hbar = m = e = 1$ ) viene dada por

$$\left[ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \nabla_{j,i,l}^2 - \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \frac{Z}{r_{j,i,l}} + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^{n_{e,l}} \frac{1}{r_{jk,i,l}} \right] \psi_{i,l}^o(\vec{r}_{1,i,l}, \dots, \vec{r}_{n_{e,l},i,l}) = E_{i,l}^o \psi_{i,l}^o(\vec{r}_{1,i,l}, \dots, \vec{r}_{n_{e,l},i,l}) \quad (2.59)$$

donde  $\psi_{i,l}^o$  y  $E_{i,l}^o$  son la autofunción o función de onda y el autovalor o energía del hamiltoniano interno. Debido a la presencia del término  $1/r_{jk,i,l}$ , el hamiltoniano interno no es separable y entonces la ecuación (2.59) no se puede resolver exactamente, lo que hace necesario recurrir a métodos aproximados para determinar la función de onda y la energía.

La aproximación más usada para resolver el hamiltoniano relativo o interno es la aproximación de campo central. Se basa en considerar que el electrón  $j$ -ésimo está sometido a un potencial  $U_{j,i,n_{e,l}-1}^o(r_{j,i,l})$ , denominado potencial del core o potencial efectivo aislado, que representa la atracción nuclear y un efecto promediado de las repulsiones con los  $n_{e,l} - 1$  electrones restantes del ion. Además este potencial se considera central, es decir, que sólo depende de la distancia a la que se encuentra el electrón del núcleo. Con estas consideraciones es conveniente reescribir el hamiltoniano interno de la siguiente forma

$$H_{INT,i,l}^o = \sum_{j=1}^{n_{e,l}} H_{j,i,l}^o + W^o \quad (2.60)$$

con

$$H_{j,i,l}^o = -\frac{1}{2} \nabla_{j,i,l}^2 + U_{j,i,n_{e,l}-1}^o(r_{j,i,l}) \quad (2.61)$$

y

$$W^o = \sum_{j=1}^{n_{e,l}} [-U_{j,i,n_{e,l}-1}^o(r_{j,i,l})] + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^N \frac{1}{r_{jk,i,l}} \quad (2.62)$$

donde  $H_{j,i,l}^o$  es el hamiltoniano interno del electrón  $j$ -ésimo y  $W^o$  es una corrección de la repulsión electrónica. El problema consiste en encontrar un potencial efectivo tal que el término  $W^o$  sea lo suficientemente pequeño para que pueda ser despreciado o tratado como una perturbación en el hamiltoniano interno. Entonces en esta aproximación ( $H_{INT,i,l}^o \approx \sum_{j=1}^{n_{e,l}} H_{j,i,l}^o$ ) el hamiltoniano es separable en lo que respecta a sus coordenadas internas, por lo que el problema se reduce a resolver para cada electrón del ion una ecuación de Schrödinger del tipo

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla_{j,i,l}^2 + U_{j,i,n_{e,l}-1}^o(r_{j,i,l}) \right] \varphi_{j,i,l}^o(\vec{r}_{j,i,l}) = E_{j,i,l}^o \varphi_{j,i,l}^o(\vec{r}_{j,i,l}) \quad (2.63)$$

donde  $\varphi_{j,i,l}^o$  es la función de onda del electrón  $j$ -ésimo del ion en estudio en situación aislada (por tratarse de un plasma ideal), también denominada función de onda monoeléctronica, y  $E_{j,i,l}^o$  es la energía del correspondiente electrón, también denominada energía monoeléctronica o de nivel. La resolución de (2.63) tiene el problema añadido de que el potencial efectivo  $U_{j,i,n_{e,l}-1}^o(r_{j,i,l})$  no es conocido a priori. La determinación de este potencial es un problema bastante complicado y es atacado fundamentalmente por diferentes métodos autoconsistentes como el método estadístico de Thomas –Fermi (Thomas, 1926; Fermi, 1927), el método autoconsistente Hartree-Fock que es debido a una mejora que hace Fock (1930) al

método ideado por Hartree en 1928, o el método del funcional de la densidad (Hohenberg y Kohn, 1964)). Otra alternativa es la búsqueda de expresiones analíticas para este potencial efectivo aislado (Green, Sellin y Zachor, 1969; Aymar, Crance y Klapisch, 1970; Klapisch, 1971; Yunta, Rodríguez Mayquez y Sánchez del Río, 1973; Rogers, Wilson e Iglesias), que es la opción que nos interesa para nuestro propósito de introducir en el potencial efectivo los efectos de densidad y temperatura característicos de los plasmas no ideales. La ventaja de esta opción es que se evita el proceder autoconsistente a la hora de utilizar el potencial en el cálculo de las propiedades atómicas, como por ejemplo energías y funciones de ondas monoeléctricas o fuerzas de oscilador, necesarias para determinar las propiedades de un plasma. Evitar esta autoconsistencia es especialmente importante para el caso de plasmas de elementos de número atómico alto, donde el número de especies iónicas es alto, o cuando se trata de plasmas multicomponentes donde hay que conocer simultáneamente muchas propiedades atómicas de diferentes elementos químicos.

Los métodos autoconsistentes mencionados en el párrafo anterior construyen el potencial  $U_{j,i,n_e,l-1}^{\circ}(r_{j,i,l})$  a partir de las funciones de onda solución de la ecuación (2.63) o a partir de la densidad de electrones del sistema, que en el caso del método del funcional de la densidad es construida a partir de dichas funciones de onda. Por tanto, conviene especificar esta dependencia y escribir por ejemplo  $U_{j,i,n_e,l-1}^{\circ}(r_{j,i,l}\{\varphi_{j,i,l}^{\circ}\})$ .

### 2.3.2- Plasma no ideal. Átomo multieletrónico no aislado.

Consideraremos un plasma formado por iones pertenecientes a una especie química con carga nuclear  $Z$ , y por electrones libres, y que existe interacción entre todos los constituyentes del plasma, es decir, que el plasma es no ideal. En esta

situación los electrones ligados de un ion y el núcleo interaccionan con los electrones ligados y núcleos de otros iones (dando lugar a la interacción entre iones), o con los electrones libres (dando lugar a la interacción entre iones y electrones libres). Además está la interacción entre los electrones libres entre sí. Estas nuevas interacciones hacen que el hamiltoniano total  $H$  del plasma no se puede expresar de forma tan sencilla como en el caso anterior, es decir, como suma de los hamiltonianos de los constituyentes del plasma. Ahora el hamiltoniano del plasma viene dado por la suma del hamiltoniano de los iones,  $H_I^o$ , el hamiltoniano de los electrones libres,  $H_e^o$ , y por último, el hamiltoniano de interacción,  $\Delta H$ ,

$$H = H_I^o + H_e^o + \Delta H \quad (2.64)$$

El hamiltoniano de interacción  $\Delta H$  se puede descomponer en la forma

$$\Delta H = \Delta H_{I,I} + \Delta H_{e,e} + \Delta H_{I,e} \quad (2.65)$$

donde  $\Delta H_{I,I}$  es el hamiltoniano de interacción entre iones,  $\Delta H_{e,e}$  es el de interacción entre electrones libres, y  $\Delta H_{I,e}$  es el de interacción entre iones y electrones libres. Entonces el hamiltoniano total queda como

$$H = H_I^o + H_e^o + \Delta H_{I,I} + \Delta H_{e,e} + \Delta H_{I,e} \quad (2.66)$$

donde los hamiltonianos que aparecen en la expresión anterior admiten la siguiente descomposición

$$H_I^o = \sum_{l=1}^Z \sum_{i=1}^{N_l} H_{I,i,l}^o \quad (2.67)$$

$$H_{ef}^o = \sum_{q=1}^{N_e} H_{e,q}^o \quad (2.68)$$



$$\Delta H_{I,I} = \sum_{l=1}^Z \sum_{l'=1}^Z \sum_{i=1}^{N_l} \sum_{i'=1}^{N_{l'}} \Delta H_{i,i',l,l'}^{I,I} \quad (2.69)$$

$$\Delta H_{e,e} = \sum_{q=1}^{N_e} \sum_{q'=1}^{N_e} \Delta H_{q,q'}^{e,e} \quad (2.70)$$

$$\Delta H_{I,e} = \sum_{l=1}^Z \sum_{i=1}^{N_l} \sum_{q=1}^{N_e} \Delta H_{i,i,q}^{I,e} \quad (2.71)$$

donde  $H_{I,i,l}$  es el hamiltoniano del ion  $i$ -ésimo en el estado de ionización  $l$ ,  $H_{e,q}$  es el hamiltoniano del electrón libre  $q$ -ésimo,  $\Delta H_{i,i',l,l'}^{I,I}$  es el hamiltoniano que da cuenta de la interacción del ion  $i$ -ésimo en el estado de ionización  $l$  con el ion  $i'$ -ésimo en el estado de ionización  $l'$ ,  $\Delta H_{q,q'}^{e,e}$  es el hamiltoniano de interacción entre el electrón libre  $q$ -ésimo y el  $q'$ -ésimo, y por último,  $\Delta H_{i,i,q}^{I,e}$  es el hamiltoniano de interacción entre el ion  $i$ -ésimo con el electrón libre  $q$ -ésimo. Estos hamiltonianos vienen dados por las siguientes expresiones

$$H_{i,i,l}^o = -\frac{\hbar^2}{2m_n} \nabla_{o,i,l}^2 - \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{j,i,l}^2 - \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \frac{Z}{|\bar{s}_{j,i,l} - \bar{s}_{o,i,l}|} + \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \sum_{\substack{k=1 \\ j < k}}^{n_{e,l}} \frac{I}{|\bar{s}_{j,i,l} - \bar{s}_{k,i,l}|} \quad (2.72)$$

$$H_{e,q}^o = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{e,q}^2 \quad (2.73)$$

$$\Delta H_{i,i',l,l'}^{I,I} = \frac{Z^2}{|\bar{s}_{o,i',l'} - \bar{s}_{o,i,l}|} - \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \frac{Z}{|\bar{s}_{j,i,l} - \bar{s}_{o,i',l'}|} - \sum_{j=1}^{n_{e,l'}} \frac{Z}{|\bar{s}_{j,i',l'} - \bar{s}_{o,i,l}|} + \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \sum_{\substack{j'=1 \\ j < j'}}^{n_{e,l'}} \frac{I}{|\bar{s}_{j,i,l} - \bar{s}_{j',i',l'}|} \quad (2.74)$$

$$\Delta H_{q,q'}^{e,e} = \frac{I}{|\bar{s}_{e,q'} - \bar{s}_{e,q}|} \quad (2.75)$$

$$\Delta H_{i,i,q}^{I,e} = -\frac{Z}{|\bar{s}_{o,i,l} - \bar{s}_{e,q}|} + \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \frac{I}{|\bar{s}_{j,i,l} - \bar{s}_{e,q}|} \quad (2.76)$$

En el caso del plasma ideal vimos que debido a la inexistencia de interacciones entre los constituyentes, se producía la separación de las variables en el hamiltoniano y entonces era relativamente sencillo determinar la energía total del plasma, ya que se podía poner la energía como suma de las energías de los constituyentes (iones y electrones libres). Dicha descomposición no llegó hasta los constituyentes de los iones (núcleos y electrones ligados) debido a que entre estas partículas sí existen interacciones aunque estemos con un plasma ideal, lo que nos llevó a resolver el hamiltoniano interno de los átomos e iones de forma aproximada. Para este propósito se propuso una forma para el hamiltoniano interno dada por (2.60), de modo que considerando el término  $W^o$  pequeño y despreciándolo en primera aproximación frente a  $\sum_{j=1}^{n_{e,l}} H_{j,i,l}^o$ , quedaba un hamiltoniano interno aproximado de variables separadas.

Para el caso del plasma no ideal los dos primeros sumandos de (2.64), el hamiltoniano de iones y de electrones libres, son formalmente idénticos a los correspondientes términos en el plasma ideal, por lo que admiten también la descomposición en coordenadas del centro de masa e internas para el hamiltoniano de los iones dada por (2.54), con lo que

$$H = \sum_{l=1}^Z \sum_{i=1}^{N_l} (H_{CM,i,l}^o + H_{INT,i,l}^o) + \sum_{q=1}^{N_e} H_{e,q}^o + \Delta H \quad (2.76)$$

Sin embargo la presencia del término  $\Delta H$  impide la separación de las variables aún en el caso de introducir las coordenadas del centro de masa e internas, de modo análogo a como lo hacía el término  $1/r_{jk,i,l}$  en el hamiltoniano interno de un plasma ideal, dado por (2.56). Algo parecido se debe hacer con el hamiltoniano total del plasma no ideal, en concreto con el término que da cuenta de las interacciones entre los constituyentes, si se quieren obtener expresiones que puedan ser tratadas posteriormente para determinar la función de partición canónica y aplicar

el método de minimización de energía libre. Por tanto se propone para el hamiltoniano no ideal la siguiente forma

$$H = \sum_{l=1}^Z \sum_{i=1}^{N_l} (H_{CM,i,l}^o + H_{INT,i,l}^o) + \sum_{q=1}^{N_e} H_{e,q}^o + \Delta H_{CM} + \Delta H_{INT} + \Delta H_e + W \quad (2.77)$$

donde  $\Delta H_{CM}$  depende de las coordenadas de posición del centro de masa de todos los iones ( $\{\bar{\mathbf{R}}_{i,l}\}$ ),  $\Delta H_{INT}$  de las coordenadas de posición internas de todos los iones ( $\{\bar{\mathbf{r}}_{j,i,l}\}$ ) y  $\Delta H_e$  de todas las coordenadas de los electrones libres ( $\{\bar{\mathbf{s}}_q\}$ ), y  $W$  viene dado por

$$W = \Delta H - \Delta H_{CM} - \Delta H_{INT} - \Delta H_e \quad (2.78)$$

Los hamiltonianos de interacción  $\Delta H_{CM}$ ,  $\Delta H_{INT}$  y  $\Delta H_e$  están por determinar y la idea es proponer éstos de forma que  $W$  sea despreciable, y por tanto, el hamiltoniano (2.77) quede en variables separadas (en lo que respecta a coordenadas de centro de masa, internas y de electrones libres). Con esta descomposición, la energía del plasma se puede escribir como

$$E = \sum_{l=1}^Z \sum_{i=1}^{N_l} (E_{CM,i,l}^o + E_{INT,i,l}^o) + \sum_{q=1}^{N_e} E_{e,q}^o + \Delta E_{CM} + \Delta E_{INT} + \Delta E_e \quad (2.79)$$

Nosotros estamos interesados en el hamiltoniano de los iones y en particular en el hamiltoniano interno. A continuación veremos como se ve afectado la resolución de este hamiltoniano cuando el plasma es no ideal, siguiendo un procedimiento similar al seguido en el caso ideal. Para ello supondremos que el hamiltoniano  $\Delta H_{INT}$  se puede expresar como

$$\Delta H_{INT}(\{\bar{\mathbf{r}}_{1,i,l}, \dots, \bar{\mathbf{r}}_{n_{e,l},i,l}\}) = \sum_{l=1}^Z \sum_{i=1}^{N_l} \Delta H_{INT,i,l}(\bar{\mathbf{r}}_{1,i,l}, \dots, \bar{\mathbf{r}}_{n_{e,l},i,l}) \quad (2.80)$$

lo que permite expresar la energía interna del ion  $i$ -ésimo como

$$E_{INT,i,l} = E_{INT,i,l}^o + \Delta E_{INT,i,l} \quad (2.81)$$

Entonces, para el ion  $i$ -ésimo en el estado de ionización  $l$ , el hamiltoniano interno viene dado por

$$H_{INT,i,l}(\vec{r}_{1,i,l}, \dots, \vec{r}_{n_{e,l},i,l}) = H_{INT,i,l}^o(\vec{r}_{1,i,l}, \dots, \vec{r}_{n_{e,l},i,l}) + \Delta H_{INT,i,l}(\vec{r}_{1,i,l}, \dots, \vec{r}_{n_{e,l},i,l}) \quad (2.82)$$

y teniendo en cuenta (2.56) (en unidades atómicas)

$$H_{INT,i,l} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \nabla_{j,i,l}^2 - \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \frac{Ze^2}{r_{j,i,l}} + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^{n_{e,l}} \frac{e^2}{r_{jk,i,l}} + \Delta H_{INT,i,l}(\vec{r}_{1,i,l}, \dots, \vec{r}_{n_{e,l},i,l}) \quad (2.83)$$

con lo que la ecuación de Schrödinger a resolver es

$$\left[ -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \nabla_{j,i,l}^2 - \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \frac{Z}{r_{j,i,l}} + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^{n_{e,l}} \frac{1}{r_{jk,i,l}} + \Delta H_{INT,i,l}(\{\vec{r}_{j,i,l}\}) \right] \psi_{i,l}(\{\vec{r}_{j,i,l}\}) = E_{i,l} \psi_{i,l}(\{\vec{r}_{j,i,l}\}) \quad (2.84)$$

Así como en el plasma ideal el hamiltoniano interno era no separable debido a la presencia del término  $1/r_{jk,i,l}$ , ahora además, es no separable por la presencia del hamiltoniano de interacción  $\Delta H_{INT,i,l}$ . Para resolverlo utilizaremos nuevamente la aproximación de campo central, donde ahora el electrón  $j$ -ésimo está sometido a un potencial central  $U_{j,i,l}(r_{j,i,l})$ , denominado potencial efectivo, que representa la atracción nuclear, un efecto promediado de las repulsiones con los  $n_{e,l} - 1$  electrones restantes del ion y de la interacción de este electrón con los iones y electrones libres del plasma. Este potencial se puede poner como  $U_{j,i,l}(r_{j,i,l}) = U_{j,i,n_{e,l}-1}(r_{j,i,l}) + \Delta U_{j,i,l}(r_{j,i,l})$ , donde el primer término hace

referencia a la interacción del electrón  $j$ -ésimo con el core del ion  $i$ -ésimo y el segundo con las partículas del plasma. Con estas consideraciones el hamiltoniano interno queda de la siguiente forma

$$H_{INT,i,l} = \sum_{j=1}^{n_{e,l}} H_{j,i,l} + W' \quad (2.85)$$

con

$$H_{j,i,l} = -\frac{1}{2} \nabla_{j,i,l}^2 + U_{j,i,n_{e,l}-1}(r_{j,i,l}) + \Delta U_{j,i,l}(r_{j,i,l}) \quad (2.86)$$

y

$$W' = \sum_{j=1}^{n_{e,l}} \left[ -U_{j,i,n_{e,l}-1}(r_{j,i,l}) \right] + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^N \frac{1}{r_{jk,i,l}} + \Delta H_{INT,i,l}(\{r_{j,i,l}\}) \quad (2.87)$$

Finalmente, despreciando  $W'$  en el hamiltoniano interno se consigue la separación de variables para el mismo, quedando para cada ion un conjunto de ecuaciones de Schrödinger. Para el electrón  $j$ -ésimo se tiene

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla_{j,i,l}^2 + U_{j,i,n_{e,l}-1}(r_{j,i,l}) + \Delta U_{j,i,l}(r_{j,i,l}) \right] \varphi_{j,i,l}(\vec{r}_{j,i,l}) = E_{j,i,l} \varphi_{j,i,l}(\vec{r}_{j,i,l}) \quad (2.88)$$

donde  $\varphi_{j,i,l}$  y  $E_{j,i,l}$  son la función de onda y energía de nivel monoeléctricos en situación no aislada. Además del término  $\Delta U_{j,i,l}$  existe otra diferencia entre la ecuación anterior y la correspondiente al plasma ideal (o no aislado) dada por (2.63). Aunque  $U_{j,i,n_{e,l}-1}$  representa la misma interacción que  $U_{j,i,n_{e,l}-1}^o$ , la interacción del electrón con el core, si admitimos que se determina autoconsistentemente de forma similar a la explicada para un ion aislado, se tendrá que ésta dependerá ahora de las funciones de onda solución de (2.84) y no de (2.63).

El propósito de esta tesis es encontrar una forma analítica para el potencial  $U_{j,i,l}(r_{j,i,l})$ , denominado potencial efectivo del electrón  $j$ -ésimo, y analizar la

influencia de los efectos del plasma sobre diferentes cantidades atómicas. Antes de abordar este problema, que será el objeto del capítulo tres, y antes de empezar con una exposición sobre algunos de los métodos propuestos en la bibliografía para determinar  $U_{j,i,l}(r_{j,i,l})$ , pasamos a continuación a plantear la ecuación que determina las abundancias de las distintas especies iónicas presentes en un plasma monocomponente en equilibrio termodinámico. Si bien no es el objetivo de este trabajo calcular las abundancias, esto no permitirá ver como influyen los distintos grados de libertad en la determinación de una de las propiedades más importantes de un plasma, y analizar como se puede modificar la función de partición interna para evitar la divergencia, que como veremos, es uno de los problemas fundamentales de la física atómica de iones en plasma.

### 2.3.3.- Determinación de las abundancias de las distintas especies iónicas:

#### Ecuación de Saha generalizada.

En este apartado determinaremos la función de partición y la energía libre para un plasma con el fin de obtener la ecuación de Saha para un plasma no ideal, también denominada, ecuación de Saha generalizada.

Teniendo en cuenta (2.45), y la descomposición de la energía dada por (2.79), se tiene

$$Z = \sum_{\{J\}} e^{-\beta E} = \sum_{\{J_{CM}, J_{INT}, J_e\}} e^{-\beta (E_{CM}^0 + \Delta E_{CM} + E_{INT}^0 + \Delta E_{INT} + E_e^0 + \Delta E_e)} \quad (2.89)$$

Por otro lado la descomposición de los estados dada por (2.58), permite escribir la ecuación anterior como

$$Z = \sum_{\{J_{CM}\}} e^{-\beta (E_{CM}^0 + \Delta E_{CM})} \sum_{\{J_{INT}\}} e^{-\beta (E_{INT}^0 + \Delta E_{INT})} \sum_{\{J_e\}} e^{-\beta (E_e^0 + \Delta E_e)} \quad (2.90)$$

Teniendo en cuenta que para el centro de masa y los electrones libres la energía aislada corresponde únicamente a la energía cinética (coordenadas de momentos) y los términos de interacción  $\Delta E_{CM}$ ,  $\Delta E_{INT}$  y  $\Delta E_e$ , corresponden a interacciones electrostáticas (coordenadas de posición), se pueden separar las sumatorias de la ecuación anterior en una para los estados del momento lineal y otra para los estados de las posiciones, pudiéndose escribir la ecuación anterior como

$$Z = \sum_{\{J_{CM}\}} e^{-\beta E_{CM}^0} \sum_{\{J_{CM}\}} e^{-\beta \Delta E_{CM}} \sum_{\{J_{INT}\}} e^{-\beta (E_{INT}^0 + \Delta E_{INT})} \sum_{\{J_e\}} e^{-\beta E_e^0} \sum_{\{J_e\}} e^{-\beta \Delta E_e} \quad (2.91)$$

y definiendo  $\Delta Z = \Delta Z_{CM} \Delta Z_e$ , con

$$\Delta Z_{CM} = \sum_{\{J_{CM}\}} e^{-\beta \Delta E_{CM}} \quad \Delta Z_e = \sum_{\{J_e\}} e^{-\beta \Delta E_e} \quad (2.92)$$

se tiene

$$Z = \Delta Z \sum_{\{J_{CM}\}} e^{-\beta E_{CM}^0} \sum_{\{J_{INT}\}} e^{-\beta (E_{INT}^0 + \Delta E_{INT})} \sum_{\{J_e\}} e^{-\beta E_e^0} \quad (2.93)$$

Ahora tendremos en cuenta la descomposición que admiten tanto las energías ((2.79) y (2.81)) como las sumatorias de la ecuación anterior, con lo que

$$Z = \Delta Z \sum_{\{J_{CM,1,1}\}} \dots \sum_{\{J_{CM,N_1,1}\}} \dots \sum_{\{J_{CM,1,Z}\}} \dots \sum_{\{J_{CM,N_Z,Z}\}} e^{-\beta \left( \sum_{l=1}^Z \sum_{i=1}^{N_l} E_{CM,i,l}^0 \right)} \times$$

$$\sum_{\{J_{INT,1,1}\}} \dots \sum_{\{J_{INT,N_1,1}\}} \dots \sum_{\{J_{INT,1,Z}\}} \dots \sum_{\{J_{INT,N_Z,Z}\}} e^{-\beta \left( \sum_{l=1}^Z \sum_{i=1}^{N_l} (E_{INT,i,l}^0 + \Delta E_{INT,i,l}) \right)} \times (2.94)$$

$$\sum_{\{J_e,1\}} \dots \sum_{\{J_e,N_e\}} e^{-\beta \sum_{q=1}^{N_e} E_{e,q}^0}$$

que también se puede escribir como

$$Z = \Delta Z \prod_{l=1}^Z \prod_{i=1}^{N_l} \sum_{\{J_{CM,i,l}\}} \sum_{\{J_{INT,i,l}\}} e^{-\beta E_{CM,i,l}^0} e^{-\beta (E_{INT,i,l}^0 + \Delta E_{INT,i,l})} \prod_{q=1}^{N_e} \sum_{\{J_{e,q}\}} e^{-\beta E_{e,q}^0} \quad (2.95)$$

Si consideramos que los estados accesibles a todos los iones de una misma especie iónica son los mismos, que la de todos los electrones libres también, la ecuación anterior queda como

$$Z = \Delta Z \prod_{l=1}^Z \left( \sum_{\{J_{CM,i,l}\}} e^{-\beta E_{CM,i,l}^0} \right)^{N_l} \left( \sum_{\{J_{INT,i,l}\}} e^{-\beta (E_{INT,i,l}^0 + \Delta E_{INT,i,l})} \right)^{N_l} \left( \sum_{\{J_{e,l}\}} e^{-\beta E_{e,l}^0} \right)^{N_e} \quad (2.96)$$

Denominando al primer término función de partición monoparticular del centro de masa de los iones en el estado de ionización  $l$ ,  $Z_{CM,l}$ , al segundo función de partición monoparticular interna de los iones en el estado de ionización  $l$ ,  $Z_{INT,l}$ , y al último función de partición monoparticular de los electrones libres,  $Z_e$ , la función de partición se puede expresar como

$$Z = \Delta Z \prod_{l=1}^Z (Z_{CM,l})^{N_l} (Z_{INT,l})^{N_l} (Z_e)^{N_e} \quad (2.97)$$

En la ecuación anterior hay que tener en cuenta que existen diferentes formas de distribuir un conjunto de partículas idénticas (iones con igual ionización o electrones libres) sobre los posibles estados accesibles, dando lugar a un mismo estado total, y por tanto, a una misma energía total para el plasma. Por tanto, en la expresión anterior se están contabilizando términos de más. Si el número de estados accesibles a una partícula es  $N_{est}$ , y  $n_{J_l}$  es el número de partículas en el estado monoparticular  $J_l$ , que verifica  $\sum_{\{J_l\}} n_{J_l} = N$ , entonces el número de formas de distribuir las  $N$

partículas dando lugar al mismo estado es



$$\frac{N!}{\prod_{\{J_l\}} n_{J_l}!} \quad (2.98)$$

Por tanto, este problema lo podemos resolver introduciendo el inverso del factor combinatorial anterior, de modo que la función de partición la podemos expresar como

$$Z = \Delta Z \frac{1}{N_l!} \prod_{\{J_l\}} n_{J_l}! \prod_{l=1}^Z (Z_{CM,l})^{N_l} (Z_{INT,l})^{N_l} \frac{1}{N_e!} \prod_{\{J_{e,l}\}} n_{J_{e,l}}! (Z_e)^{N_e} \quad (2.99)$$

Si se considera que el plasma está a alta temperatura entonces será poco probable que se encuentren dos partículas en un mismo estado, por lo que la ocupación de un estado será 1 o 0 ( $n_{J_l} = 1, 0$ ) y entonces  $n_{J_l}! = 1$  para todo estado accesible a las partículas. Con esta consideración, podemos expresar la función de partición como

$$Z = \Delta Z \frac{1}{N_l!} \prod_{l=1}^Z (Z_{CM,l})^{N_l} (Z_{INT,l})^{N_l} \frac{1}{N_e!} (Z_e)^{N_e} \quad (2.100)$$

Ahora tendremos en cuenta que la forma de los hamiltonianos del centro de masa de los iones y el de los electrones libres corresponden al del caso ideal, ya que los efectos de no idealidad del plasma están contemplados en el término  $\Delta Z$ . Teniendo en cuenta la función de partición de un plasma ideal (Balescu, 1974), podemos escribir para el centro de masa de iones y electrones libres

$$Z_{CM,l}^o = V \Lambda_l^3(T) \quad Z_e^o = V \Lambda_e^3(T) \quad (2.101)$$

siendo  $\Lambda_l(T)$  y  $\Lambda_e(T)$  las longitudes de onda térmica de iones y electrones libres respectivamente, dadas por

$$\Lambda_l(T) = \left( 2\pi m_{l,i} kT / h^2 \right)^{1/2} \quad \Lambda_e(T) = \left( 2\pi m_e kT / h^2 \right)^{1/2} \quad (2.102)$$

Finalmente, la función de partición canónica para un plasma no ideal de iones y electrones libres se puede escribir como

$$Z = \Delta Z \frac{1}{N_e!} V^{N_e} \Lambda_e^{3N_e} \prod_{l=1}^Z \frac{1}{N_l!} V^{N_l} \Lambda_l^{3N_l} (Z_{INT,l})^{N_l} \quad (2.103)$$

Para un plasma ideal se obtiene la función de partición canónica  $Z^o$  sin más que hacer cero en la ecuación anterior los términos  $\Delta E_{CM,l}$ ,  $\Delta E_e$  y  $\Delta E_{INT,l}$ , con lo que  $\Delta Z = 1$  y  $Z_{INT,l}$  coincide con la función de partición interna de un plasma ideal, que denotamos por  $Z_{I,INT,l}^o$ . Entonces, para un plasma ideal

$$Z^o = \frac{1}{N_e!} V^{N_e} \Lambda_e^{3N_e} \prod_{l=1}^Z \frac{1}{N_l!} V^{N_l} \Lambda_l^{3N_l} (Z_{INT,l}^o)^{N_l} \quad (2.104)$$

La energía libre viene dada por la ecuación (2.46), y para un plasma no ideal queda, a partir de (2.103),

$$F = -N_e kT \left[ 1 + \ln \frac{V}{N_e} + \ln \Lambda_e^3 \right] - \sum_{l=1}^Z N_l kT \left[ 1 + \ln \frac{V}{N_l} + \ln \Lambda_l^3 + \ln Z_{INT,l} \right] + \Delta F \quad (2.105)$$

siendo  $\Delta F = -kT \ln \Delta Z$ , y donde se ha utilizado la aproximación de Stirling  $\ln N! \approx N(\ln N - 1)$ . El término no ideal en la energía libre tiene en general la dependencia  $\Delta F = \Delta F(T, V, \{N_l\}, N_e)$ . A una temperatura y volumen dados, para determinar la energía libre del plasma se necesita conocer el número de electrones libres que hay en el plasma, el de cada una de las especies iónicas y las energías de los iones en los diferentes estados iónicos (tanto en el estado fundamental como en los estados excitados). Para determinar  $N_e$  y los  $N_l$  se emplea el método de minimización de la energía libre (Hummer, D.G. y Mihalas, D. 1988), que se basa en minimizar la energía libre atendiendo a las siguientes reglas estequiométricas

$$\frac{\partial F}{\partial N_l} - \frac{\partial F}{\partial N_{l+1}} - \frac{\partial F}{\partial N_e} = 0 \quad (2.106)$$

Realizando las operaciones oportunas se llega a la siguiente relación entre el número de iones por unidad de volumen en el estado de ionización  $l$  y el  $l+1$

$$\frac{n_{l+1}n_e}{n_l} = \frac{\Lambda_{l+1}^3 \Lambda_{ef}^3}{\Lambda_l^3} \frac{\tilde{Z}_{INT,l+1}}{\tilde{Z}_{INT,l}} e^{-\beta(\tilde{E}_{INT,l+1} - \tilde{E}_{INT,l})} e^{-\beta\Delta E_{l,l+1}} \quad (2.107)$$

denominada por algunos autores ecuación de Saha generalizada, donde las cantidades  $n_l$ ,  $n_{l+1}$  y  $n_e$  son las correspondientes densidades de partículas,  $\tilde{E}_{INT,l}$  y  $\tilde{E}_{INT,l+1}$  son respectivamente las energías de los iones con ionización  $l$  y  $l+1$  en el estado fundamental,  $\tilde{Z}$  son las funciones de partición a las que se les ha extraído la exponencial correspondiente al estado fundamental ( $Z = \tilde{Z}e^{-\beta\tilde{E}_{INT}}$ ), y por último

$$\Delta E_{l,l+1} = \frac{\partial \Delta F}{\partial N_l} - \frac{\partial \Delta F}{\partial N_{l+1}} - \frac{\partial \Delta F}{\partial N_e} \quad (2.108)$$

Con el objeto de apreciar mejor los efectos de la no idealidad del plasma, utilizamos la ecuación (2.81), con lo que podemos escribir

$$\frac{n_{l+1}n_e}{n_l} = \frac{\Lambda_{l+1}^3 \Lambda_f^3}{\Lambda_l^3} \frac{\tilde{Z}_{INT,l+1}}{\tilde{Z}_{INT,l}} e^{-\beta\tilde{E}_{INT,l+1,l}^o} e^{-\beta\Delta\tilde{E}_{INT,l+1,l}} e^{-\beta\Delta E_{l,l+1}} \quad (2.109)$$

donde  $\tilde{E}_{INT,l+1,l}^o = \tilde{E}_{INT,l+1}^o - \tilde{E}_{INT,l}^o$ , cantidad denominada potencial de ionización, y

$$\Delta\tilde{E}_{INT,l+1,l} = \Delta\tilde{E}_{INT,l+1} - \Delta\tilde{E}_{INT,l}$$

La ecuación de Saha, se puede obtener de (2.109) sin más que eliminar las dos últimas exponenciales y escribir las funciones de partición internas correspondientes a plasmas ideales, con lo que

$$\frac{n_{l+1}n_e}{n_l} = \frac{\Lambda_{l+1}^3 \Lambda_{ef}^3}{\Lambda_{l,l}^3} \frac{\tilde{Z}_{INT,l+1}^0}{\tilde{Z}_{INT,l}^0} e^{-\beta \tilde{E}_{INT,l+1,l}^0} \quad (2.110)$$

Podemos destacar tres diferencias entre la (2.109) correspondiente a un plasma no ideal y (2.110) correspondiente a un plasma ideal. Hay una corrección a la energía interna del estado fundamental de los iones,  $\Delta \tilde{E}_{INT,l}^0$ , una corrección a la energía del movimiento del centro de masa de los iones y a la energía del movimiento de los electrones libres,  $\Delta E_{l,l+1}$ , que se puede interpretar también como una corrección al potencial de ionización, y por último, hay una corrección en la evaluación de la función de partición interna ya que en lugar de resolver el hamiltoniano (2.63) se resuelve en el caso no ideal (2.88). Éste último contempla los efectos de no idealidad en los grados de libertad internos de los iones, a través del potencial  $\Delta U_{j,i,l}$ .

Es muy importante destacar que un plasma ideal no tiene una función de partición interna bien definida. Esto se debe a que el potencial aislado  $U_{j,n_e-1,l}^0$  proporciona un número infinito de niveles monoeléctricos ligados con lo que se pueden construir un número infinito de estados ligados para un ion multielectrónico, y entonces, la función de partición de los iones es una suma infinita. Por tanto, se produce una divergencia de la función de partición interna a consecuencia de la degeneración de los estados de los iones. La función de partición interna se puede escribir como

$$\hat{Z}_{INT,l} = \sum_s g_{l,s} e^{-\beta E_{INT,l,s}} \quad (2.111)$$

donde ahora la suma se extiende a los estados de los grados de libertad internos con energía distinta y  $g_{l,s}$  es la degeneración del estado. Para el caso de un átomo de hidrógeno, donde no hay que distinguir los estados de ionización, la degeneración de un estado con número cuántico principal  $n$  viene dada por  $g_n = 2n^2$  ( $s=n$ ). Para el

caso de un ion multielectrónico en un estado  $s$  cuya configuración monoeléctronica es  $\{1s^{w_1}, \dots, n_k l_k j_k^{w_k}\}$  donde  $w_k$  es el número de ocupación del orbital  $k$ -ésimo, la degeneración  $g_s$  de este estado viene dada por (Slater, 1956)

$$g_s = \prod_k g_{s,k} \quad ; \quad g_{s,k} = \frac{(2j_k + 1)}{w_k (2j_k + 1 - w_k)} \quad (2.112)$$

donde  $k$  recorre todos los orbitales monoeléctronicos que constituyen la configuración,  $w_k$  es el número de ocupación del orbital y  $j_k$  es el correspondiente momento angular total. Entonces no estaría ni definida la energía libre ni ninguna propiedad termodinámica, y tampoco se podrían determinar las abundancias de los distintos estados de ionización. Este problema ha sido tratado por numerosos autores, resolviéndose de diferentes formas. Hay razones físicas para pensar que para un ion no aislado, los niveles excitados se ven perturbados respecto de los aislados, y como consecuencia, pueden desaparecer o tener poca probabilidad de estar ocupados. La idea es que las funciones de onda de los estados excitados correspondientes a dos iones distintos se solapan, produciendo la desaparición o una baja probabilidad de ocupación de dichos estados. A este mecanismo por el cual desaparecen niveles y que es exclusivo de átomos no aislados, se le denomina presión de ionización, y puede evitar la divergencia de la función de partición. La presión de ionización es considerada uno de los mecanismos más importantes en la física atómica de iones en plasmas.

La presión de ionización se puede introducir en los modelos atómicos mediante diferentes aproximaciones. Una opción es construir un potencial monoeléctronico  $\Delta U_{j,i,l}$  que produzca un desplazamiento de las energías de nivel hacia los valores positivos (es decir, una bajada del continuo o *continuum lowering*), y que haga que el número de niveles ligados monoeléctronicos sea finito y como

consecuencia, el número de estados del ion. Entonces la función de partición deja de ser una suma infinita con lo que se evita la divergencia. En la sección 2.3. veremos algunos ejemplos de estos potenciales, ahora nos interesa destacar que este procedimiento si bien introduce la corrección en la energía interna y evita la divergencia, introduce nuevos problemas como son la discontinuidad de algunas magnitudes termodinámicas (Rogers, 1971, Rogers) y la inconsistencia termodinámica (Sweeney, 1978). Este último problema se refiere a que algunos modelos de energía libre violan la identidad termodinámica de Maxwell dada por

$$\left(\frac{\partial s}{\partial P}\right)_T = -\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_P = \frac{1}{\rho^2} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right) \quad (2.113)$$

Otra opción es eliminar la divergencia e introducir la presión de ionización mediante el formalismo de las probabilidades de ocupación. Este formalismo consiste en dar una cierta probabilidad de ocupación a los niveles monoeléctricos y como consecuencia a una configuración de un ion multielectrico. Desde un punto de vista termodinámico, los fundamentos de este formalismo están basados en considerar un término no ideal en la energía libre que dependa explícitamente de los números de ocupación del estado  $s$  del ion con estado de ionización  $l$ , que denotaremos por  $N_{l,s}$  y cumplen  $\sum_s N_{l,s} = N_l$ .

Para un plasma ideal o un plasma no ideal pero en el que el término  $\Delta F$  de la energía libre no depende de los números de ocupación, estos números se pueden determinar a partir de la ecuación de Saha-Boltzmann, dada por

$$\frac{N_{l,s}}{N_l} = \frac{e^{-\beta E_{INT,l,s}}}{Z_{INT,l}} \quad (2.114)$$

donde  $E_{INT,s}$  es la energía interna del estado  $s$  de un ion con una ionización  $l$ . Esta ecuación se obtiene expresando la energía libre en función de los números de ocupación e imponiendo

$$\frac{\partial F}{\partial N_{l,s}} - \frac{\partial F}{\partial N_{l,r}} = 0 \quad (2.115)$$

Cabe destacar que al expresar la energía libre en función de los números de ocupación, desaparece la función de partición interna, y esta se recupera al imponer la condición anterior. Se puede demostrar (Hummer y Mihalas, 1988) que en el caso en el que la energía libre de un plasma no ideal contenga un término no ideal que dependa explícitamente de los números de ocupación  $N_{l,s}$ , la función de partición interna definida hasta ahora dada por (2.111) no es compatible con la que se obtendría a partir de la condición (2.115). Se puede demostrar para el caso en el que exista un término no ideal de la forma  $\Delta f = \Delta f(T, V, \{N_{l,l,s}\})$ , que la expresión correcta de la energía libre es

$$F = -N_e kT \left[ I + \ln \frac{V}{N_e} + \ln \Lambda_e^3 \right] - \sum_{l=1}^Z N_l kT \left[ I + \ln \frac{V}{N_l} + \ln \Lambda_l^3 + \ln \hat{Z}_{INT,l} \right] + \Delta F + \Delta f - \sum_{l,s} N_{l,s} \frac{\partial \Delta f}{\partial N_{l,s}} \quad (2.116)$$

donde ahora la función de partición interna correcta viene dada por

$$\hat{Z}_{INT,l} = \sum_s g_{l,s} \pi_{l,s} e^{-\beta E_{INT,l,s}} \quad ; \quad \pi_{l,s} = e^{-\beta \partial \Delta f / \partial N_{l,s}} \quad (2.117)$$

donde  $\pi_{l,s}$  recibe el nombre de probabilidad de ocupación del estado  $s$  accesible a un ion con estado de ionización  $l$ . Además la ecuación de Saha-Boltzmann queda en este caso como

$$\frac{N_{l,s}}{N_l} = \pi_{l,s} \frac{e^{-\beta E_{INT,l,s}}}{Z_{INT,l}} \quad (2.118)$$

Como vemos en la ecuación anterior los números de ocupación, debidos a un término de energía libre no ideal dependiente explícitamente de los números de ocupación, afectan a la determinación de los propios números de ocupación. Pero además, este formalismo da la oportunidad de construir unos números de ocupación que tengan un comportamiento tal que el producto  $g_{l,s} \pi_{l,s}$  sea convergente, y por tanto evitar la divergencia de la función de partición interna.

Las probabilidades de ocupación se pueden construir considerando los efectos de las partículas neutras del plasma (Fermi, 1924; Lebowitz, Helfand y Praestgaard, 1965), considerando perturbaciones del campo electromagnético alrededor de los iones (Unsöld, 1948), colisiones entre el ion y otras partículas del plasma o a través de expresiones fenomenológicas (Busquet, 1990).

## 2.4.- Interacción entre iones. Distancias características en plasmas.

En el apartado anterior se construyó la función de partición canónica y la energía libre para un plasma ideal y no ideal. Se habló en detalle de los términos de energía interna de los iones del plasma, de la energía cinética de los electrones libres así como de la energía cinética de las coordenadas del centro de masa de los iones. La energía de interacción del centro de masa de los iones (o interacción entre iones) y la de los electrones libres, representadas por el término  $\Delta Z$ , no fue tratada explícitamente. En este apartado caracterizaremos a los plasmas a partir de unas distancias características, y de cómo sea de intensa la interacción entre iones (More, 1986).



Para electrones con energías térmicas del orden de  $kT$ , una estimación de la separación mínima entre iones de carga  $Q$ ,  $R_L$ , está dada por

$$R_L = \frac{Q^2 e^2}{kT} \quad (2.119)$$

distancia que se denomina longitud de Landau. Para plasmas a baja densidad se tiene que esta longitud es mucho mayor que el radio del core de los iones,  $R_i$ , es decir

$$R_L \gg R_i \quad (2.120)$$

Este resultado indica que los cores de los iones están separados cuando dos iones se encuentran lo más cerca posible y permite considerar que la interacción coulombiana es una buena aproximación para representar la interacción entre iones a baja densidad, es decir,  $U(R_{12}) = Q_1 Q_2 e^2 / R_{12}$ , donde  $Q_1$  y  $Q_2$  son las cargas de los iones 1 y 2 respectivamente, y  $R_{12}$  es la distancia de separación de sus centros de masa.

Otra longitud característica es la longitud o el radio del ion esfera definido por

$$R_0 = \left( \frac{3}{4\pi n_i} \right)^{1/3} \quad (2.121)$$

siendo  $n_i$  la densidad de iones. Representa el radio de la esfera en la que la carga de un ion se ve neutralizada por la carga de los electrones libres que lo rodean.

Por último se tiene la longitud o radio de Debye (para iones), definido por

$$D_i = \left( \frac{kT_i}{4\pi Q^2 e^2 n_i} \right)^{1/2} \quad (2.122)$$

donde nuevamente  $n_i$  es la densidad de iones y  $T_i$  es la correspondiente temperatura.

Para plasmas a baja densidad se cumple la siguiente desigualdad entre estas tres longitudes

$$R_L \ll R_0 \ll D_i \quad (2.123)$$

Cuando esta desigualdad se cumple, hay muchos iones en una esfera de radio  $D_i$  y las correlaciones entre iones están descritas por la teoría de Debye-Hückel. En esta teoría, una carga puntual estática es apantallada dentro de la longitud  $D$  dada por

$$\frac{1}{D^2} = \frac{1}{D_i^2} + \frac{1}{D_e^2} = \frac{4\pi Q^2 e^2 n_i}{kT_i} + \frac{4\pi Q^2 e^2 n_e}{kT_e} \quad (2.124)$$

El primer término corresponde al apantallamiento causado por los iones y el segundo al causado por los electrones libres, siendo  $T_e$  la temperatura de éstos.

Ahora retomamos la parte de la función de partición correspondiente a la interacción entre iones y electrones libres,  $\Delta Z$ , donde sólo consideraremos la interacción entre iones, es decir el término  $\Delta Z_{CM}$ . Si escribimos esta función de partición en el contexto de la mecánica estadística clásica, se tiene

$$\begin{aligned} \Delta Z_{CM} &= \int d^3 R_1 \int d^3 R_2 \dots \int d^3 R_N e^{-\sum_{i,j} \frac{Q^2 e^2}{|\bar{R}_i - \bar{R}_j| kT}} = \\ &= R_0^{3N} \int d^3 x_1 \int d^3 x_2 \dots \int d^3 x_N e^{-\Gamma \sum_{i,j} \frac{1}{|\bar{x}_i - \bar{x}_j|}} \end{aligned} \quad (2.125)$$

que habitualmente se denomina función de partición configuracional para iones. En la segunda forma se ha hecho el siguiente cambio:  $\bar{x}_i = \bar{R}_i / R_0$ . Se sigue de la expresión anterior que la función de partición configuracional depende esencialmente del denominado parámetro de acoplamiento  $\Gamma$ , definido como

$$\Gamma = \frac{Q^2 e^2}{R_0 kT} \left( = \frac{R_L}{R_0} = \frac{R_0^2}{D_i^2} \right) \quad (2.126)$$

Este parámetro describe la longitud de correlación de iones y controla la validez de diferentes aproximaciones teóricas. Para acoplamiento débil ( $\Gamma \ll 1$ ), se cumple la desigualdad dada en (2.123), y la teoría de Debye-Hückel es buena aproximación. En este caso la energía coulombiana promediada por ion es

$$E_{coulomb} = -\frac{1}{2} \frac{Q^2 e^2}{D_i} = -\frac{\sqrt{3}}{2} \Gamma^{3/2} kT \quad (2.127)$$

En el caso de acoplamiento débil esta energía es mucho menor que la energía térmica media ( $\sim kT$ ), así que las fuerzas coulombianas son débiles perturbaciones; esto también lleva a que muchos iones estén apantallando la carga test.

Para acoplamiento fuerte ( $\Gamma \geq 0.5$ ) uno se encuentra con un problema no trivial de un sistema de muchos cuerpos interactuando. En este caso el apantallamiento alrededor de cada ion involucra un número bajo de partículas, así que este plasma se podría estudiar por simulación por ordenador utilizando unos pocos cientos de partículas (iones y electrones libres), proporcionando unos resultados razonablemente buenos. (Hansen, 1973 y Baus y Hansen, 1980). La simulación por el método de Monte Carlo (MC) examina muchas configuraciones y da un peso estadístico a cada una a través de un factor de Boltzmann que corresponde a la energía total de interacción del ion (Hockney y Eastwood, 1981). La dinámica molecular (MD) simplemente simula la solución de las ecuaciones clásicas del movimiento para generar hipótesis temporales de la dinámica de los iones; Las cantidades físicas se calculan a través de promedios temporales.

Para  $\Gamma > 1$ , el modelo del ion esfera no es una mala aproximación: cada ion está rodeado por una cavidad en la que sólo hay electrones libres. El radio de esta cavidad es del orden de  $R_0$ ; simulaciones numéricas muestran que el ion más cercano está a una distancia aproximadamente igual  $1.7R_0$ . La energía por partícula es aproximadamente

$$E_{coulomb} \approx -\frac{9}{10} \frac{Q^2 e^2}{R_0} = -\frac{9}{10} \Gamma kT \quad (2.128)$$

que corresponde a la interacción electrostática de un ion puntual con un gas uniforme de electrones que neutralizan la carga del ion en el volumen del ion esfera. Simulaciones realizadas con el método MC proporcionan valores más aproximados para esta energía coulombiana. Una característica interesante del acoplamiento fuerte, es que deja de cumplirse la relación (2.123). La distancia  $R_L$ , definida originalmente como la distancia de máximo acercamiento (o distancia mínima de separación), es ahora mayor que la separación media entre iones  $R_0$ . Se tiene para acoplamiento fuerte

$$\frac{R_L}{R_0} = \Gamma > 1 \Rightarrow R_L > R_0 \quad (2.129)$$

En estas condiciones las longitudes  $R_L$  y  $D_i$  carecen de sentido, y la distancia  $R_0$  hace el papel de distancia de máxima aproximación, distancia de separación media entre iones y longitud de apantallamiento.

Una vez caracterizado el plasma en función de las longitudes características  $R_L$ ,  $R_0$  y  $D$ , retomamos en este punto el problema de la presión de ionización. A altas densidades, la presión de ionización ocurre cuando dos cores se encuentran juntos; entonces los estados ligados más externos se convierten en ondas que se propagan, es decir, pasan al continuo. A estas densidades los átomos están formando ciertas estructuras, y las ideas del estado sólido se pueden utilizar (More, 1982, 1984).

A bajas densidades la presión destruye estados ligados excitados que están ocupados ocasionalmente. En este caso los átomos están separados los unos de los otros de forma aleatoria, y las fluctuaciones locales juegan un papel importante. A baja densidad el precursor de la presión de ionización se puede ver en las interacciones de los estados Rydberg o estados ligados muy excitados.

Se necesita una estimación sencilla de la densidad o temperatura a la cual un nivel dado ligado desaparece por la presión de ionización, pero uno encuentra en la literatura estimaciones muy distintas. A continuación resumiremos los puntos de vista más populares:

1.- Modelo de ion esfera. Un nivel ligado desaparece como tal cuando

$$r_n \geq \frac{1}{3} R_0 \quad (2.130)$$

siendo  $r_n$  es el radio de la órbita y  $R_0$  es el radio del ion esfera. Esta expresión está justificada a partir del solapamiento entre funciones de onda de iones adyacentes, y se obtiene comparando la energía de ligadura y el *continuum lowering*; se corresponde con la densidad a la cual la atracción nuclear sobre los electrones es superada por el campo eléctrico de un ion vecino.

2.- Modelo de Debye-Hückel. Establece que un nivel ligado desaparece cuando

$$r_n \geq D \quad (2.131)$$

Este criterio predice muchos más estados ligados que los que predice la ecuación (2.130), y está derivado de las propiedades del potencial de Debye para estados ligados.

3.- Modelo de energía de Fermi. En este caso se tiene

$$E_n \geq E_F \quad (2.132)$$

donde  $E_n$  es la energía del nivel y  $E_F$  es la energía de Fermi. Este criterio debe ser aplicado a plasmas degenerados, de lo contrario da lugar a un número enorme de estados ligados.

4.- Método de Planck-Larkin. Esta fórmula descarta los estado ligados que cumplen

$$|E_n| < kT \quad (2.133)$$

Para plasmas a alta densidad proporciona valores similares a los del modelo Thomas-Fermi.

5.- Método de la longitud de Landau. En este caso los niveles tales que

$$r_n \geq R_L \quad (2.134)$$

dejarían de ser estados ligados.

6.- Método de Inglis –Teller. Para números cuánticos lo suficientemente largos el efecto Stark causa un solapamiento entre niveles adyacentes, y esto hace que no contribuyan al espectro de emisión o absorción. Esto ocurre para un número cuántico principal  $n$  tal que

$$E_{n+1} - E_n \approx r_n \left( \frac{Qe^2}{R_o^2} \right) \quad o \quad r_n \approx \frac{R_o}{\sqrt{n}} \quad (2.135)$$

Hasta el momento no hay evidencia experimental de qué modelo es el más adecuado. Parece que hay muchos argumentos a favor del criterio del radio del ion esfera, que resumimos a continuación:

- a) Para plasmas fuertemente acoplados ( $\Gamma > 1$ ) el modelo del ion esfera es necesario para conocer la correlación entre iones; en esta situación la longitud de Debye no tiene significado físico. En cálculos autoconsistentes de celda esférica, los estados ligados alcanzan una energía cero y se convierten en resonancias a determinadas densidades, que viene dadas aproximadamente por la ecuación (2.130) (More, 1984).
- b) Para densidades bajas ( $\Gamma < 1$ ) la cuestión es si existen estados ligados con un radio orbital tal que  $R_o < r_n < D$ , es decir, un radio orbital que encierra muchos iones. De acuerdo con el modelo de Debye, los electrones en tales estados experimentan un potencial débil con simetría esférica que representa un promedio del potencial real en el plasma. Sin embargo las fluctuaciones a partir de este promedio son muy fuertes

(para los estados excitados); los iones vecinos dan lugar a potenciales del orden de  $0.8Qe/R_0$ , el cual excede del potencial de Debye para distancias  $r \gg R_0$ . En particular, el recorrido libre medio para la colisión proporcionado por este potencial es menor que la longitud de la órbita de un hipotético estado ligado con  $R_0 < r_n < D$ ; por tanto, es difícil de entender que exista un estado ligado bajo estas circunstancias.

## 2.5.- Potenciales efectivos para átomos inmersos en plasmas.

En este apartado mostraremos algunos métodos para la construcción del potencial efectivo monoeléctrico del hamiltoniano de un ion no aislado dado por (2.88), dando especial importancia a los que proporcionan expresiones analíticas para dichos potenciales. La mayoría de los métodos para obtener el potencial efectivo se basan en la aproximación de partícula independiente en un campo medio central.

Hasta el momento no hemos hablado de la posible dependencia temporal que puede tener el potencial efectivo. En general, este tiene una dependencia  $U_{ef} = U_{ef}(r, t)$  que se puede poner como (Murillo, 1995)

$$U_{ef}(r, t) = U_{ef}(r) + \delta U_{ef}(r, t) \quad (2.136)$$

siendo  $U_{ef}(r) = \langle U_{ef}(r, t) \rangle$ , donde  $\langle \rangle$  es un promedio temporal, y  $\delta U_{ef}(r, t) = U_{ef}(r, t) - \langle U_{ef}(r, t) \rangle$ . Si  $\delta U_{ef}(r, t)$  se puede tratar como una perturbación al ion aislado, el efecto del potencial efectivo sobre el ion lleva consigo un desplazamiento de los niveles de energía debido al término estacionario  $U_{ef}(r)$  y un ensanchamiento de línea debido a  $\delta U_{ef}(r, t)$ . Nosotros estamos interesados en estudiar la parte del potencial efectivo independiente del tiempo que da lugar a los estados internos estacionarios de un ion inmerso en un plasma. Para el caso del

estudio de procesos colisionales, el término dependiente del tiempo puede ser importante.

En el apartado anterior distinguimos para estudiar un plasma la descripción física y la química. Dentro de la descripción química podemos hacer una clasificación de los modelos de potencial efectivo dependiendo del nivel de descripción respecto de los tipos de iones presentes en el plasma. La denominada descripción de átomo o configuración detallada, que consiste en considerar el plasma formado por iones en los diferentes estados de ionización y cada ion formado por unas configuraciones monoeléctricas del tipo  $\{1s^{w_1}, \dots, n_k l_k j_k^{w_k}\}$  con números de ocupación  $w_k$  enteros (que es la formulación vista en el apartado anterior), y por tanto es necesario un potencial efectivo para cada configuración. O la denominada descripción de átomo o configuración media que consiste en considerar el plasma formado por iones ficticios todos en un único estado de ionización fraccionario y por tanto con números de ocupación de los niveles monoeléctricos ( $w_1, \dots$ ) fraccionarios, por lo que se trata de una configuración monoeléctrica media. En esta descripción se construye un único potencial efectivo para este ion ficticio y para su configuración media, potencial que recibe el nombre de potencial efectivo de átomo medio. En general, para determinar las propiedades termodinámicas de un plasma en equilibrio es más conveniente la descripción o modelo de átomo detallado. Para el caso del estudio de procesos atómicos, tanto radiativos como colisionales, habrá que tener en cuenta los tiempos característicos del proceso para ver que descripción es más adecuada. Si el electrón sufre un proceso que tiene un tiempo de duración característico durante el cual el ion al que pertenece no sufre ningún proceso que modifique su configuración, entonces el modelo de átomo detallado es el adecuado. Si por el contrario, en el tiempo que tiene lugar el proceso, el ion sufre un gran número de procesos que modifica su configuración, entonces es más adecuado el modelo de átomo medio.



Otra característica que permite clasificar los diferentes modelos de potencial efectivo es si la distribución de carga, ya sea la de los electrones ligados o libres, está acotada en el espacio a través de alguna condición de contorno. En el caso de un ion aislado a las funciones de onda de los niveles monoeléctricos se les exige condiciones de contorno en el origen y en el infinito, de modo que hablamos de ion no acotado o extendido. En el caso de iones inmersos en un plasma, algunos modelos conservan estas condiciones de contornos y otros imponen que a partir de un cierto radio característico, la función de onda genere una distribución de probabilidad nula o prácticamente nula independientemente del nivel. Lo mismo ocurre con los electrones libres, en algunos casos se exige que un determinado número de electrones libres permanezca en el interior de una esfera de radio característico. A este tipo de potenciales se les denomina acotados o confinados. Habitualmente a estos modelos se les denomina modelos de ion esfera, y el radio característico radio del ion esfera,  $R_o$ . Generalmente este radio se elige de manera que en el interior de la esfera de radio  $R_o$ , la carga del plasma sea nula, es decir, el número de electrones ligados más el de electrones libres sea igual a la carga nuclear del ion.

### **2.5.1.- Potenciales efectivos no aislados autoconsistentes.**

#### **2.5.1.1.- Potencial efectivo de átomo o configuración detallada.**

Numerosos métodos de construcción del potencial efectivo se basan en un conjunto de ecuaciones autoconsistentes en el marco de la teoría del funcional de la densidad. Consideremos un ion con carga nuclear  $Z$  y  $N$  electrones ligados. Si consideramos que  $\rho_e$  es la densidad de electrones libres,  $\rho_b$  la de electrones ligados y  $\rho_i$  la densidad de iones, el potencial efectivo está dado a partir de la ecuación de Poisson por la siguiente expresión

$$U_{ef}(r) = \frac{Z}{r} + 4\pi \left[ \frac{1}{r} \int_0^r r^2 (\rho_e(r) + \rho_b(r) + \rho_i(r)) dr + \int_r^\infty (\rho_e(r) + \rho_b(r) + \rho_i(r)) dr \right] \quad (2.137)$$

Este potencial se introduce en la ecuación de Schrödinger (en el caso no relativista, y en la de Dirac en el caso relativista) siguiente

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + U_{ef}(r) - U_{xc}(r) - U_{xc}(\infty) \right] \varphi_{nl}(r) = E_{nl} \varphi_{nl}(r) \quad (2.138)$$

donde  $E_n$  y  $\varphi_{nl}$  son la energía de nivel y la función de onda monoeléctricas y  $U_{xc}$  es el potencial de intercambio y correlación, que es un funcional de la densidad. La densidad de electrones ligados viene dada a partir de las funciones de onda de los electrones ligados

$$\rho_b(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{nl} w_{nl} \varphi_{nl}^2(r) \quad (2.139)$$

donde  $w_{nl}$  es el número de electrones ligados o número de ocupación del nivel monoeléctrico con números cuánticos  $nl$ . Para poder establecer un proceso autoconsistente debemos definir convenientemente una densidad de electrones libres y otra de iones. Las diferencias entre un gran número de modelos se encuentran en como dar estas densidades y en como dar el potencial de intercambio y correlación.

Cauble *et al.* (1984) construyen la densidad de electrones libres a partir de

$$\rho_e(r) = \int_0^\infty W(k) \frac{1}{kr^2} \sum_{l=0}^\infty (2l+1) F_{kl}^2(r) dk \quad (2.140)$$

donde  $W(k)$  es el peso estadístico del nivel  $kl$  y viene dado por la estadística de Fermi-Dirac

$$W(k) = \frac{k^2}{\pi^2} \frac{I}{\left[ 1 + e^{(E_k - \mu)/kT} \right]} \quad (2.141)$$

siendo  $E_k$  la energía cinética dada por  $E_k = k^2/2$ , y  $\mu$  el potencial químico de los electrones libres que queda determinado a partir de la condición

$$\int_0^\infty W(k) dk = \rho_e(\infty) = n_e \quad (2.142)$$

donde  $n_e$  es la densidad media de electrones libres.  $F_{kl}$  son las funciones de ondas de los electrones libres con energía cinética  $E_k$  y momento angular  $l$ , que se obtienen como solución de (2.138) sustituyendo el autovalor  $E_{nl}$  (de energía negativa) por  $k^2$ .

La densidad de los iones presentes en el plasma está dada por

$$\rho_i(r) = \frac{n_e}{Z} e^{-eU_{ef}/kt} \quad (2.143)$$

Por último, utiliza el potencial de intercambio y correlación para electrones libres calculado por Gupta y Rajagopal (1980) y por Dharma-wardana y Taylor (1981) dado por

$$U_{xc} = U_{ex} + U_{corr} \quad (2.144)$$

$$\begin{aligned} U_{ex} &= -0.4073 r_s^{-1} \tanh(\tau^{-1}) \\ U_{corr} &= -0.6109 r_s^{1/2} \left( -0.081 + 1.127\tau^2 + 3.756\tau^4 \right) \cdot \left( 1.0 + 1.291\tau^2 + 3.593\tau^4 \right) \tanh(\tau^{1/2}) \\ \tau &= 2 \left( \frac{4}{9\pi} \right)^{2/3} r_s^2 kT \quad r_s^{-1} = \left( \frac{4}{3} \pi \rho_e \right)^{1/3} \end{aligned}$$

Para resolver la ecuación de Schrödinger impone a largas distancias del origen las condiciones

$$r \rightarrow \infty \quad rU_{ef}(r) \rightarrow 0 \quad \text{y} \quad \varphi_{nl}(r) \rightarrow 0 \quad (2.145)$$

que aseguran la condición de neutralidad del plasma, dada por  $\rho_i = -\rho_e$ .

Las ecuaciones (2.137)-(2.140), (2.143) y (2.144) son resueltas autoconsistentemente. El problema se inicia dando como potencial efectivo el correspondiente al potencial creado por los electrones ligados en situación aislada, que introducido en la ecuación de Schrödinger y resuelta ésta, proporciona los primeros valores de la densidad de electrones libres y de iones, y por tanto un potencial efectivo con efectos de densidad y temperatura con el que calcular las propiedades atómicas. Con el nuevo potencial efectivo se repite el proceso hasta que se alcanza la autoconsistencia.

Teniendo en cuenta que en este modelo se considera que tanto los electrones ligados como los libres no están obligados a estar en una determinada región del espacio (para el caso de los electrones libres esto se pone de manifiesto en los límites de la integral de (2.140), en donde el límite superior es  $\infty$ ), este modelo será un modelo de ion no acotado o extendido.

Salzmann *et al.* (1985) construyen el potencial (2.137) utilizando la ecuación de Dirac

$$\left[ -i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta mc^2 + U_{ef}(r) \right] \psi_{\kappa m} = E \psi_{\kappa m} \quad (2.146)$$

donde  $\alpha$  y  $\beta$  son las matrices de Dirac,  $E$  es la energía (incluyendo la masa en reposo) del nivel monoelectrónico y  $\psi_{\kappa m}$  la función de onda con números cuánticos  $\kappa m$  (con  $\kappa = j \pm 1/2$  siendo  $j$  el momento angular total y  $m$  la tercera componente del momento angular total). La densidad de electrones ligados viene dada por

$$\rho_b(r) = \sum_{\kappa} w_{\kappa} |\psi_{\kappa}|^2 \quad (2.147)$$

con la condición de que la densidad de electrones ligados es despreciable para puntos  $r > R_o$ , siendo  $R_o$  el radio del ion esfera determinado como

$$R_o = \frac{3}{4\pi n_i} \quad (2.148)$$

siendo  $n_i$  la densidad media de iones del plasma. La densidad de electrones libres la construye siguiendo la estadística de Fermi-Dirac dada por

$$\rho_e(r) = \frac{1}{2\pi^2} \left[ \frac{2mkT}{h^3} \right]^{3/2} F_{1/2} \left( \frac{\mu - U_{ef}(r)}{kT} \right) \quad (2.149)$$

siendo

$$F_j = \int_0^{\infty} \frac{y^j}{e^{(y-x)} + 1} dy \quad (2.150)$$

donde el potencial químico  $\mu$  se determina a partir de la siguiente condición

$$\int_0^{R_o} \rho_e(r) dr = Z - N \quad (2.151)$$

Teniendo en cuenta la condición impuesta a la densidad de electrones ligados para distancias mayores que  $R_o$  y la impuesta sobre los electrones libres dada en la ecuación anterior (donde el límite superior de la integral indica que la distribución de electrones libres se encuentra en el interior de una esfera de radio  $R_o$ ), este modelo es un modelo de ion esfera.

En este caso las condiciones a largas distancias sobre el potencial efectivo y las funciones de ondas son

$$r \rightarrow R_0 \quad rU_{ef}(r) \rightarrow 0 \text{ y } \varphi_{nl}(r) \rightarrow 0 \quad (2.152)$$

y además

$$\left. \frac{d(rU_{ef}(r))}{dr} \right|_{r=R_0} = 0 \quad (2.153)$$

Por último, Salzman añade al potencial efectivo un término de intercambio y correlación, que contempla tanto electrones ligados como libres, dado por

$$U_{xc}(r) = -\frac{3}{4\pi} [3\pi^2 (\rho_b(r) + \rho_e(r))]^{1/3} \quad (2.154)$$

En el presente modelo se propone una densidad de iones nula, de modo que los efectos del plasma están representados a través de la interacción del ion con los electrones libres, proposición esta muy común en los modelos de ion esfera. En este caso la condición dada por (2.151) y (2.152) asegura que en el interior del ion esfera la carga neta sea nula.

### 2.5.1.2.- Potencial efectivo de átomo o configuración media.

El esquema planteado anteriormente para los modelos de átomo detallado sigue siendo, en sus aspectos generales, válido para un gran número de modelos de átomos medios o no detallados. La principal diferencia está en que ahora no se fija a priori el número de electrones ligados y libres ni los números de ocupación de los niveles ligados. Por tanto, para un plasma a una densidad y temperatura dadas formado por iones de carga nuclear  $Z$ , el objetivo es determinar el número medio de electrones ligados y libres, los números de ocupación medios de los niveles ligados y el potencial efectivo, que en este caso se le denomina potencial efectivo del átomo medio. Fuera de este esquema queda el método de Thomas-Fermi generalizado para

átomos en plasmas por Feynman, Metrópolis y Teller (1949), o el método de Thomas-Fermi-Dirac generalizado por Cowan y Ashkin (1957), debido fundamentalmente a las diferencias en el tratamiento de los electrones ligados que se hace en estos modelos.

El método más utilizado para resolver este problema consiste en aplicar la estadística de Fermi-Dirac a los números de ocupación de los electrones ligados, con lo que en el caso no relativista se tiene

$$w_{nl} = \frac{g_l}{\left[ 1 + e^{(E_{nl} - \mu)/kT} \right]} \quad (2.155)$$

donde  $g_l$  es la degeneración de un nivel monoeléctrico con momento angular  $l$  y viene dado por  $g_l = 2l + 1$ . Para el caso relativista el número de ocupación viene dado por una expresión similar a la anterior pero con la correspondiente energía relativista del nivel y una degeneración asociada al número cuántico de momento angular total  $j$  dada por  $g_j = 2j + 1$ . En este caso el potencial químico está asociado tanto a los electrones libres como a los ligados y se determina a partir de la condición

$$\int_0^{R_0} 4\pi r^2 (\rho_b(r) + \rho_e(r)) dr = Z \quad (2.156)$$

para modelos del tipo de ion esfera, y para modelos de átomo medio no acotado, se tiene una condición similar a la anterior pero sustituyendo el límite superior por infinito. Una vez determinado el potencial químico y la energía de cada nivel, queda determinada la configuración media del átomo ficticio a través de (2.155).

Existen numerosas variantes a los modelos de átomo detallado y de átomo medio, que consisten la mayoría en las consideraciones sobre las densidades de los constituyentes del plasma (Stewart y Pyatt, 1966; Jackson y Klein, 1969; More, 1979;

Liberman, 1979; Meyer-ter-Vehn y Zittel, 1988; Liberman y Albriton, 1995), los potenciales de intercambio y correlación o sobre la estadística (Dharma-wardana, 1982; Wilson, 1993; Massacrier, 1994; Pei y Chang, 1998;). También existen algunas variantes encaminadas a introducir correcciones cuánticas en el potencial efectivo (Murillo y Weisheit, 1995) y relativistas (Shivamoggi y Musler, 1996), y por último, correcciones a la autointeracción del electrón que hace la función de carga test en el problema de la determinación de las propiedades de los niveles monoelectrónicos ligados (Shalitin (1965, 1982), Ecker (1956), Theimer(1970), Schlüter(1990)).

Por ejemplo Nguyen *et al.* (1984, 1986) determinan los números de ocupación de los electrones ligados aplicando la distribución de Maxwell-Boltzmann con lo que

$$w_{nl} = \frac{g_l}{\sum_{n,l} e^{-(E_{nl}-E_{10})/kT}} e^{-\beta(E_{nl}-E_{10})} \quad (2.157)$$

Los modelos que introducen diferencias a través de la corrección de la autointeracción del electrón del ion que hace la función de carga test, también denominado electrón óptico, sustraen del potencial efectivo dado por (2.137) el potencial asociado a la carga test o electrón óptico. Para un electrón óptico en un estado  $nl$  (en el caso no relativista) cuya densidad designamos por  $\rho_{eo}$ , el potencial al que da lugar, y por tanto el que se sustrae, viene dado por

$$U_{eo}(r) = 4\pi \left[ \frac{1}{r} \int_0^r r'^2 \rho_{eo}(r') dr' + \int_r^\infty \rho_{eo}(r') dr' \right] \quad (2.158)$$

Esta corrección equivale a sustraer de la densidad de electrones ligados, la densidad correspondiente al electrón óptico.



Precisamente en esta tesis el modelo de potencial analítico que se propone corrige la autointeracción del electrón óptico, por lo que veremos en capítulos posteriores cuales son las consecuencias de esta corrección.

### **2.5.2.- Potenciales efectivos no aislados analíticos.**

Dentro del contexto del cálculo de las propiedades de los plasmas tales como la determinación de las abundancias de iones o de las opacidades, donde se debe plantear un problema autoconsistente para el cálculo del potencial efectivo de cada ion así como de las energías de nivel y de las funciones de ondas, los métodos comentados anteriormente requieren de un gran tiempo de cálculo. Más aún si se considera un plasma formado por un elemento de número atómico alto, se tratan un gran número de estados excitados para cada ion o se considera un plasma formado por diferentes especies químicas.

Para el caso de átomos e iones aislados se han empleado con éxito los potenciales analíticos para determinar las propiedades atómicas como las energías de nivel, las funciones de onda o las secciones eficaces de diferentes procesos (Green, Sellin y Zachor, 1969; Yunta, Rodríguez Mayquez y Sánchez del Río, 1973; Klapisch, 1967, 1971; Aimar, Crance y Klapisch, 1970, Rogers, Wilson y Iglesias, 1988).

Por tanto, una alternativa a los métodos autoconsistentes comentados en el apartado anterior para determinar el potencial, es el uso de potenciales efectivos analíticos para iones no aislados. Dedicaremos este apartado a presentar aquellos potenciales analíticos más relevantes de la bibliografía que contemplan los efectos de densidad y temperatura.

### 2.5.2.1.- Potencial de coulomb apantallado para iones hidrogenoides.

Se denomina potencial de coulomb apantallado al potencial dado por la expresión

$$U(r) = \frac{Ze^2}{r} e^{-r/D} \quad (2.159)$$

donde  $D$  es una distancia característica que depende del fenómeno en estudio.

Esta forma para el potencial fue propuesta en el año 1923 por P. Debye y E. Hückel para modelar la interacción efectiva entre dos partículas puntuales cargadas inmersas en un plasma, y en el año 1934 por H. Yukawa para estudiar la interacción entre partículas elementales. Debye y Hückel obtienen este potencial a partir de la ecuación de Poisson y considerando que las dos partículas se encuentran en un plasma formado por un fondo continuo de carga positiva y negativa cuyas densidades de cargas vienen dadas por distribuciones de Boltzmann linealizadas, aproximación que recibe el nombre de aproximación de Debye-Hückel. En este caso la constante  $D$  recibe el nombre de radio de Debye y viene dado por  $D = \lambda_D = \sqrt{8\pi n e^2 / \epsilon k T}$ , siendo  $n$  la densidad de partículas tanto positivas como negativas,  $e$  la carga del electrón,  $\epsilon$  la constante dieléctrica del medio,  $k$  la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura del plasma.

Posteriormente este potencial ha sido utilizado para determinar diversas propiedades atómicas de iones hidrogenoides inmersos en plasmas, para lo que se requiere la resolución de la ecuación de Schrödinger o de Dirac con el potencial (2.159). Las técnicas de resolución empleadas han sido numéricas (Ecker y Weizel, 1956; Margenau *et al.*, 1959; Harris, 1962; Smith, 1964; Schey, 1965; Rouse, 1967; Roger, 1970; Nauenberg, 1973; Barcza, 1979; Singh y Varshni, 1984 y Núñez, 1993) y también se han desarrollado expresiones analíticas para los autovalores y funciones

de ondas fundamentalmente por medio de procedimientos perturbativos (Iafate y Mendelsohn, 1969; Grant y Lai, 1979; Green, 1982; Patil, 1984; Dutt, 1985 y Vrscay, 1986) y variacionales (Roussel y O'Connell, 1974; Gerry *et al.*, 1984). Además de calcular los autovalores de la energía y las correspondientes autofunciones, se han calculado probabilidades de transición ligado-ligado (Herman, 1970 y Roussel 1974), ligado-libre (Weisheit, 1974; Shore, 1975; Schlüter, 1980 y Höhne, 1982) y libre-libre (Lange, 1985), fases de scattering (Hatton, 1981; Rogers, 1971; Grandjouan, 1975 y Pundir, 1984), o polarizabilidades (Zimmermann, 1985; Fowler, 1986 y Friedman, 1986).

Smith (1964) calcula los autovalores para un átomo de hidrógeno mediante un método perturbativo que le permite obtener expresiones analíticas de los autovalores. Escribe el potencial en la siguiente forma

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} + U'(r) \quad (2.160)$$

con

$$U'(r) = -\frac{Ze^2}{r} (e^{-r/D} - 1) \quad (2.161)$$

Con el objeto de poder tratar el término  $U'(r)$  como una perturbación al potencial coulombiano, restringe el estudio al caso de radios de Debye largos ( $D$  grandes), es decir, para plasmas a altas temperaturas y densidades bajas.

Para el primer orden de la teoría de perturbaciones obtiene para un nivel con número cuántico principal  $n$  y momento angular  $l$ , la siguiente expresión para el autovalor de la energía

$$E_{nl} = E_{nl}^o + \Delta E_{nl} \quad (2.162)$$

con

$$E_{nl}^0 = -\frac{1}{2n^2} \quad (2.163)$$

y

$$\begin{aligned} \Delta E_{nl} &= \langle P_{nl} | U' | P_{nl} \rangle = \int_0^\infty P_{nl}^2(r) U'(r) dr = \\ &= \frac{2^{2l+3} (N+l)! {}_2F_1(-N+l+1, -N+l+1, 2l+2, 4D^2/N^2)}{N^{2l+4} (2l+1)! (N-l-1)! (2/N+1/D)^{2N} D^{2N-2l-2}} - \frac{2}{N^2} \end{aligned} \quad (2.164)$$

donde  $P_{nl}$  es la autofunción de orden cero del orbital  $nl$  (que corresponde a la solución de la ecuación de Schrödinger para el potencial coulombiano) y  ${}_2F_1$  es la función hipergeométrica. El efecto del apantallamiento, en el primer orden de la teoría de perturbaciones, es desplazar los niveles de energía del átomo de hidrógeno en una cantidad  $\Delta E$  hacia el continuo, y como se aprecia en la ecuación (2.164), este desplazamiento depende del orbital que se trate por aparecer los números cuánticos  $n$  y  $l$ . Por tanto, el autovalor de un nivel  $nl$  no depende solamente del número cuántico principal  $n$ , como en el caso coulombiano, sino también del número cuántico angular  $l$ , de modo que al considerar la interacción con el plasma se rompe la degeneración en  $l$ .

Además obtiene una expresión sencilla del desplazamiento  $\Delta E_{nl}$  desarrollando la función  $U'(r)$  en serie de potencias de  $r$  y evaluando posteriormente la ecuación (2.164). Haciendo esto se tiene

$$\Delta E_{nl} = \frac{1}{D} - \frac{1}{2D^2} \langle r \rangle + \frac{1}{6D^3} \langle r^2 \rangle - \frac{1}{24D^4} \langle r^3 \rangle + \frac{1}{120D^5} \langle r^4 \rangle \quad (2.165)$$

y despreciando los términos superiores a la potencia de  $1/D$ , el autovalor de la energía del nivel  $nl$  se puede expresar como

$$E_{nl} = -\frac{1}{2n^2} + \frac{1}{D} \quad (2.166)$$

De la expresión anterior se puede deducir una importante característica: el potencial de coulomb apantallado, a diferencia de lo que ocurre con el potencial de coulomb, tiene un número finito de estados ligados ya que a partir de un determinado valor del número cuántico principal  $n$ , la cantidad  $(1/2n^2)$  es menor que la cantidad  $(1/D)$ , y por tanto se obtienen autovalores positivos que no corresponden a estados ligados.

Esta propiedad del potencial de coulomb apantallado es muy importante a la hora de determinar la función de partición canónica interna, ya que como vimos en el apartado 2.2, ésta diverge para el potencial coulombiano por tener un número infinito de estados ligados. En este caso, se evita la divergencia ya que al haber un número finito de estados ligados, la función de partición contiene una sumatoria finita, y por tanto convergente.

El problema de determinar el número cuántico principal más alto que da lugar a un estado ligado para el potencial de coulomb apantallado,  $n_{max}$ , ha sido estudiado por numerosos autores (Sachs y Goeppert-Mayer, 1938; Hulthén y Laurikainen, 1951; Harris, 1962; Lovelace y Masson, 1962; Holladay y Smith, 1962; Schey y Schwartz, 1965; Trubnikov y Yavlinskii, 1965; Robinson *et al.*, 1970; Rogers *et al.*, 1970; Kesarwani y Varshni, 1978 y Singh y Varshni, 1984). Holladay y Smith (1962) determinaron  $n_{max}$  utilizando la aproximación WKB, donde se tiene

$$2 \int_{r_1}^{r_2} dr \left[ 2m(E - U(r) - \hbar^2 l(l+1)/2mr^2) \right]^{1/2} = (n + 3/4)h \quad (2.167)$$

siendo  $r_1$  y  $r_2$  los puntos clásicos de retroceso,  $m$  la masa del electrón y  $E$  el autovalor. Para el caso del potencial de coulomb apantallado esta expresión queda como

$$\int_{r_1}^{r_2} dr \left[ 2m(E + 2e^{-r/D} - l(l+1)/r^2) \right]^{1/2} = (n + 3/4)h \quad (2.168)$$

El valor de  $n_{max}$  se obtiene haciendo  $E=0$  en la ecuación anterior al mismo tiempo que se hace  $r_1 \rightarrow -\infty$  y  $r_2 \rightarrow \infty$ . En la expresión anterior se ve que  $n_{max}$  depende en general del número cuántico angular  $l$  y del radio de Debye  $D$ , con lo que

$$n_{max} = n_{max}(l, D) \quad (2.169)$$

Después de algunas aproximaciones en dicho trabajo obtienen la siguiente parametrización

$$n_{max}(l, D) = N(0, D) - (N(0, D)/l_m)l \quad (2.170)$$

con

$$N(0, D) = 2\pi^{-1/2} D^{1/2} \approx 1.13 D^{1/2} \quad l_m \approx 0.85 D^{1/2} \quad (2.171)$$

F.J. Roger, H.C. Graboske, Jr. y D.J. Harwood (1970) resolvieron numéricamente la ecuación de Schrödinger para el Potencial Coulombiano Apantallado y también para el potencial

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} - \frac{e^2}{D} \quad (2.172)$$

denominado Potencial Coulombiano Apantallado Desplazado. La resolución numérica de ambos potenciales es exactamente la misma ya que ambos potenciales dan lugar a la misma ecuación de Schrödinger pero con distintos autovalores. Si  $E_{nl}$  es el autovalor que da la resolución numérica de la ecuación radial de Schrödinger para el potencial de coulomb apantallado, el autovalor correspondiente al potencial de coulomb apantallado desplazado  $E'_{nl}$  vendrá dado por

$$E'_{nl} = E_{nl} + e^2/D \quad (2.173)$$

Encuentran numéricamente que el efecto del apantallamiento es alejar del núcleo la distribución de carga del electrón, desplazando los nodos de la función de onda hacia

el infinito (hacia el exterior del ion) y disminuyendo los máximos y mínimos relativos de la misma, efecto que es más acentuado conforme disminuye el radio de Debye. Encuentran un desplazamiento de las energías de nivel hacia los valores positivos y destacan que la distribución de densidad es modificada ligeramente mientras que los autovalores son fuertemente perturbados. Encuentran que desaparece en los autovalores de la energía la degeneración del momento angular  $l$ , típica del potencial coulombiano, y que para un valor dado del número cuántico principal  $n$ , la energía sufre una mayor perturbación (desplazamiento hacia el continuo) conforme mayor es el momento angular. También encuentran que el máximo número cuántico principal permitido para un ion de carga nuclear  $Z$  y un radio de Debye  $D$  viene dado por

$$n_{max} = [-0.1045 + 1.2701(DZ/a_0)]^{1/2} \quad (2.174)$$

David Singh y Y.P. Varshni (1984) resuelven también numéricamente la ecuación de Schrödinger para el potencial de coulomb apantallado mediante un método numérico que proporciona ocho cifras significativas para las energías de nivel y catorce para los parámetros de apantallamiento crítico de un nivel, es decir, el valor de  $D$  a partir del cuál un nivel no existe. Hacen un estudio comparativo entre el potencial de Debye-Hückel y un potencial de tipo coulombiano, denominado potencial COCP (*cut-off coulomb potential*), definido como

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{e^2}{r} & r < d \\ 0 & r > d \end{cases} \quad (2.175)$$

donde el parámetro  $d$  se suele tomar como la distancia entre iones (Cowling, 1945) o como la longitud de Debye. Diversos autores (Cohen, 1950) han dado argumentos en favor de tomar  $d$  como la longitud de Debye y en favor del potencial COCP frente al potencial de coulomb apantallado para el cálculo de propiedades de niveles

fuertemente ligados (energía electrostática mucho mayor que la energía térmica) (Alyamovskii, 1962; Kurdin, 1962 y Jackson, 1969).

Este potencial también da lugar a un número finito de estados ligados. En este trabajo se comparan los autovalores obtenidos con ambos potenciales así como los parámetros de apantallamiento crítico de los diferentes niveles. Se concluye que el comportamiento de ambos potenciales es muy distinto y que no es posible modelar el comportamiento del potencial de Debye por medio del potencial COCP. En concreto se observa que los desplazamientos de nivel que produce el potencial de Debye son mucho mayores que los que produce el potencial COCP.

D. Schlüter (1990) construye un potencial efectivo analítico para iones hidrogenoides utilizando la aproximación de Debye-Hückel linealizada, y contempla analíticamente el efecto del electrón óptico, es decir la autointeracción, basándose en las ideas propuestas por Ecker y Weizel (1956) y Theimer y Kepple (1970). Para un electrón óptico en el estado  $nl$  el potencial viene dado por

$$U(r) = -\frac{1}{r} \left[ 1 + \left( Z - \frac{d_o Z^2}{n} - 1 \right) e^{-ar} + e^{-2Zr/n} \frac{Z^2}{n} \sum_{k=0}^{2n-1} d_k(n,l) \left( \frac{Zr}{n} \right)^k \right] \quad (2.176)$$

donde los coeficientes  $d_k(n,l)$  vienen dados por la siguiente regla de recurrencia

$$d_k = \frac{n^2 a^2}{4Z^2} c_k + (k+1) \left[ d_{k+1} - \frac{1}{4}(k+2)d_{k+2} \right] \quad (2.177)$$

donde  $d_{2n} = 0$  y  $d_{2n+1} = 0$ , y los coeficientes  $c_k$  están dados por

$$(Z_n^2 - a^2)c_k = b_k + Z_n^2(k+1) \left[ c_{k+1} - \frac{1}{4}(k+2)c_{k+2} \right] \quad (2.178)$$

siendo  $Z_n = 2Z/n$  y cumpliéndose que  $c_{2n} = 0$  y  $c_{2n+1} = 0$ . Los coeficientes  $b_k$  vienen dados en el apéndice 3. Al considerar la autointeracción del electrón óptico (o



la reacción del electrón óptico al plasma), Schlüter obtiene un potencial con efectos de densidad y temperatura que a largas distancias tiene un comportamiento coulombiano, lo que origina un menor desplazamiento de los niveles de energía que los que proporciona el potencial de Debye, y además, este potencial tiene un número infinito de estados ligados. De esta forma obtiene un potencial analítico utilizando la aproximación de Debye-Hückel linealizada que corrige a la baja los desplazamientos de los niveles de energía dando lugar a un menor desplazamiento de las energías de transición o de línea, y como consecuencia, un mejor acuerdo con los datos experimentales. Barcza (1978) compara el desplazamiento hacia el rojo de la línea de Balmer que proporcionan los potenciales de Debye y el de Theimer y Kepple (que consideran la autointeracción del electrón óptico) con los datos experimentales de Wiese y Kelleher (1971), obteniendo que los errores obtenidos con el potencial de Debye son hasta cinco veces los obtenidos con el potencial de Theimer.

### 2.5.2.2.- Potencial de coulomb apantallado para átomos multielectrónicos.

C. A. Rouse considera el efecto del apantallamiento sobre sistemas atómicos no hidrogenoides o iones multielectrónicos. En un primer trabajo (Rouse, 1967) estudia con este propósito el denominado Potencial Coulombiano Apantallado Completo que viene dado por

$$U(r) = \begin{cases} -\left(\frac{Ze^2}{\eta_o}\right) \left[ \frac{1}{r} - \frac{1}{(D+A)} \right] & 0 \leq r \leq A \\ -\frac{Ze^2}{\eta_o} \frac{D}{D+A} \frac{e^{(A-r)/D}}{r} & r \geq A \end{cases} \quad (2.179)$$

donde aquí  $D$  es el denominado radio de apantallamiento y  $A$  es el radio del sistema atómico en estudio. Se considera que los parámetros  $D$  y  $A$  para un sistema atómico

inmerso en un plasma vienen dados por otras consideraciones. Por ejemplo, en situaciones de baja densidad  $D$  vendría dado por el radio de Debye, y para situaciones de alta densidad este parámetro sería cercano al radio medio atómico.

En un segundo trabajo (Rouse, 1971) realiza una formulación del problema de apantallamiento de átomos o iones con muchos electrones, a través de la ecuación de Schrödinger y usando el método Hartree. Considera un plasma en equilibrio compuesto de átomos, iones y electrones libres. Centra el estudio en un ion de carga nuclear  $Z$  con  $N$  electrones ligados y asume que la posición de las partículas promediada temporalmente puede ser descrita por una función de distribución con simetría radial respecto del centro de masa del ion en estudio; y por tanto el centro de masa del sistema es el centro de masa del ion. Además asume que la distribución radial de partículas externas promediada temporalmente incluye los efectos de colisiones elásticas, pero no considera para el ion en estudio la ionización, la recombinación, excitación o desexcitación.

En tal situación la ecuación de Schrödinger para el electrón  $k$ -ésimo ligado al ion en estudio viene dada por

$$H_k u_k = E_k u_k \quad (2.180)$$

donde  $u_k$  es la correspondiente función de onda monoeléctronica,  $E_k$  el correspondiente autovalor de la energía, y  $H_k$  es el hamiltoniano monoeléctronico asociado a dicho electrón, dado por

$$H_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k^2 - \frac{Ze^2}{r_k} + \sum_{j \neq k} \int |u_j(\vec{r}_j)|^2 \frac{e^2}{r_{jk}} d\tau_j + \sum_s \int |u_s^e(\vec{r}_s)|^2 \frac{e^2}{r_{sk}} d\tau_s - \sum_p \frac{Z_p^e e^2}{r_{pk}} \quad (2.181)$$

donde  $r_k$  es la distancia del electrón  $k$ -ésimo al núcleo del ion en estudio,  $u_j$  es la función de onda del electrón  $j$ -ésimo ligado al ion,  $r_{jk}$  es la distancia entre los

electrones  $j$ -ésimo y  $k$ -ésimo ligados al ion,  $u_s^e$  es la función de onda del electrón externo  $s$ -ésimo que puede ser ligado o libre,  $Z_p^e$  es la carga nuclear del ion externo  $p$ -ésimo, y  $r_{sk}$  y  $r_{pk}$  son las distancias desde el electrón ligado  $k$ -ésimo al electrón externo  $s$ -ésimo y al núcleo externo  $p$ -ésimo respectivamente.

El primer término de la ecuación (2.181) representa la energía cinética del electrón  $k$ , y el resto la energía potencial de interacción electrostática en la que podemos distinguir: en primer lugar la interacción del electrón  $k$  con el núcleo, la interacción con el resto de electrones ligados del ion, la interacción con los electrones externos (ligados y libres) y por último la interacción con los núcleos externos.

La ecuación de Schrödinger para un electrón de un ion ligado que se encuentra en el seno de un plasma se reduce a la correspondiente ecuación de un ion aislado cuando los valores medios de  $r_{sk}$  y  $r_{pk}$  son muy largos, en cuyo caso se puede despreciar la interacción electrostática entre los electrones del ion y las partículas externas.

El problema que se plantea es resolver de forma aproximada la ecuación (2.180) con el hamiltoniano dado por (2.181). Resulta conveniente para este propósito reescribir la ecuación (2.181) como

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_k^2 - \frac{Ze^2}{r_k} U_k^{(i)}(\vec{r}_k) U_k^{(e)}(\vec{r}_k) \right) u_k(\vec{r}_k) = E_k u_k(\vec{r}_k) \quad (2.182)$$

donde  $U_k^{(i)}$  es denominada función de apantallamiento interno,  $U_k^{(e)}$  es la denominada función de apantallamiento externo, y ambas vienen dadas por

$$U_k^{(i)} = 1 + \frac{r_k}{Ze^2} \sum_{j \neq k} \int |u_j(\vec{r}_j)|^2 \frac{e^2}{r_{jk}} d\tau_j \quad (2.183)$$

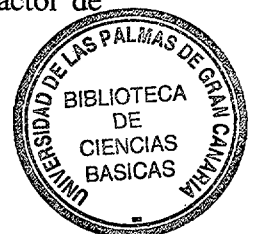
$$U_k^{(e)} = I + \frac{r_k}{Ze^2 U_k^{(i)}} \left( \sum_s \int |u_s^e(\vec{r}_s)|^2 \frac{e^2}{r_{sk}} d\tau_s - \sum \frac{Z_p^e e^2}{r_{pk}} \right) \quad (2.184)$$

Por lo tanto el potencial efectivo que siente el electrón  $k$ -ésimo se puede expresar como

$$U_k(r) = -\frac{Ze^2}{r_k} U_k^{(i)}(r) U_k^{(e)}(r) \quad (2.185)$$

donde se toma el potencial en la aproximación de campo central, siendo  $r$  la distancia del electrón al núcleo. Los argumentos físicos que da para justificar esta aproximación son los siguientes: comencemos con un núcleo aislado de carga nuclear  $Z$  y un electrón ligado al que denominaremos electrón óptico. Su interacción es descrita exactamente por el potencial coulombiano. Si añadimos más electrones ligados al sistema anterior, se reduce la interacción media entre el electrón óptico y el núcleo por un factor  $U_k^{(i)}$ . Si añadimos al núcleo y al electrón óptico partículas externas al sistema (electrones libres e iones), nuevamente se reduce la interacción media entre el electrón óptico y el núcleo, pero ahora por un factor  $U_k^{(e)}$ . En el primer caso, y como primera aproximación, se puede decir que el electrón óptico interactúa con una carga efectiva  $Z'$ , dada por  $Z' = Z \langle U_k^{(i)} \rangle$ . Usando ahora el núcleo  $Z'$  en el segundo caso, se puede decir que las partículas externas reducen la interacción entre el electrón óptico y el núcleo de carga  $Z'$  por un factor  $U_k^{(e)}$ . Por lo tanto  $Z' U_k^{(e)} = Z \langle U_k^{(i)} \rangle U_k^{(e)}$ . pero ya que  $Z \langle U_k^{(i)} \rangle$  representa un núcleo puntual, es más realista usar  $Z U_k^{(i)}(r) U_k^{(e)}(r)$ .

El problema se reduce ahora a determinar las funciones de apantallamiento definidas anteriormente. Para ello Rouse hace dos consideraciones: Utiliza el método de Thomas Fermi escalado (STF) de Stewart y Rotenberg (1965) para iones aislados, para aproximar el efecto del core de los electrones ligados del ion, y un factor de



apantallamiento tipo Debye-Hückel para aproximar el efecto de las partículas externas. En concreto utiliza para este último, la forma biparamétrica del potencial de Coulomb apantallado completo (CSCP). Con estas elecciones el potencial efectivo que siente un electrón se denomina potencia de Thomas Fermi escalado y apantallado, y viene dado por

$$V_{SSTF}(r) = -\frac{Ze^2}{r} U_{SSTF}(r) \quad (2.186)$$

donde

$$U_{SSTF}(r) = \begin{cases} U(r) - Ar & 0 \leq r \leq a \\ BU(r)e^{(a-r)/D} & r > a \end{cases} \quad (2.187)$$

y

$$U(r) = U_{STF}(r) = \begin{cases} \phi(r) + q \frac{x}{x_c} & x \leq x_c \\ q & x \geq x_c \end{cases} \quad (2.188)$$

donde  $D$  es un parámetro de apantallamiento no especificado para las partículas externas,  $a$  puede ser interpretado clásicamente como la distancia mínima media de los electrones y núcleos externos;  $A$ ,  $B$  y  $q$  son constantes definidas por

$$B = \frac{D[aU'(a) - U(a)]}{D[aU'(a) - U(a)] - aU(a)}; \quad A = (1 - B) \frac{U(a)}{a}; \quad q = \frac{Z - N + 1}{Z} \quad (2.189)$$

$x$  es la distancia al núcleo en unidades STF, es decir  $x = r/\alpha\mu$ , siendo  $\alpha$  el factor de escala de la distribución de carga y  $\mu$  un parámetro dado por  $\mu = 0.88534 Z^{1/3}$ . Por último la función  $\phi(x)$  es la función de Thomas-Fermi que satisface la siguiente ecuación diferencial

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = \frac{\phi^{3/2}}{x^{1/2}} \quad (2.190)$$

y las siguientes condiciones de contorno

$$\varphi(0) = I; \varphi(x_c) = 0; \varphi'(x_c) = -\frac{q}{x_c} \quad (2.191)$$

En dicho trabajo se concluye que la función de apantallamiento interna se comporta como  $U^{(i)} \approx Z - N + I + (N - I)e^{-\beta r}$ , siendo  $\beta$  el inverso de un radio de apantallamiento asociado al core del ion, y el potencial efectivo como

$$U(r) = -\frac{I}{r} \left\{ Z - N + I + (N - I)e^{-\beta r} \right\} e^{-r/D} \quad (2.192)$$

Esta forma analítica propuesta por Rouse para introducir los efectos del plasma en el potencial aislado  $U^{(i)} = -(I/r) \left\{ Z - N + I + (N - I)e^{-\beta r} \right\}$ , la utilizaremos posteriormente en este trabajo para compararla con el potencial efectivo propuesto por nosotros.

Roger y DeWitt (1973) estudian las propiedades termodinámicas de los gases en la imagen física, es decir, a través de la función de partición macrocanónica. Para el caso de plasmas de hidrógeno obtienen un potencial coulombiano apantallado con correcciones cuánticas que esencialmente consisten en un comportamiento oscilante a largas distancias y una modificación de las cargas de los componentes del plasma. Roger (1974) siguiendo nuevamente la imagen física para describir el plasma, pero ahora sin considerar las correcciones cuánticas, estudia plasmas de helio (o helioides) llegando a establecer por un procedimiento variacional el siguiente potencial efectivo para estos iones

$$U(r) = -\frac{I}{r} \left\{ (Z - I)e^{-r/D} + e^{-1.067Zr} \right\} \quad (2.193)$$

Posteriormente generaliza estos resultados ( Roger, 1980), demostrando que las propiedades de átomos inmersos en plasmas pueden ser obtenidas a partir de potenciales aislados corregidos adecuadamente. Para un ion de carga nuclear  $Z$  y  $N$  electrones ligados, encuentra que el potencial efectivo no aislado está dado por

$$U(r) = -\frac{I}{r} \left\{ (Z - N + I)e^{-r/D} + \sum_{n=1}^{n^*} N_n e^{-a_n r} \right\} \quad (2.194)$$

donde  $N_n$  es el número de electrones que hay en una capa con número cuántico principal  $n$ ,  $n^*$  es la capa de mayor número cuántico principal ocupada por un electrón del core y  $a_n$  son unos parámetros asociados a cada capa  $n$  que ha sido determinado por ajuste con energías de ionización monoeléctricas experimentales en situación aislada, es decir, para  $D \rightarrow \infty$ . Justifica que el potencial anterior no necesita modificar los parámetros  $a_n$  siempre que el radio inverso de Debye,  $1/D$ , no se acerque a dichos parámetros.

Al igual que el potencial efectivo no aislado introducido por Rouse, utilizaremos la forma analítica dada por Rogers en la ecuación anterior para comparar el potencial efectivo que propondremos en el capítulo tres de esta tesis y que será estudiado y comparado con estos dos potenciales en el capítulo cuatro.

# Capítulo 3

## Método para generar potenciales efectivos analíticos para átomos no aislados.

---

### 3.1.- Introducción.

Como se ha comentado en la introducción de esta memoria los potenciales analíticos han sido utilizados frecuentemente para determinar las principales propiedades atómicas de átomos e iones aislados, entre las que podemos citar: las energías de nivel, las funciones de ondas, las fuerzas de oscilador, o las energías de transición. Se ha destacado la gran utilidad que tienen los potenciales analíticos en la determinación de las propiedades ópticas de los plasmas, en donde hay que determinar diferentes cantidades atómicas para un gran número de estados iónicos de una especie química, más aún si ésta tiene un número atómico alto. También se ha visto como en plasmas de densidades moderadas y altas es necesario introducir los efectos de las interacciones del átomo o ion con el medio en los cálculos atómicos.

En este capítulo consideraremos un ion con carga nuclear  $Z$  y  $N$  electrones ligados inmerso en un plasma en Equilibrio Local Termodinámico (ELT) a una temperatura  $T$  y una densidad de materia  $\rho$ . A continuación, nos proponemos desarrollar un método para determinar analíticamente el potencial que actúa sobre un electrón concreto del ion, como consecuencia de su interacción con el resto de



partículas del mismo y con el plasma, potencial que denominaremos potencial efectivo. Al electrón le denominaremos electrón óptico, y al resto del ion, core. Si a este potencial efectivo le añadimos la contribución del electrón óptico tendremos el potencial total, por tanto

$$U_t(\vec{r}) = U_{ef}(\vec{r}) + U_{eo}(\vec{r}) \quad (3.1)$$

donde  $U_t(\vec{r})$  es el potencial total,  $U_{ef}(\vec{r})$  es el potencial efectivo y  $U_{eo}(\vec{r})$  es el potencial creado por el electrón óptico.

Empezaremos describiendo el modelo de interacción del sistema atómico con el plasma y a partir de éste obtendremos un potencial efectivo no aislado aproximado que corresponde al que siente el electrón óptico, potencial que se puede expresar como la suma de la contribución del core en situación no aislada más la contribución de las partículas del plasma. Estudiaremos el comportamiento del potencial efectivo a cortas y largas distancias del origen del átomo o ion y lo compararemos con el que tiene el correspondiente potencial en situación aislada. Con el objeto de poder obtener expresiones analíticas del potencial efectivo, introduciremos las aproximaciones de electrón óptico hidrogenoide, la de electrón óptico asintótico y la aproximación de orden cero, que nos permitirán expresar el potencial efectivo como la suma del potencial que ejerce el resto de partículas del átomo o ion en situación aislada más unos términos que son característicos del modelo de interacción considerado. Utilizaremos el modelo anterior con una serie de potenciales analíticos aislados (todos ellos definidos por una misma expresión general), lo que nos proporcionará los correspondientes potenciales analíticos efectivos no aislados. Finalmente compararemos cualitativamente los potenciales obtenidos con otros existentes en la bibliografía.

### 3.2- Modelo de interacción del sistema atómico con el plasma.

Consideremos un ion con carga nuclear  $Z$  y  $N$  electrones ligados inmerso en un plasma en ELT a una temperatura  $T$  y una densidad de materia  $\rho$ . El potencial total en un punto del espacio viene dado por

$$U_t(\vec{r}) = U_N(\vec{r}) + U_p(\vec{r}) \quad (3.2)$$

donde  $U_N(\vec{r})$  es el potencial creado por el ion y  $U_p(\vec{r})$  el creado por el resto del plasma. La ecuación (3.2) también se puede expresar de la siguiente forma

$$U_t(\vec{r}) = U_{N-1}(\vec{r}) + U_{eo}(\vec{r}) + U_p(\vec{r}) \quad (3.3)$$

donde se ha tenido en cuenta que el potencial creado por el ion se puede poner como la suma del creado por el core,  $U_{N-1}(\vec{r})$ , y el debido al electrón óptico,  $U_{eo}(\vec{r})$ .

Aplicando el operador  $\nabla^2$  a la ecuación (3.3), y considerando simetría esférica para los diferentes potenciales se obtiene

$$\frac{d^2(rU_t(r))}{dr^2} = \frac{d^2(rU_{N-1}(r))}{dr^2} + \frac{d^2(rU_{eo}(r))}{dr^2} + \frac{d^2(rU_p(r))}{dr^2} \quad (3.4)$$

y asumiendo que el potencial debido al plasma cumple la ecuación de Poisson ( $\nabla^2 U_p(r) = -4\pi\rho_p(r)$ ) se tiene

$$\frac{d^2(rU_t(r))}{dr^2} = \frac{d^2(rU_{N-1}(r))}{dr^2} + \frac{d^2(rU_{eo}(r))}{dr^2} - 4\pi r \rho_p(r) \quad (3.5)$$

siendo  $\rho_p(r)$  la densidad de carga de las partículas del plasma. Introduciendo la función de carga  $Z(r)$  definida por

$$Z(r) = -rU(r) \quad (3.6)$$

en la ecuación (3.5) obtenemos

$$\frac{d^2 Z_i(r)}{dr^2} = \frac{d^2 Z_{N-1}(r)}{dr^2} + \frac{d^2 Z_{eo}(r)}{dr^2} + 4\pi r \rho_p(r) \quad (3.7)$$

Haciendo uso de la ecuación (3.1) y de la definición (3.6) podemos obtener de la expresión anterior la siguiente ecuación diferencial para la función de carga efectiva

$$\frac{d^2 Z_{ef}(r)}{dr^2} = \frac{d^2 Z_{N-1}(r)}{dr^2} + 4\pi r \rho_p(r) \quad (3.8)$$

Las ecuaciones diferenciales (3.7) y (3.8) relacionan las funciones de carga total y efectiva con las funciones de carga del core y con la densidad del plasma, y en el caso de la total hay que considerar además la función de carga del electrón óptico.

Con el propósito de obtener un potencial efectivo, en la ecuación (3.8) debemos proponer una densidad del plasma,  $\rho_p(r)$ , lo que abordaremos a continuación.

Consideraremos un ion que se encuentra en el seno de un plasma formado por electrones libres, iones de distintas especies químicas con carga nuclear  $Z_i$  ( $i=1, \dots, p$ ) en diferentes estados de ionización de carga  $Z_{ij}^*$  ( $Z_{ij}^* = Z_i - j + 1$ , con  $j = 1, \dots, Z_i$ ), y sus correspondientes núcleos libres. En esta situación la densidad del plasma en un punto del espacio puede expresarse como

$$\rho_p(r) = \rho_e(r) + \rho_{ion}(r) + \rho_n(r) \quad (3.9)$$

siendo  $\rho_e$  la densidad de electrones libres,  $\rho_{ion}$  la densidad de iones y  $\rho_n$  la densidad de núcleos libres. Teniendo en cuenta que tenemos distintas especies químicas, las dos últimas se pueden poner como

$$\rho_{ion}(r) = \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{Z_i} \rho_{ion}^{ij}(r) \quad (3.10)$$

$$\rho_n(r) = \sum_{i=1}^p \rho_n^i(r) \quad (3.11)$$

donde  $\rho_{ion}^{ij}$  es la densidad de carga de iones de la especie atómica  $i$  en el estado de ionización  $j$ , y  $\rho_n^i$  es la densidad de núcleos desnudos de la especie  $i$ .

Asumiremos una descripción estadística clásica para las densidades de los distintos componentes del plasma en las que éstas vienen dadas por distribuciones de Boltzmann, con lo que (ver apéndice A1)

$$\rho_e(r) = -en_e(\infty) e^{eU_i(r)/kT} \quad (3.12)$$

$$\rho_{ion}^{ij}(r) = eZ_{ij}^* n_{ion}^{ij}(\infty) e^{-eZ_{ij}^* U_i(r)/kT} \quad (3.13)$$

$$\rho_n^i(r) = eZ_i n_n^i(\infty) e^{-eZ_i U_i(r)/kT} \quad (3.14)$$

donde  $n_e(\infty)$ ,  $n_{ion}^{ij}(\infty)$  y  $n_n^i(\infty)$  son las densidades de partículas en el infinito de los correspondientes componentes del plasma, las cuales están sujetas a la siguiente condición, denominada condición de neutralidad,

$$-n_e(\infty) + \sum_{i=1}^p Z_i n_n^i(\infty) + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{Z_i} Z_{ij}^* n_{ion}^{ij}(\infty) = 0 \quad (3.15)$$

Con estas expresiones para las densidades de los componentes del plasma de (3.9), (3.10) y (3.11) se tiene

$$\rho_p(r) = e \left( -n_e(\infty) e^{eU_i(r)/kT} + Z_{ij}^* n_{ion}^{ij}(\infty) e^{-eZ_{ij}^* U_i(r)/kT} + Z_i n_n^i(\infty) e^{-eZ_i U_i(r)/kT} \right) \quad (3.16)$$

El haber elegido las distribuciones de Boltzmann para las densidades, lleva consigo las siguientes consideraciones: los componentes del plasma se consideran distribuidos de forma continua en el espacio; no hay transformación neta de un tipo de partículas en otras (es decir, hay una compensación entre la ionización y la recombinación y además no hay reacciones químicas); no hay colisiones entre los componentes del sistema; las velocidades de las distintas partículas del sistema siguen distribuciones de Maxwell; las velocidades medias de los componentes son constantes; no hay campo magnético; y el campo eléctrico existente es conservativo.

Si introducimos en (3.7) y (3.8) la densidad del plasma dada por (3.16) obtenemos unas ecuaciones diferenciales no lineales y no homogéneas de coeficientes constantes. Con el objeto de poder obtener un potencial efectivo analítico consideraremos que las densidades dadas por (3.12), (3.13) y (3.14) se pueden linealizar respecto del potencial desarrollando las correspondientes exponenciales y quedándonos con los dos primeros términos de los desarrollos, con lo que obtendremos una densidad aproximada para cada uno de los componentes del plasma dadas por

$$\rho_e(r) \approx -en_e(\infty) \left( 1 + \frac{eU_i(r)}{kT} \right) \quad (3.17)$$

$$\rho_{ion}(r)_{ij} \approx eZ_{ij}^* n_{ion}(\infty)_{ij} \left( 1 - \frac{eZ_{ij}^* U_i(r)}{kT} \right) \quad (3.18)$$

$$\rho_n(r)_i \approx eZ_i n_n(\infty) \left( 1 - \frac{eZ_i U_i(r)}{kT} \right) \quad (3.19)$$

Usando estas expresiones podemos escribir en lugar de (3.16) la siguiente aproximación para la densidad de carga del plasma

$$\rho_p(r) \approx \left[ -en_e(\infty) + \sum_{i=1}^p Z_i en_n(\infty)_i + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{Z_i} eZ_{ij}^* n_{ion}(\infty)_{ij} \right] - \left[ \frac{e^2 n_e(\infty) + \sum_{i=1}^p Z_i^2 e^2 n_n(\infty)_i + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{Z_i} e^2 Z_{ij}^{*2} n_{ion}(\infty)_{ij}}{kT} \right] U_t(r) \quad (3.20)$$

y como se anula el primer término de la ecuación anterior por la condición de neutralidad, dada por la ecuación (3.15), obtenemos la siguiente aproximación para la densidad del plasma

$$\rho_p(r) \approx -\frac{a^2}{4\pi} U_t(r) = \frac{a^2}{4\pi r} Z_t(r) \quad (3.21)$$

que recibe el nombre de Aproximación de Debye-Hückel, siendo  $a$  una constante conocida como radio inverso de Debye que viene dada por la siguiente expresión

$$a = \left[ \frac{4\pi e^2 \left( n_e(\infty) + \sum_{i=1}^p Z_i^2 n_n(\infty)_i + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{Z_i} Z_{ij}^{*2} n_{ion}(\infty)_{ij} \right)}{kT} \right]^{1/2} \quad (3.22)$$

Para el caso de un plasma formado por una sola especie atómica en un único estado de ionización  $Z^*$  y en ausencia de núcleos libres, la condición de neutralidad del plasma se reduce a

$$Z^* n_{ion}(\infty) = n_e(\infty) \quad (3.23)$$

y el radio inverso de Debye queda como

$$a = \left[ \frac{4\pi(1+Z^*)e^2 n_e(\infty)}{kT} \right]^{1/2} \quad (3.24)$$

Introduciendo la ecuación (3.21) en las ecuaciones (3.7) y (3.8) se obtiene

$$\frac{d^2 Z_t(r)}{dr^2} - a^2 Z_t(r) = \frac{d^2 Z_N(r)}{dr^2} \quad (3.25)$$

$$\frac{d^2 Z_{ef}(r)}{dr^2} - a^2 Z_{ef}(r) = \frac{d^2 Z_{N-1}(r)}{dr^2} + a^2 Z_{eo}(r) \quad (3.26)$$

donde para obtener (3.25) hemos tenido en cuenta que  $Z_N(r) = Z_{N-1}(r) + Z_{eo}(r)$  y por tanto la suma de las derivadas segundas respecto a  $r$ , y para obtener (3.26) que  $Z_t(r) = Z_{ef}(r) + Z_{eo}(r)$ .

Nos centraremos a continuación en la solución de la ecuación diferencial (3.25), y para ello realizaremos el siguiente cambio de variable

$$Y(r) = Z_{ef}(r) - Z_{N-1}(r) \quad (3.27)$$

con lo que la ecuación queda

$$\frac{d^2 Y(r)}{dr^2} - a^2 Y(r) = a^2 (Z_{N-1}(r) + Z_{eo}(r)) \quad (3.28)$$

La solución general de la ecuación diferencial (3.28), que es una ecuación diferencial lineal de segundo orden no homogénea y de coeficientes constantes, viene dada una vez deshecho el cambio de variable por (Simmons, 1984)

$$\begin{aligned} Z_{ef}(r) = & Z_{N-1}(r) + A_1 e^{ar} + A_2 e^{-ar} - \\ & - e^{ar} \int_0^r \frac{e^{-as} R(s)}{W(e^{as}, e^{-as})} ds + e^{-ar} \int_0^r \frac{e^{as} R(s)}{W(e^{as}, e^{-as})} ds \end{aligned} \quad (3.29)$$

donde  $A_1$  y  $A_2$  son constantes arbitrarias que se determinan a partir de las condiciones de contorno que se impongan sobre  $Z_{ef}(r)$ ,  $W(e^{ar}, e^{-ar})$  es el

wronskiano de las funciones  $e^{ar}$  y  $e^{-ar}$  que toma el valor  $-2a$ , y  $R(r)$  es el término independiente de la ecuación diferencial

$$R(r) = a^2(Z_{N-1}(r) + Z_{eo}(r)) \quad (3.30)$$

Con estas consideraciones la ecuación (3.29) queda como

$$Z_{ef}(r) = Z_{N-1}(r) + A_1 e^{ar} + A_2 e^{-ar} + \frac{1}{2}a \left\{ e^{ar} \int_0^r e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds - e^{-ar} \int_0^r e^{as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds \right\} \quad (3.31)$$

Para determinar las constantes arbitrarias que aparecen en la solución general impondremos el límite de la función de carga efectiva en cero y exigiremos límite finito en el infinito, y éste quedará por determinar. Consideraremos que las funciones de carga del core y del electrón óptico tienen un comportamiento finito tanto en cero como en infinito. Para la función de carga efectiva tenemos

$$\begin{aligned} r \rightarrow 0: \quad Z_{ef}(r) &\rightarrow Z_{ef}(0) = Z_{N-1}(0), \\ r \rightarrow \infty: \quad Z_{ef}(r) &\rightarrow Z_{ef}(\infty) \end{aligned} \quad (3.32)$$

y para la función de carga del core y del electrón óptico

$$\begin{aligned} r \rightarrow 0: \quad Z_{N-1}(r) &\rightarrow Z_{N-1}(0), \quad Z_{eo}(r) \rightarrow Z_{eo}(0) \\ r \rightarrow \infty: \quad Z_{N-1}(r) &\rightarrow Z_{N-1}(\infty), \quad Z_{eo}(r) \rightarrow Z_{eo}(\infty) \end{aligned} \quad (3.33)$$

Para determinar la constante  $A_1$  y el límite de la función de carga efectiva en el infinito tenemos que conocer el comportamiento asintótico de cada uno de los términos que aparecen en la ecuación (3.31). Para ello tendremos en cuenta que las dos integrales que aparecen en el último término de dicha ecuación tienen los siguientes comportamientos asintóticos



$$\int_0^r e^{as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds \rightarrow \frac{1}{a} (Z_{N-1}(\infty) + Z_e(\infty)) e^{ar} + O(e^{a(r-\alpha)}); \quad \alpha > 0 \quad (3.34)$$

$$\int_0^r e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds \rightarrow \int_0^\infty e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds - \frac{1}{a} (Z_{N-1}(\infty) + Z_{eo}(\infty)) e^{-ar} + O(e^{-a(r+\alpha)}); \quad \alpha > 0 \quad (3.35)$$

donde  $O(e^\delta)$  representa los términos de orden  $e^\delta$  que completan el comportamiento asintótico. Para probar (3.34) y (3.35) basta considerar los siguientes límites

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\int_0^r e^{as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds}{C_+ e^{ar}} = 1 \quad (3.36)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{\int_0^r e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds - \int_0^\infty e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds}{C_- e^{-ar}} = 1 \quad (3.37)$$

donde  $C_+$  y  $C_-$  son constantes a determinar, y hemos tenido en cuenta que la integral que contiene la exponencial positiva es divergente y la que tiene la exponencial negativa convergente, por lo que le hemos restado a ésta última su límite a largas distancias. Ambos límites presentan indeterminaciones por lo que aplicando la regla de L'Hopital podemos estudiar los siguientes límites equivalentes respectivamente

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e^{ar} (Z_{N-1}(r) + Z_{eo}(r))}{a C_+ e^{ar}} = 1 \quad \text{y} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{e^{-ar} (Z_{N-1}(r) + Z_{eo}(r))}{a C_- e^{-ar}} = 1 \quad (3.38)$$

Cancelando las exponenciales del numerador con las del denominador, tomando límites y considerando las condiciones dadas en (3.33) se obtiene

$$C_+ = \frac{1}{a} (Z_{N-1}(\infty) + Z_{eo}(\infty)) \quad \text{y} \quad C_- = -\frac{1}{a} (Z_{N-1}(\infty) + Z_{eo}(\infty)) \quad (3.39)$$

con lo que queda probado el comportamiento a largas distancias dado por las ecuaciones (3.34) y (3.35). Así que el comportamiento asintótico de (3.31) viene dado por

$$\begin{aligned} Z_{ef}(r) &\rightarrow Z_{N-1}(\infty) + A_1 e^{ar} + \frac{1}{2} a \left\{ -\frac{2}{a} (Z_{N-1}(\infty) + Z_{eo}(\infty)) \right\} + \\ &+ \frac{1}{2} a e^{ar} \int_0^\infty e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds = \\ &= -Z_{eo}(\infty) + \left\{ A_1 + \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds \right\} e^{ar} \end{aligned} \quad (3.40)$$

luego para que  $Z_{ef}(r)$  sea finito

$$A_1 + \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds = 0 \quad (3.41)$$

y de aquí

$$A_1 = -\frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds \quad (3.42)$$

Introduciendo este valor de  $A_1$  en (3.31) se tiene que la función de carga efectiva queda como

$$\begin{aligned} Z_{ef}(r) &= Z_{N-1}(r) + A_2 e^{-ar} - \\ &- \frac{1}{2} a \left\{ e^{ar} \int_r^\infty e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds + e^{-ar} \int_0^r e^{as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds \right\} \end{aligned} \quad (3.43)$$

que también puede expresarse como

$$Z_{ef}(r) = Z_{N-1}(r) + A_2 e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds \quad (3.44)$$

Entonces el límite en infinito de la función de carga efectiva dada por la ecuación anterior es

$$\lim_{r \rightarrow \infty} Z_{ef}(r) = -Z_e(\infty) \quad (3.45)$$

pudiendo destacar que este comportamiento en el infinito de la función de carga efectiva da lugar al siguiente comportamiento asintótico del potencial efectivo

$$U_{ef}(r) = \frac{Z_e(\infty)}{r} \quad (3.46)$$

Es decir, se tiene un comportamiento coulombiano del potencial a largas distancias y esto es consecuencia de haber considerado al electrón óptico en nuestro modelo.

Para determinar la constante  $A_2$  realizamos el límite tendiendo a cero de la función de carga efectiva dada por la ecuación (3.44), y se obtiene

$$\lim_{r \rightarrow 0} Z_{ef}(r) = Z_{N-1}(0) + A_2 - \frac{1}{2}a \int_0^{\infty} e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_e(s)) ds \quad (3.47)$$

Si además tenemos en cuenta que este límite debe ser el mismo que el de la función de carga del core, de acuerdo con lo impuesto en (3.33), obtenemos el siguiente valor para la constante

$$A_2 = \frac{1}{2}a \int_0^{\infty} e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_e(s)) ds \quad (3.48)$$

valor al que denotaremos por C en lo que sigue, e introduciendo éste en la ecuación (3.44) queda determinada perfectamente la solución de la ecuación diferencial (3.8). Ésta será:

$$Z_{ef}(r) = Z_{N-1}(r) + Ce^{-ar} - \frac{1}{2}a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds$$

$$C = \frac{1}{2}a \int_0^\infty e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}(s)) ds$$
(3.49)

El comportamiento cerca del origen de la función de carga efectiva viene dado por

$$Z_{ef}(r) = Z_{N-1}(0) + (Z'_{N-1}(0) - aC)r + O(r^\alpha); \quad \alpha > 1$$
(3.50)

que da lugar al siguiente comportamiento del potencial efectivo cerca del origen

$$U_{ef}(r) \cong -\frac{Z_{N-1}(0)}{r} + (Z'_{N-1}(0) - aC)$$
(3.51)

Para probar este comportamiento estudiamos el siguiente límite

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{Z_{ef}(r) - Z_{N-1}(0)}{kr^p} = 1$$
(3.52)

donde hemos tenido en cuenta que se ha exigido que su límite en cero coincida con el del core. Aplicando la regla de L'Hopital por existir indeterminación, nos queda el siguiente límite equivalente

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{Z'_{ef}(r)}{kpr^{p-1}} = 1$$
(3.53)

donde  $Z'_{ef}(r)$  es la derivada de la función de carga efectiva que viene dada por

$$Z'_{ef}(r) = Z'_{N-1}(r) - aCe^{-ar} +$$

$$+ \frac{1}{2}a \left\{ -ae^{-ar} \int_0^r e^{as} (Z_{N-1}(s) + Z_e(s)) ds + e^{-ar} e^{ar} (Z_{N-1}(s) + Z_e(s)) - \right.$$

$$\left. - ae^{ar} \int_0^r e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_e(s)) ds - e^{ar} e^{-ar} (Z_{N-1}(s) + Z_e(s)) \right\} =$$
(3.54)

$$= Z'_{N-1}(r) - aCe^{-ar} - \frac{1}{2}a \left\{ ae^{-ar} \int_0^r e^{as} (Z_{N-1}(s) + Z_e(s)) ds + \right.$$

$$\left. + ae^{ar} \int_0^r e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_e(s)) ds \right\}$$

siendo  $Z'_{N-1}(r)$  la derivada de la función de carga del core. Debido a que el numerador de la ec. (3.53) tiene límite ( $\lim_{r \rightarrow 0} Z'_{ef}(r) = Z'_{N-1}(0) - aC$ ), el parámetro  $p$  debe tomar necesariamente el valor 1, con lo que es inmediato obtener de (3.53) que

$$k = Z'_{N-1}(0) - aC \quad (3.55)$$

y por tanto, queda demostrada la expresión (3.50) que da el comportamiento cerca del origen de la función de carga efectiva.

### 3.3- La función de carga efectiva: diversas aproximaciones.

La ecuación (3.49) es la solución de la ecuación diferencial (3.8) cuando consideramos las condiciones de contorno dadas por (3.32) y (3.33), y es la función de carga del potencial efectivo que sufre el electrón óptico, según el modelo de interacción considerado. Una particularidad del potencial que se obtiene de esta función de carga efectiva es la dependencia que tiene con el electrón óptico a través de  $Z_{eo}$ . Esto hace que en el infinito no tienda a cero exponencialmente como es frecuente en muchos de los potenciales de la bibliografía (C. Rouse, 1969,1971; F.J. Roger y H. E. DeWitt,1973; F.J. Roger, 1974,1981), sino que tenga un comportamiento coulombiano a largas distancias, como el propuesto por otros autores (G. Ecker y W. Weizel, 1956; O. Theimer y P. Kepple, 1970; D. Schlüter, 1990). También, por estar presente la función de carga del electrón óptico tendremos un potencial que además de depender del estado cuántico del core, depende del estado cuántico del propio electrón óptico, por lo que tendremos un potencial efectivo distinto con el que determinar las propiedades de cada nivel atómico monoeléctrico. Vemos que los efectos de la interacción con el plasma están representados a través del radio inverso de Debye, que como se ve en la ecuación (3.22) depende de los parámetros que caracterizan al plasma, tales como la densidad,

la temperatura o los estados de ionización presentes. En el caso en que dicho parámetro sea igual a cero, que corresponde al caso de un ion aislado, el potencial efectivo se reduce al potencial ejercido por el resto del ion sobre el electrón óptico en situación aislada. Además vemos que en la situación aislada desaparece la función de carga del electrón óptico, y es por esto por lo que la presencia de la función de carga del electrón óptico en la función de carga efectiva se interpreta como una reacción del electrón óptico con el plasma.

La ecuación (3.49) nos permite obtener la función  $Z_{ef}$  mediante un procedimiento autoconsistente. Éste comenzaría a partir de unas funciones de carga iniciales para el core y el electrón óptico, a las que denotamos respectivamente  $Z_{N-1}^0$  y  $Z_{eo}^0$ . Introduciendo estas funciones de carga en la ecuación (3.49) obtendríamos una función de carga efectiva que denominaremos de orden cero, y la denotaremos por  $Z_{ef}^0$ . A partir de ésta construimos el potencial efectivo de orden cero,  $U_{ef}^0$ , y con él calculamos las funciones de onda de los electrones ligados resolviendo la ecuación de Schrödinger o bien la de Dirac. Con estas nuevas funciones de onda se calculan unas nuevas funciones de carga del core y del electrón óptico,  $Z_{N-1}^1$  y  $Z_{eo}^1$ , que permite repetir el proceso hasta que se alcanza la autoconsistencia.

Nosotros estamos interesados en obtener una solución analítica de la ecuación diferencial (3.8), y esto sería posible si se dispusiera de expresiones analíticas de las funciones de carga del core y del electrón óptico en situación no aislada, que al introducir las en la ecuación (3.49) diera lugar a una expresión analítica. Como esto no ocurre, consideraremos algunas aproximaciones de la ecuación (3.49).

### 3.3.1- Aproximación de electrón óptico hidrogenoide.

La función de onda radial del electrón óptico,  $P_\alpha(r)$ , en un estado  $\alpha$  de un sistema atómico inmerso en un plasma con número atómico  $Z$  y  $N$  electrones, se puede expresar siempre de la siguiente forma

$$P_\alpha(r) = P_a^H(r) + \Delta P_\alpha(r) \quad (3.56)$$

siendo  $P_a^H(r)$  la función de onda radial del electrón óptico considerando que se encuentra en un ion hidrogenoide (considerado no aislado), y  $\Delta P_\alpha(r)$ , la diferencia de la anterior con la real,  $P_\alpha(r)$ .

La función de carga del electrón óptico se puede expresar en función de su densidad de carga  $\rho_{eo}$  teniendo en cuenta la ecuación de Poisson, que lleva a

$$\nabla^2 U_{eo}(r) = -4\pi\rho_{eo}(r) \Rightarrow \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rU_{eo}(r)) = -4\pi\rho_{eo}(r) \Rightarrow \frac{d^2}{dr^2} (Z_{eo}(r)) = -4\pi r \rho_{eo}(r) \quad (3.57)$$

con lo que integrando dos veces se tiene

$$Z_{eo}(r) = \iint 4\pi r \rho_{eo}(r) dr + D_1 r + D_2 \quad (3.58)$$

siendo  $D_1$  y  $D_2$  constantes arbitrarias a determinar a partir de las condiciones de contorno impuestas sobre  $Z_{eo}$ . Además la densidad de carga promediada esféricamente viene dada en función de la función de onda radial de dicho electrón como (Slater, 1956)

$$\rho_{eo}(r) = -\frac{P_\alpha^2(r)}{4\pi r^2} \quad (3.59)$$

con lo que la función de carga queda

$$Z_{eo}(r) = - \iint \frac{P_{\alpha}^2(r)}{r} dr + D_1 r + D_2 \quad (3.60)$$

Teniendo en cuenta las ecuaciones (3.56) y (3.60), la función de carga del electrón óptico de un sistema no hidrogenoide se puede escribir como

$$Z_{eo}(r) = Z_{eo}^H(r) + \Delta Z_{eo}^H(r) \quad (3.61)$$

donde

$$\begin{aligned} Z_{eo}^H(r) &= - \iint \frac{P_{\alpha}^{H2}(r)}{r} dr + D_1 r + D_2 \\ \Delta Z_{eo}^H(r) &= - \iint \frac{\Delta P_{\alpha}^2(r)}{r} dr - \iint \frac{P_{\alpha}^H \Delta P_{\alpha}(r)}{r} dr \end{aligned} \quad (3.62)$$

Introduciendo la relación (3.60) en la ecuación (3.49) obtenemos

$$Z_{ef}(r) = Z_{N-1}(r) + C^H e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^{\infty} e^{-a|s-r|} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}^H(s)) ds + \Delta^H(r) \quad (3.63)$$

donde

$$\begin{aligned} C^H &= \frac{1}{2} a \int_0^{\infty} e^{-as} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}^H(s)) ds \\ \Delta^H(r) &= \left[ \frac{1}{2} a \int_0^{\infty} e^{-as} \Delta Z_{eo}^H(s) ds - \frac{1}{2} a \int_0^{\infty} e^{-a|s-r|} \Delta Z_{eo}^H(s) ds \right] \end{aligned} \quad (3.64)$$

Despreciado  $\Delta^H(r)$  frente al resto de términos en la ecuación (3.63), que equivale a tomar  $\Delta P_{\alpha} = 0$  y por tanto modelar la función de onda del electrón óptico con una función de onda hidrogenoide, obtenemos una solución aproximada de la ecuación diferencial (3.8) que llamaremos solución en la aproximación de electrón óptico hidrogenoide, y que viene dada por



$$Z_{ef}(r) \approx Z_{ef}^H(r) \equiv Z_{N-1}(r) + C^H e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} (Z_{N-1}(s) + Z_{eo}^H(s)) ds \quad (3.65)$$

### 3.3.2- Aproximación de electrón óptico asintótico.

Después de realizar algunas operaciones inmediatas podemos expresar (3.44) como

$$Z_{ef}(r) = Z_{N-1}(r) - Z_{eo}(\infty) + C^A e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} Z_{N-1}(s) ds + \Delta^A(r) \quad (3.66)$$

donde

$$\begin{aligned} C^A &= Z_{eo}(\infty) + \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} Z_{N-1}(s) ds \\ \Delta^A(r) &= \left[ \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} \tilde{Z}_{eo}(s) ds - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} \tilde{Z}_{eo}(s) ds \right] \end{aligned} \quad (3.67)$$

y la función  $\tilde{Z}_{eo}$  viene dada por

$$\tilde{Z}_{eo}(r) = Z_{eo}(r) - Z_{eo}(\infty) \quad (3.68)$$

Despreciando  $\Delta^A$  en la ecuación (3.66), que equivale a despreciar  $\tilde{Z}_{eo}(r)$  frente a  $Z_{N-1}(r)$ , obtenemos una nueva solución aproximada de la ecuación diferencial (3.8) que llamaremos solución en la aproximación de electrón óptico asintótico. Por lo tanto en esta aproximación la función de carga efectiva queda como

$$Z_{ef}(r) \approx Z_{ef}^A \equiv Z_{N-1}(r) - Z_{eo}(\infty) + C^A e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} Z_{N-1}(s) ds \quad (3.69)$$

### 3.3.3.- Aproximación de orden cero.

A partir del conocimiento de expresiones analíticas de las funciones de carga  $Z_{N-1}(r)$  y  $Z_{eo}(r)$  podríamos obtener una expresión analítica de la función de carga efectiva  $Z_{ef}(r)$ , y por tanto del potencial efectivo  $U_{ef}(r)$ , sin más que introducir las dos primeras en la ecuación (3.49). Sin embargo las expresiones analíticas existentes en la bibliografía de  $Z_{N-1}(r)$  y  $Z_{eo}(r)$ , en general no consideran los efectos del plasma, por lo que es conveniente hacer la siguiente consideración

$$\begin{aligned} Z_{N-1}(r) &= Z_{N-1}^0(r) + \Delta Z_{N-1}(r) \\ Z_{eo}(r) &= Z_{eo}^0(r) + \Delta Z_{eo}(r) \end{aligned} \quad (3.70)$$

donde  $Z_{N-1}^0(r)$  y  $Z_{eo}^0(r)$  simbolizan las funciones de carga en situación aislada y  $Z_{N-1}(r)$  y  $Z_{eo}(r)$  en situación no aislada. Pues bien, si introducimos (3.70) en (3.49) obtenemos

$$Z_{ef}(r) = Z_{N-1}^0(r) + C^0 e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} (Z_{N-1}^0(s) + Z_{eo}^0(s)) ds + \Delta Z_{ef}(r) \quad (3.71)$$

donde

$$\begin{cases} C^0 = \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} (Z_{N-1}^0(s) + Z_{eo}^0(s)) ds \\ \Delta Z_{ef}(r) = \Delta Z_{N-1}(r) + \left[ \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} (\Delta Z_{N-1}(s) + \Delta Z_{eo}(s)) ds \right] e^{-ar} - \\ \quad - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} (\Delta Z_{N-1}(s) + \Delta Z_{eo}(s)) ds \end{cases} \quad (3.72)$$

Si despreciamos  $\Delta Z_{ef}$  obtenemos la expresión denominada función de carga efectiva en la aproximación de orden cero  $Z_{ef}^0(r)$ , que viene dada por

$$Z_{ef}^0(r) = Z_{N-1}^0(r) + C^0 e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} (Z_{N-1}^0(s) + Z_{eo}^0(s)) ds \quad (3.73)$$

Ahora podemos aplicar las aproximaciones de electrón óptico hidrogenoide y asintótico, descritas en los apartados 3.3.1 y 3.3.2 respectivamente, a la función de carga efectiva en aproximación de orden cero dada por la expresión anterior. Para esto consideramos las siguientes relaciones  $Z_{eo}^0(r) = Z_{eo}^{H0} + \Delta Z_{eo}^{H0}$  y  $Z_{ef}^0(r) = Z_{ef}^0(\infty) + Z_{ef}^0(r)$ . Introduciendo la primera en (3.73) y despreciando los términos con  $\Delta Z_{eo}^{H0}$  obtenemos la aproximación de orden cero con electrón óptico hidrogenoide,  $Z_{ef}^{H0}$ , dada por

$$Z_{ef}^{H0}(r) = Z_{N-1}^0(r) + C^{H0} e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} (Z_{N-1}^0(s) + Z_e^{H0}(s)) ds \quad (3.74)$$

donde

$$C^{H0} = \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} (Z_{N-1}^0(s) + Z_{eo}^{H0}(s)) ds$$

$$\Delta Z_{eo}^{H0}(r) = \left[ \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} \Delta Z_{eo}^{H0}(s) ds - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} \Delta Z_{eo}^{H0}(s) ds \right] \quad (3.75)$$

Si bien bajo algunas situaciones podrá aproximarse la función de onda del electrón óptico a la hidrogenoide, en otras no. Sin embargo sabemos de los modelos hidrogenoides apantallados para átomos multielectrónicos (More, 1982) que modificando adecuadamente la carga nuclear en la función de onda hidrogenoide (es decir, sustituyendo la carga nuclear por una carga efectiva que depende del nivel y que es proporcionada por diversos modelos hidrogenoides apantallados), se puede reproducir la función de onda de un nivel de un ion multielectrónico. Por tanto la expresión que obtengamos para la función de carga efectiva en la aproximación de orden cero con electrón óptico hidrogenoide, y en concreto para la función de carga del propio electrón óptico, puede ser considerada como una expresión analítica

satisfactoria que es susceptible de ser mejorada simplemente sustituyendo la carga del ion por una carga efectiva para cada nivel.

Introduciendo la segunda relación ( $Z_{eo}^0(r) = Z_{eo}^0(\infty) + \tilde{Z}_{eo}^0(r)$ ) y despreciando los términos con  $\tilde{Z}_{eo}^0(r)$ , obtenemos la función de carga efectiva en la aproximación de orden cero con electrón óptico asintótico,  $Z_{ef}^{A0}$ , dada por

$$Z_{ef}^{A0} = Z_{N-1}^0(r) - Z_e(\infty) + C^{A0} e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} Z_{N-1}^0(s) ds \quad (3.76)$$

donde

$$\begin{aligned} C^{A0} &= Z_{eo}(\infty) + \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} Z_{N-1}^0(s) ds \\ \Delta^{A0}(r) &= \left[ \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} \tilde{Z}_{eo}^0(s) ds - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} \tilde{Z}_{eo}^0(s) ds \right] \end{aligned} \quad (3.77)$$

donde hemos considerado que  $Z_{eo}^0(\infty) = Z_{eo}(\infty)$ . Esta última aproximación es la que utilizaremos en esta tesis para obtener el potencial efectivo analítico a partir de uno de átomo aislado (Martel, 1995, 1997), y un estudio de este potencial se hará en el siguiente capítulo.

En el apéndice A3 se construye la función de carga efectiva del electrón óptico en la aproximación de orden cero con electrón óptico hidrogenoide, y por tanto queda determinada  $\tilde{Z}_{eo}^0$ . Las condiciones de contorno impuestas a  $Z_{eo}^0$ , dan lugar a que esta aproximación esté siempre justificada a cortas y largas distancias del núcleo. En efecto, para  $r \rightarrow 0$  se tiene  $Z_{eo}^0(r) \rightarrow 0$  y entonces  $Z_{N-1}^0(r) + Z_{eo}^0(r) \approx Z_{N-1}^0(r)$ ; y para  $r \rightarrow \infty$  se tiene  $Z_{eo}^0(r) \rightarrow Z_{eo}^0(\infty)$  por lo que  $Z_{N-1}^0(r) + Z_{eo}^0(r) \approx Z_{N-1}^0(r) + Z_{eo}^0(\infty)$ , lo que justifica que no aparezca

### 3.4.- Aproximación analítica de orden cero con electrón óptico asintótico.

Como hemos visto, la aproximación de orden cero con electrón óptico asintótico consiste en tomar las funciones de carga correspondientes a la situación aisladas tanto para el core como para el electrón óptico, y además considerar únicamente el comportamiento en el infinito para la función de carga del electrón óptico. Nos ocuparemos en este apartado de analizar dicha aproximación para el caso en el que la función de carga del core en situación aislada venga dada por una expresión del tipo

$$Z_{N-1}^0(r) = Z - N + I + \sum_{n=1}^{n^*} N_n P_n^m(r) e^{-a_n r} \quad (3.78)$$

donde  $N_n$  es el número de ocupación de la capa con número cuántico principal  $n$ ,  $n^*$  es el número cuántico principal de la última capa ocupada,  $a_n$  es un parámetro asociado a la capa  $n$  (que según sea el potencial analítico aislado elegido habrá sido obtenido por diferentes métodos), y por último,  $P_n^m$  es un polinomio de orden  $m$  asociado a la capa  $n$  y viene dado por

$$P_n^m(r) = \sum_{i=0}^m b_{ni} r^i \quad (3.79)$$

donde los  $b_{ni}$  son también parámetros asociados a la capa  $n$  con la condición de que para todas las capas se cumple que  $b_{n0} = 1$ .

Haber seleccionado una expresión de este tipo para la función de carga del core corresponde al hecho de que en la bibliografía existe un gran número de potenciales que son un caso particular del dado por (3.83) y (3.84), tal y como mostramos en el capítulo 2 de esta tesis.

Introduciendo la expresión (3.78) en la ecuación (3.76), que corresponde con el potencial en aproximación de orden cero con electrón óptico asintótico, y realizando las integrales oportunas, nos queda (ver apéndice 1)

$$Z_{ef}^{AO}(r) = \left[ Z - N + \frac{1}{2} a \sum_{n=1}^{n^*} N_n Q_n^m(0) \right] e^{-ar} + \sum_{n=1}^{n^*} N_n \left[ P_n^m(r) - \frac{1}{2} a Q_n^m(r) \right] e^{-a_n r} + I \quad (3.80)$$

con

$$Q_n^m(r) = \sum_{k=0}^m \sum_{i=0}^k b_{nk} \frac{k!}{(k-i)!} \frac{(a_n - a)^{i+1} - (a_n + a)^{i+1}}{(a_n^2 - a^2)^{i+1}} r^{k-i} \quad (3.81)$$

La función de carga que se ha obtenido presenta diferencias importantes respecto de las que se obtienen utilizando los modelos de potencial no aislado propuestos por F.J. Roger (1981) y C. Rouse (1971). Para una función de carga aislada dada por (3.78), los modelos mencionados anteriormente darían lugar respectivamente a las siguientes funciones de carga efectiva

$$Z_{ef}^R(r) = [Z - N + I] e^{-ar} + \sum_{n=1}^{n^*} N_n P_n^m(r) e^{-a_n r} \quad (3.82)$$

$$Z_{ef}^C(r) = \left[ Z - N + I + \sum_{n=1}^{n^*} N_n P_n^m(r) e^{-a_n r} \right] e^{-ar} \quad (3.83)$$

donde hemos denotado por  $Z_{ef}^R$  a la función de carga efectiva obtenida siguiendo el método de introducir los efectos de densidad y temperatura propuesto por F.J. Roger, y por  $Z_{ef}^C$  a la obtenida según el método de C. Rouse. Como se vio en el capítulo 2 ambos métodos consisten en considerar a la exponencial  $e^{-ar}$  como función correctora (o de apantallamiento) que introduce los efectos de densidad y temperatura dentro de la aproximación de orden cero, si bien para F.J. Roger la corrección sólo afecta a la carga efectiva del ion aislado ( $Z-N+I$ ), mientras que para C. Rouse afecta por igual a todos los términos de la función de carga aislada.

La primera diferencia que podemos destacar entre las distintas funciones de carga efectivas es que mientras los efectos de densidad y temperatura en (3.81) y (3.82) están introducidos a través de la función exponencial  $e^{-ar}$ , en la función de carga efectiva (3.85) además aparece una función nueva,  $Q_n^m(r)$ , que depende del parámetro  $a$  y además de los parámetros  $a_n$  y  $b_n$  de la función de carga del core aislado.

Por otro lado, las tres funciones de carga no aisladas dadas por las ecuaciones (3.79), (3.81) y (3.82) tienen un comportamiento asintótico diferente al que tiene la función de carga aislada de la que proceden, es decir, a la dada por las expresiones (3.77) y (3.78). Para el potencial efectivo obtenido a partir de la función de carga efectiva no aislada dada por (3.79) y (3.80),  $U_{ef}^{A0} (= -rZ_{ef}^{A0})$ , que se obtiene por el método propuesto en esta memoria y expuesto en el apartado 3.3.3., el comportamiento asintótico es de tipo coulombiano, al igual que en el caso aislado, si bien en el caso aislado este es de la forma  $-(Z - N + I)/r$  y en el caso no aislado es de la forma  $Z_{eo}(\infty)/r$ , como se obtuvo en (3.46). Para los otros dos potenciales el comportamiento a largas distancias es exponencial ( $e^{-ar}$ ) aunque el potencial que se deriva de (3.83),  $U_{ef}^C (= -rZ_{ef}^C)$ , va a cero a largas distancias más rápido que el que se obtiene de (3.82),  $U_{ef}^R (= -rZ_{ef}^R)$

Podemos establecer más diferencias si consideramos el comportamiento de estos potenciales cerca del origen. Para el potencial no aislado dado en (3.80), el comportamiento cerca del origen viene dado por la expresión (3.50), pero como estamos considerando la aproximación de orden cero con electrón óptico asintótico, dicha expresión queda como

$$Z_{ef}^{A0}(r) = Z_{N-1}^0(0) + (Z_{N-1}'(0) - aC^{A0})r + O(r^\alpha); \quad \alpha > 1 \quad (3.84)$$

con

$$C^{A0} = Z_e(\infty) + \frac{1}{2}a \int_0^\infty e^{-as} Z_{N-1}^0(s) ds \quad (3.85)$$

Así que introduciendo la función de carga del core  $Z_{N-1}^0(r)$  dada por (3.78) y (3.79), obtenemos el siguiente comportamiento cerca del origen para (3.80)

$$Z_{ef}^{A0}(r) \approx Z + \left( \sum_{n=1}^{n^*} N_n (b_{n1} - a_n) \right) r - a(Z - N)r - \frac{1}{2}a \sum_{n=1}^{n^*} N_n (a - a_n) Q_n^m(0)r - \frac{1}{2}a \sum_{n=1}^{n^*} N_n \bar{Q}_n^m(0)r \quad (3.86)$$

donde  $Q_n^m(0)$  y  $\bar{Q}_n^m(0)$  vienen dados por

$$Q_n^m(0) = \sum_{k=0}^m b_{nk} k \frac{(a_n - a)^{k+1} - (a_n + a)^{k+1}}{(a_n^2 - a^2)^{k+1}} \quad (3.87)$$

$$\bar{Q}_n^m(0) = \sum_{k=0}^m b_{nk+1} (k+1) \frac{(a_n - a)^{k+1} - (a_n + a)^{k+1}}{(a_n^2 - a^2)^{k+1}} \quad (3.88)$$

Para el potencial de la ec (3.82) o tipo Roger se tiene a distancias próximas al origen

$$Z_{ef}^R(r) \approx Z + \left( \sum_{n=1}^{n^*} N_n (b_{n1} - a_n) \right) r - a(Z - N + 1)r \quad (3.89)$$

y finalmente, para el potencial dado en (3.83) o tipo Rouse, este comportamiento viene dado por

$$Z_{ef}^C(r) \approx Z + \left( \sum_{n=1}^{n^*} N_n (b_{n1} - a_n) \right) r - aZr \quad (3.90)$$

El comportamiento cerca del origen de los dos últimos potenciales lo hemos determinado de forma similar a como lo hicimos para determinar la constante  $A_2$  de (3.44), es decir, determinando  $k$  y  $p$  del límite



$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{Z_{ef}(r) - Z}{kr^p} = 1 \quad (3.91)$$

En las tres ecuaciones que dan cuenta del comportamiento de los potenciales cerca del origen (la (3.86) para  $Z_{ef}^{A0}$ , la (3.89) para  $Z_{ef}^R$  y la (3.90) para  $Z_{ef}^C$ ) los dos primeros términos representan la contribución del núcleo y de los electrones ligados del core del ion al potencial cerca del origen, y como vemos coinciden, por proceder los tres del mismo potencial aislado. El resto de términos (para los potenciales dados por (3.89) y (3.90) sólo existe otro término) corresponden a la contribución de las partículas del plasma y es en donde se aprecian diferencias. Así el tercer término en el potencial efectivo tipo Rouse derivado de (3.89),  $aZ$ , da lugar a una variación de la pendiente de la función de carga efectiva cerca del origen que depende de las condiciones del plasma a través del parámetro  $a$  y del ion a través del número atómico  $Z$ . Como vemos, este cambio de pendiente no depende del número de electrones, y por tanto es el mismo para cualquier tipo de ion de una misma especie iónica, es decir, no distingue entre los diferentes estados de ionización del átomo. Para el potencial efectivo tipo Roger derivado de (3.90), el tercer término,  $a(Z-N+1)=a(Z-N)+a$ , también produce un cambio en la pendiente de la correspondiente función de carga, pero en este caso, sí tiene en cuenta el estado de ionización a través del número  $N$  de electrones del ion. Para este potencial, además aparece una cantidad que es independiente de la especie iónica y de su estado de ionización, que depende sólo de las condiciones del plasma. Por último para el potencial efectivo obtenido en esta memoria a partir de (3.83) el tercer término,  $a(Z-N)$ , produce un desplazamiento que distingue entre tipo de especie iónica y de estado de ionización igual al del potencial anterior, pero se diferencia del mismo, en que no produce el desplazamiento constante  $a$ . Por tanto éste término no corrige cerca del origen para el caso de átomos neutros.

También vemos en el potencial de esta memoria que existen dos términos más de corrección atribuibles al plasma, ya que dependen del radio inverso de Debye,

siendo esta dependencia no lineal como antes. Presentan una característica que no se da en los otros dos potenciales y es que estas correcciones tienen una dependencia con los parámetros del potencial aislado (los parámetros  $a_n$  y  $b_n$ ), con lo que estas correcciones dependen del potencial aislado del que se parta. Por tanto, se pueden considerar como una corrección que depende de la estructura del ion, y estos términos si que introducen correcciones para los átomos neutros.

### 3.5. Aproximación analítica de orden cero con electrón óptico hidrogenoide.

En el apéndice 2 hemos determinado la función de carga efectiva en aproximación de orden cero con electrón óptico hidrogenoide (dada por (3.74)) utilizando la función de onda hidrogenoide no relativista dada por (A2.5). Se obtiene que

$$Z_{ef}^{H0}(r) = Z_{ef}^{A0}(r) + \frac{1}{2} aZ \left[ \frac{S_{nl}^-(0)}{Z_n - a} - \frac{S_{nl}^+(0)}{Z_n + a} \right] e^{-ar} + \frac{1}{2} aZ \left[ \frac{S_{nl}^+(r)}{Z_n + a} - \frac{S_{nl}^-(r)}{Z_n - a} \right] e^{-Z_n r} \quad (3.92)$$

donde  $Z_{ef}^{A0}$  es la función de carga en la aproximación de orden cero asintótica,  $S_{nl}^{\pm}$  son polinomios dados en la ecuación (A2.29) y sólo dependen de los números cuánticos, de la carga nuclear y del radio inverso de Debye, y por último,  $Z_n$  que está dado por  $Z_n = 2Z/n$ . Como se observa, esta nueva carga efectiva depende de los números cuánticos del electrón óptico, a través de los términos de la ecuación anterior en los que aparecen los polinomios  $S_{nl}^{\pm}$ .

En esta memoria utilizaremos la aproximación de orden cero con electrón óptico asintótico para generar el potencial efectivo, si bien, en el apéndice 2 presentamos una expresión analítica de la corrección a la energía que suponen los dos

últimos términos de (3.92), obtenida mediante el primer orden de la teoría de perturbaciones.

### 3.6 Propuesta de un potencial efectivo analítico para iones en plasma.

Hasta aquí hemos visto como a partir de expresiones analíticas de  $Z_{N-1}$  y  $Z_{eo}$  en situación aislada podemos construir un potencial efectivo que contemple los efectos del plasma. Básicamente hemos estudiado la aproximación que denominamos de orden cero con electrón óptico asintótico para el caso de una expresión analítica de  $Z_{N-1}$  que abarca un gran número de potenciales de la bibliografía. Esto nos ha permitido estudiar el potencial efectivo que vamos a proponer a cortas y largas distancias. También hemos visto como la  $Z_{ef}^{H0}$  dada por (3.92) se puede considerar como una corrección a  $Z_{ef}^{A0}$  e incluso en el apéndice 2 damos una expresión analítica de cual sería la corrección que sufriría la energía de nivel determinadas con el potencial derivado de  $Z_{ef}^{H0}$ . Ahora bien, a la hora de calcular las propiedades atómicas no sólo debemos optar por  $Z_{ef}^{H0}$  o  $Z_{ef}^{A0}$ , lo que supone optar por un  $Z_{eo}$ , sino que además debemos hacer una elección concreta del potencial atómico aislado, es decir elegir una expresión analítica de  $Z_{N-1}^0$ .

En este trabajo hemos optado por el siguiente potencial para iones aislados que depende a lo sumo de tres parámetros (Martel, 1995)

$$U_{N-1}^0(r) = -\frac{Z_{N-1}^0(r)}{r} = -\frac{1}{r} \left\{ (N-1) \left[ \begin{array}{ll} e^{-a_1 r^{a_3}} & \text{si } N \geq 12 \\ (1-a_2 r)e^{-a_1 r} & \text{si } 8 \leq N \leq 11 \text{ o } N = 2,3 \\ e^{-a_1 r} & \text{si } 4 \leq N \leq 7 \end{array} \right] + Z - N + 1 \right\} \quad (3.93)$$

Los parámetros de este potencial fueron ajustados para las series isoelectrónicas comprendidas entre las del helio y uranio a polinomios de cuarto orden en  $Z$  (Martel, 1997) y pueden ser determinadas a partir de los coeficientes que reproducimos en el apéndice 3. El comportamiento de este potencial a cortas distancias del núcleo viene dado por (Martel, 1995) para  $N \geq 12$  por

$$U_{N-1}^0(r) \cong -\frac{Z}{r} + a_1(N-1)\frac{1}{r^{1-a_3}} \quad (3.94)$$

y para  $N \leq 11$  por

$$U_{N-1}^0(r) \cong -\frac{Z}{r} + (a_1 + a_2)(N-1) \quad (3.95)$$

donde para el caso  $4 \leq N \leq 7$  basta con hacer  $a_2 = 0$  en la expresión anterior. Para largas distancias en comportamiento viene dado, independientemente del número de electrones del ion, por

$$U_{N-1}^0(r) = -\frac{(Z - N + 1)}{r} \quad (3.96)$$

Así, el potencial que proponemos en esta tesis será el que se obtiene a partir de  $Z_{ef}^{AO}$  con la  $Z_{N-1}^0$  de (3.93). Este viene dado por

$$\begin{aligned} U_{ef}^{AO}(r) &= -\frac{Z_{ef}^{AO}(r)}{r} = \\ &= -\frac{1}{r} \left\{ [Z - N + a^2(N-1)C(a_1, a_2)]e^{-ar} + (N-1)[1 - a^2\chi(r)]e^{-a_1r} + 1 \right\} \end{aligned} \quad (3.97)$$

siendo

$$C(a_1, a_2) = \frac{2a_1a_2}{(a_1^2 - a^2)^2} - \frac{1}{a_1^2 - a^2} \quad (3.98)$$

$$\chi(r) = C(a_1, a_2) + a_2 \left( \frac{1}{a^2} + \frac{1}{a_1^2 - a^2} \right) r \quad (3.99)$$

y con  $a_2 = 0$  para  $4 \leq N \leq 7$ . Y para iones con  $N \geq 12$

$$U_{ef}^{A0}(r) = -\frac{Z_{ef}^{A0}(r)}{r} = -\frac{1}{r} \left\{ \left[ Z - N - \frac{1}{2} a (N-1) \eta(0) \right] e^{-ar} + (N-1) \left[ e^{-a_1 r^{a_3}} - \frac{1}{2} a \eta(r) \right] + 1 \right\} \quad (3.100)$$

con

$$\eta(r) = \int_0^\infty e^{-a|s-r|} e^{-a_1 s^{a_3}} ds \quad (3.101)$$

Esta integral se puede resolver numéricamente pero es deseable obtener una expresión analítica de la misma. Con este fin hemos obtenido la siguiente expresión analítica aproximada de la integral (ver apéndice 4)

$$\eta(r) = \frac{p_1 e^{-ar}}{(a_1 - a)^{p_1}} \gamma(p_1, a_1 r^{a_3} - ar) + \frac{p_2 e^{-ar}}{(a_1 + a)^{p_2}} \Gamma(p_2, a_1 r^{a_3} + ar) \quad (3.102)$$

siendo

$$p_1 = \frac{a_1 - a}{a_1 a_3 - a}, \quad y \quad p_2 = \frac{a_1 + a}{a_1 a_3 + a} \quad (3.103)$$

$\gamma(c, x)$  y  $\Gamma(c, x)$  son las funciones gamma incompleta dadas por

$$\gamma(c, x) = \int_0^x s^{c-1} e^{-s} ds; \quad \Gamma(c, x) = \int_x^\infty s^{c-1} e^{-s} ds = \Gamma(c) - \gamma(c, x) \quad (3.104)$$

El potencial efectivo propuesto para iones con menos de 12 electrones (el dado por (3.97)) ya fue estudiado a cortas distancias en el apartado 3.4 pues la  $Z_{N-1}^0$  de la que deriva (3.93) en este caso no es más que un caso particular de (3.78) y (3.79). Así para  $4 \leq N \leq 7$  correspondería al caso que  $b_{ni} = 0$  si  $i \neq 0$  y  $n^* = 1$ , y para  $8 \leq N \leq 11$  o  $N = 2, 3$  correspondería al caso que  $b_{1l} = -a_2$  y  $b_{ni} = 0$  para  $i \neq 0, 1$ . Por tanto para  $N \leq 11$ , el comportamiento a cortas distancias viene dado por

$$U_{ef}(r) = -\frac{Z}{r} + (N-1)(a_1 + a_2) + a(Z-N) + a^2(N-1) \left[ \frac{a_2}{(a_1^2 - a^2)} - a_1 C(a_1 a_2) \right] + a^3(N-1)C(a_1 a_2) \quad (3.105)$$

Para el potencial efectivo que proponemos para iones con 12 o más electrones (dado por (3.100)) tendremos en cuenta (3.84) que da el comportamiento a cortas distancia de la función de carga efectiva en aproximación de orden cero con electrón óptico asintótico. Introduciendo en dicha ecuación la (3.93), correspondiendo al caso  $N \geq 12$ , se obtiene

$$U_{ef}(r) = -\frac{Z}{r} + (N-1)a_1 r^{a_3-1} - a(Z-N) - a^2(N-1)\eta(0) \quad (3.106)$$



## Capítulo 4

### Estudio del potencial efectivo analítico no aislado propuesto.

---

#### 4.1.- Introducción.

En este capítulo haremos un análisis de la influencia que ejerce el plasma sobre distintas cantidades atómicas cuando se considera el modelo propuesto en el capítulo anterior para la interacción entre el átomo y el plasma, es decir, cuando tomamos la aproximación de orden cero con electrón óptico asintótico,  $Z_{ef}^{A0}$ , para la función de carga efectiva. Además, todos los cálculos han sido realizados tomando como función de carga del core en situación aislada,  $Z_{N-1}^0$ , la dada por la ecuación (3.93) (Martel *et al.* 1995). Comenzaremos el capítulo exponiendo el método utilizado para la resolución numérica de la ecuación de Dirac, de donde obtendremos las energías monoeléctricas, las correspondientes funciones de onda y las energías totales. A continuación haremos una breve descripción sobre el proceso de absorción de línea, y en el procedimiento seguido para el cálculo de la fuerza de oscilador.

Como se vio en el capítulo anterior, la función de carga efectiva propuesta viene dada por las ecuaciones (3.93-3.104), y es la que utilizaremos para calcular en situación no



aislada las funciones de cargas efectivas, las energías totales, las energías de nivel, las energías de transición, las funciones de onda y las fuerzas de oscilador. El objetivo es poder describir la influencia del plasma sobre las cantidades mencionadas, buscar regularidades en el comportamiento de las mismas en función de diferentes parámetros (radio inverso de Debye, ionicidad, números cuánticos,...), y comparar nuestro modelo de interacción con otros modelos de interacción propuestos por otros autores. En concreto, compararemos nuestra función de carga efectiva con la obtenida a partir del modelo de interacción propuesto por Roger (1981), a la que denominaremos  $Z_{ef}^R$ , y con la obtenida a partir del modelo propuesto por Rouse (1969), a la que denominaremos  $Z_{ef}^C$ . En ambos casos, al igual que con  $Z_{ef}^{AO}$ , se ha utilizado la función de carga del core aislada proporcionada por Martel (1995) como potencial aislado de partida. Las funciones de carga efectivas  $Z_{ef}^{AO}$ ,  $Z_{ef}^R$  y  $Z_{ef}^C$  tienen en común que aparece la exponencial de Debye para introducir los efectos de densidad y temperatura, pero en los tres casos, a partir de consideraciones diferentes.

## 4.2.- Resolución numérica de la ecuación radial de Dirac. Cálculo de las energías y funciones de onda monoeléctricas.

La ecuación de Dirac para un electrón que está sometido a un potencial efectivo  $U_{ef}(\vec{r})$ , el cual puede referirse a un sistema atómico aislado o no aislado, viene dado por

$$\left[ c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + c^2\beta + U_{ef}(\vec{r}) \right] \psi_k(r) = E_k \psi_k(r) \quad (4.1)$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz y es igual a 137.036 en unidades atómicas,  $\vec{\alpha}$  y  $\beta$  son las matrices de Dirac dadas por

$$\bar{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

siendo  $\vec{\sigma}$  es un vector cuyas componentes son las matrices de Pauli dadas por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

e  $I$  es la matriz unidad 2x2. Además en (4.1)  $\vec{p}$  es el operador momento lineal,  $E_k$  es el autovalor de la energía del nivel monoeléctrico  $k$  y  $\psi_k$  la correspondiente autofunción, que en el caso relativista es un biespinor o vector de cuatro componentes, dos asociadas a un estado de espín y dos asociadas al otro. Si consideramos potenciales efectivos estáticos y centrales entonces la función de onda solución de esta ecuación es autofunción del operador momento angular total, de su tercera componente, y del operador paridad (Messiah, 1975). Por tanto la función de onda puede expresarse de la siguiente forma

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} i^l A(r) \Omega_{ljm}(\theta, \varphi) \\ i^{l'} B(r) \Omega_{l'jm}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

donde  $A$  y  $B$  son dos funciones a determinar de la coordenada radial esférica  $r$  y reciben el nombre de componente mayor y menor respectivamente; las funciones  $\Omega$  dependen de las coordenadas angulares y vienen dadas por

$$\Omega_{ljm}(\theta, \varphi) = \sum_{\mu=\pm 1/2} C(l, 1/2, j | m - \mu, \mu, m) Y_{l, m-\mu}(\theta, \varphi) \chi_{\mu} \quad (4.5)$$

donde  $C$  son los coeficientes de Clebsh-Gordan y  $\chi_{\mu}$  las funciones de espín  $1/2$ , dadas por

$$\chi_{1/2} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad ; \quad \chi_{-1/2} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

Por tanto las funciones  $\Omega$  se construyen acoplando las autofunciones de espín  $1/2$  con los armónicos esféricos de momento cinético  $l$  o  $l'$  dependiendo de que se trate de la componente mayor o menor respectivamente. Además existe la siguiente relación entre los números cuánticos  $j, l, l'$  y  $m$

$$l' = l + s, \quad j = l + \frac{1}{2}s = l' - \frac{1}{2}s \quad (4.7)$$

siendo  $s$  el número cuántico que caracteriza al operador paridad y puede tomar los valores  $\pm 1$ . Por tanto las funciones de onda de la ecuación de Dirac tienen momento angular total, su tercera componente y paridad bien definidas, por lo que depende de estos números cuánticos.

Finalmente introduciendo (4.4) en (4.1) y realizando los cálculos pertinentes se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales acopladas para las funciones radiales

$$\frac{d}{dr} \begin{pmatrix} A(r) \\ B(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\kappa/r & (U_{ef}(r) - E_k - 2c^2)/cs \\ -(U_{ef}(r) - E_k)/cs & \kappa/r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A(r) \\ B(r) \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

Nosotros resolvemos numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales dado por la ecuación anterior para los potenciales analíticos efectivos comentados anteriormente por lo que podemos añadir la dependencia que tiene el potencial con los parámetros del potencial aislado más el parámetro del radio inverso de Debye, que da cuenta de la interacción con el plasma. Entonces

$$U_{ef}(r) \rightarrow U_{ef}(r; \{a_n\}, a) \quad (4.9)$$

Para la resolución numérica utilizamos un método seguido por Liberman (1965; 1971) que comentamos a continuación.

Para un nivel monoeléctrico  $k$  el método comienza seleccionando un valor inicial de la energía,  $E_k$ , comprendido en el intervalo  $[E_m, E_M]$ , donde inicialmente se toma  $[-Z^2/n^2, 10^{-5}]$  (en unidades atómicas). Se calcula el punto clásico de retroceso que será el primer punto de la malla radial que verifique la siguiente condición

$$E_k \leq U_{ef}(r; \{a_n\}, a) - \frac{l(l+1)}{2r^2} \quad (4.10)$$

A continuación se calculan  $A$  y  $B$  integrando la ecuación radial desde el origen (primer punto de la malla radial) hasta el punto clásico de retroceso y se contabiliza el número de nodos de la componente mayor de la función de onda. Se considera que el número de nodos correcto es  $(n-l+1)$ , por lo que si coinciden, se continua calculando el infinito práctico. Éste es el punto de la malla para el cual la función de onda no difiere de cero significativamente, y se estima a través de la siguiente condición

$$(U_{ef}(r; \{a_n\}, a) - E_k) r^2 \cong 75 \quad (4.11)$$

Desde este punto se hace una integración de la ecuación radial hacia dentro hasta el punto clásico de retroceso, en el que se impone continuidad para las funciones de onda radiales  $A$  y  $B$ . Finalmente, estas funciones son aproximadas desde el infinito práctico hasta el último punto de la malla radial, por las proporcionadas por el método WKB no relativista.

En el caso de que el número de nodos de la componente mayor no hubiera sido el correcto, se tomaría un nuevo intervalo de energía en el que buscar el autovalor. Si el número de nodos es menor se toma  $E_m = E_k$  y como nuevo autovalor a la semisuma entre  $E_M$  y el antiguo autovalor. Si el número de nodos de  $A$  es mayor que el debido, se toma  $E_M = E_k$  y como nuevo autovalor la semisuma de  $E_m$  y el

antiguo autovalor. En ambos casos se vuelve a calcular el punto clásico de retroceso y se determinan  $A(r)$  y  $B(r)$  desde el origen hasta dicho punto. Este proceso se repite hasta conseguir una función radial con un número de nodos correcto, y a partir de aquí se procede como hemos descrito anteriormente.

Debido a que el potencial varía rápidamente en la vecindad nuclear, conviene definir una malla radial en la que resolver la ecuación de Dirac que sea muy fina en dicha región. Para ello seleccionamos una malla de tipo exponencial para la coordenada radial esférica  $r$ , es decir  $r \propto C e^x$ , donde  $x$  es una variable discreta construida a partir de un paso constante  $h$  ( $x_i = ih$ ).

Se puede demostrar (Landau y Lifshitz, 1975) que para un potencial atractivo de tipo coulombiano,  $U(r) = -Z/r$ , y para pequeños valores de  $r$  las funciones radiales  $A(r)$  y  $B(r)$  se comportan como  $r^g$ , siendo

$$g = \left[ (j + 1/2)^2 - (Z/c)^2 \right]^{1/2} \quad (4.12)$$

Entonces, podemos suponer que para pequeños valores de  $r$  la solución de la ecuación radial de Dirac se comporta de esta manera y con el fin de obtener mayor precisión a cortas y largas distancias del núcleo resulta conveniente extraer de las funciones de ondas radiales este comportamiento conocido, con lo que, para el caso de la integración de la ecuación radial desde el origen hasta el punto clásico de retroceso realizamos los cambios

$$A(r) = r^g \mathcal{A}(r) \quad \text{y} \quad B(r) = r^g \mathcal{B}(r) \quad (4.13)$$

con lo que la ecuación a resolver será

$$\frac{d}{dr} \begin{pmatrix} \mathcal{A}(r) \\ \mathcal{B}(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(\kappa + g)/r & (U_{ef}(r) - E_k - 2c^2)/cs \\ -(U_{ef}(r) - E_k)/cs & (\kappa - g)/r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A}(r) \\ \mathcal{B}(r) \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

y para el caso de la integración desde el infinito práctico hasta el punto clásico de retroceso realizamos el cambio

$$A(r) = r^{-g} \mathcal{A}(r) \quad \text{y} \quad B(r) = r^{-g} \mathcal{B}(r) \quad (4.15)$$

con lo que la ecuación a resolver es

$$\frac{d}{dr} \begin{pmatrix} \mathcal{A}(r) \\ \mathcal{B}(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(\kappa - g)/r & (U_{ef}(r) - E_k - 2c^2)/cs \\ -(U_{ef}(r) - E_k)/cs & (\kappa + g)/r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{A}(r) \\ \mathcal{B}(r) \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

Para integrar estas ecuaciones se utiliza la fórmula de interpolación de Adams (Abramowitz y Stegun, 1972), dada por

$$\psi_{n+1} = \psi_n + \frac{h}{24} (9\psi'_{n+1} + 19\psi'_n - 5\psi'_{n-1} + \psi'_{n-2}) \quad (4.17)$$

donde  $\psi_i$  es el valor aproximado de  $\psi(r_i)$ , siendo

$$\psi(r_i) = \begin{bmatrix} \mathcal{A}(r_i) \\ \mathcal{B}(r_i) \end{bmatrix} \quad \psi'(r_i) = \frac{d}{dr} \begin{bmatrix} \mathcal{A}(r_i) \\ \mathcal{B}(r_i) \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

Esta fórmula requiere conocer los cinco primeros términos de  $\psi$  y sus derivadas en la malla radial para poder iniciar la integración. Para la integración hacia fuera los cinco primeros términos se obtienen a partir de las soluciones de una ecuación radial construida con el potencial  $-Z/r + U_0$ , siendo  $U_0$  el potencial constante que causan en el origen los electrones del ion, cuando lo consideramos aislado, y en el caso no aislado además representa el potencial en el origen del resto de partículas del plasma. En la integración hacia dentro los cinco primeros términos y sus derivadas se determinan a partir de un método Runge-Kutta de cuarto orden que toma como origen la aproximación WKB no relativista en el primer punto, que en el caso de la integración hacia dentro es el infinito práctico.

Una vez calculadas las energías y funciones de onda de nivel calculamos la energía total  $E$  del ion, mediante la siguiente expresión basada en la Teoría del Funcional de la Densidad (Hohenberg y Kohn, 1964) en la aproximación de Kohn y Sham (1965)

$$E = \sum_k v_k E_k - \int \rho(r) \frac{Z}{r} d\bar{r} + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r)\rho(r')}{|\bar{r} - \bar{r}'|} d\bar{r} d\bar{r}' + E_{xc}[\rho] \quad (4.19)$$

siendo  $\rho$  la densidad de electrones ligados y  $E_{xc}$  la energía de intercambio y correlación. En este trabajo hemos considerado la energía de intercambio y correlación en la aproximación de densidad local que consiste en suponer la siguiente expresión

$$E_{xc}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon^{xc}(\rho(r)) d\bar{r} \quad (4.20)$$

en donde  $\varepsilon^{xc}$  es la contribución de intercambio y correlación a la energía total por electrón en un gas homogéneo de electrones que no interaccionan, de densidad  $\rho$ . Para esta energía de intercambio y correlación por electrón utilizamos la siguiente expresión propuesta por Barat y Hedin (1962)

$$\varepsilon^{xc}(\rho) = -\frac{3}{4\pi r_s \alpha} - c \left[ (1+x^3) \ln(1+1/x) + \frac{1}{2}x - x^2 - \frac{1}{3} \right] \quad (4.21)$$

y donde  $\alpha = (4/9\pi)^{1/3}$ ,  $x = r_s/r_p$  y

$$r_s = \left( \frac{4}{3} \pi \rho(r) \right)^{-1/3} \quad (4.22)$$

y las constantes  $c$  y  $r_p$  valen 0.0333 u.a. y 11.4 respectivamente, valores calculados por Gunnarsson y Lundqvist (1976).

### 4.3-. Emisión de Línea. Energías de transición y fuerzas de oscilador.

Analizaremos el proceso por el cual un átomo que se encuentra en un estado excitado de energía  $E_i$  pasa por medio de una transición radiativa espontánea a otro estado de menor energía  $E_f$ , emitiendo un fotón de energía

$$\Delta E_{if} = h\nu = |E_f - E_i| \quad (4.23)$$

Si la probabilidad por unidad de tiempo de que este proceso suceda es  $a_{if}$  y tenemos en cuenta que para un átomo hay  $2J_f + 1$  estados cuánticos degenerados con energía  $E_f$ , que corresponden a los posibles valores de la tercera componente del momento angular total  $M_f$ , se define la probabilidad total por unidad de tiempo de que un átomo en un estado  $i$  decaiga espontáneamente a uno de los  $2J_f + 1$  estados de energía  $E_f$  (coeficiente de Einstein de emisión espontánea), de la siguiente forma

$$A_{if} = \sum_{M_f} a_{if} = \frac{1}{2J_i + 1} \sum_{M_f, M_i} a_{if} \quad (4.24)$$

es decir, promediamos para los estados iniciales y sumamos para los finales, pues estamos considerando que todas las direcciones en el espacio son equivalentes.

Para determinar esta probabilidad se considera la radiación electromagnética como una perturbación al sistema atómico y se asume la aproximación dipolar eléctrica, aproximación en la cual sólo se considera el primer término del desarrollo multipolar del hamiltoniano de interacción (o sea,  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \approx 1$  donde  $\vec{k}$  es el vector de propagación de la onda electromagnética y  $\vec{r}$  el vector de posición del electrón) y equivale a despreciar las dimensiones del átomo en el proceso. Bajo estas consideraciones el coeficiente de emisión espontánea de Einstein viene dado por (Cowan, 1981; Sobelman, 1992)



$$A_{if} = \frac{8 \Delta E_{if}^2}{c^3} F_{ij} \quad (4.25)$$

donde  $F_{ij}$  es una cantidad adimensional denominada fuerza de oscilador y viene dada por

$$F_{if} = \frac{2 \Delta E_{if}}{3(2J_i + 1)} \sum_{M_f, M_i} \sum_q |\langle \Psi_f | P_q | \Psi_i \rangle|^2 \quad (4.26)$$

siendo  $P_q$  la  $q$ -ésima componente del tensor irreducible de rango unidad del momento dipolar eléctrico, y que expresado en unidades atómicas es

$$P_q = \sum_{i=1}^N r_q(i) \quad (4.27)$$

donde  $N$  es el número de electrones del sistema atómico y  $r_q(i)$  es la  $q$ -ésima componente del tensor irreducible de rango uno que se obtiene cuando se expresa el vector de posición del  $i$ -ésimo electrón en la base esférica correspondiente a un momento angular  $l$ , es decir

$$\begin{aligned} r_1 &= -2^{l/2} (r_x + ir_y) = -2^{l/2} r \sin \theta e^{i\varphi} \\ r_0 &= r_z = r \cos \theta \\ r_{-1} &= -2^{l/2} (r_x - ir_y) = -2^{l/2} r \sin \theta e^{-i\varphi} \end{aligned} \quad (4.28)$$

donde  $r_x$ ,  $r_y$  y  $r_z$  son las coordenadas cartesianas y  $r$ ,  $\theta$  y  $\varphi$  son las coordenadas esféricas.

Además hemos considerado que los estados atómicos son estacionarios, ya que hemos considerado a la radiación como una perturbación sobre un sistema atómico estacionario, así que para un estado  $s$  se tiene

$$\Psi_s(\vec{r}, t) = \Psi_s(\vec{r}) e^{iE_s t/\hbar} \quad (4.29)$$

de modo que si A es un operador, entonces

$$\left| \langle \Psi_f(\vec{r}, t) | A | \Psi_i(\vec{r}, t) \rangle \right|^2 = \left| \langle \Psi_f(\vec{r}) | A | \Psi_i(\vec{r}) \rangle \right|^2 \quad (4.30)$$

Si denotamos a los estados atómicos que intervienen en la transición por  $|\Psi_i\rangle = |\gamma JM\rangle$  y  $|\Psi_f\rangle = |\gamma' J'M'\rangle$ , siendo  $\gamma$  y  $\gamma'$  el resto de números cuánticos de los correspondientes estados atómicos, en virtud del teorema de Wigner-Eckart el elemento de matriz que aparece en (4.26) se puede expresar como

$$\langle \Psi_f | P_q | \Psi_i \rangle = \langle \gamma' J'M' | P_q | \gamma JM \rangle = (-1)^{J'-M'} \begin{Bmatrix} J' & 1 & J \\ -M' & q & M \end{Bmatrix} \langle \gamma' J' || \vec{P} || \gamma J \rangle \quad (4.31)$$

donde en el último miembro de la ecuación anterior se tiene como segundo término el símbolo 3-j, y como tercero, el elemento de matriz reducida del tensor momento dipolar, el cual no depende de las terceras componentes del momento angular total. Considerando ahora las condiciones en las cuales los símbolos 3-j son distintos de cero, obtenemos la siguientes relaciones que indican cuando las transiciones espontáneas son no nulas

$$\begin{aligned} \Delta J = J' - J = 0, \pm 1 \quad \text{con} \quad J + J' \geq 1 \\ \Delta M = M' - M = q = 0, \pm 1 \end{aligned} \quad (4.32)$$

relaciones que reciben el nombre de reglas de selección. Si ahora tenemos en cuenta que se verifica la siguiente regla de suma para los símbolos 3-j,

$$\sum_{M, q, M'} \begin{Bmatrix} J' & 1 & J \\ -M' & q & M \end{Bmatrix}^2 = 1 \quad (4.33)$$

y utilizamos el teorema de Wigner-Eckart para reescribir la fuerza de oscilador, ésta queda como

$$F_{K,K'} = \frac{2\Delta E_{K,K'}}{3(2J+1)} \left| \langle \gamma' J' \| \vec{P} \| \gamma J \rangle \right|^2 \quad (4.34)$$

donde cabe destacar que la fuerza de oscilador es independiente de las terceras componentes del momento angular total de los estados atómicos. Al cuadrado del módulo del elemento de matriz reducida se le denomina fuerza de línea dipolar eléctrica.

Se puede demostrar (Cowan, 1981; Sobelman, 1992) que la fuerza de oscilador dipolar eléctrica dada por la expresión (4.26) se puede poner como una serie de factores que multiplican a la siguiente fuerza de oscilador de tipo hidrogenoide

$$f_{if} = \frac{2\Delta E_{if}}{3(2j+1)} \sum_{m,m'} \left| \langle \psi_{f,m'} | \vec{r} | \psi_{i,m} \rangle \right|^2 \quad (4.35)$$

En esta expresión los números cuánticos se refieren a las subcapas entre las que tiene lugar la transición ( $i(nlj) \rightarrow f(n'l'j')$ ), por tanto, a partir de ahora nos referiremos a  $i$  y  $f$  como subcapas y no como estados atómicos), las funciones de ondas son los orbitales monoeléctronicos de las subcapas implicadas en la transición, y por último,  $m$  y  $m'$  son los números cuánticos que dan cuenta de las terceras componentes de  $j$  y  $j'$  respectivamente.

En este trabajo calcularemos estas fuerzas de oscilador dipolares eléctricas de tipo hidrogenoide considerando como funciones de ondas monoeléctronicas las que resultan de la resolución de la ecuación de Dirac dada en (4.4). Expresando el vector de posición como tensor irreducible de orden uno, teniendo en cuenta (4.28) y la definición de los armónicos esféricos que nos llevaría a  $r_q = r(4\pi/3)^{1/2} Y_{1,q}(\theta, \varphi)$  con  $q=0,1,-1$ , se puede llevar a cabo el cálculo del elemento de matriz que aparece en (4.35) (Bransden, 1983), el cual está sometido las reglas de selección entre los

números cuánticos de los orbitales monoelectrónicos que intervienen en la transición y que damos a continuación

$$\Delta\tilde{l} = \Delta l + \Delta s \quad (4.36)$$

$$\Delta s = s' - s = 0, \pm 2 \quad (4.37)$$

$$\Delta j = j' - j = \Delta l + (1/2)\Delta s = 0, \pm 1 \quad (4.38)$$

donde  $\tilde{l} = l + s$ . En la siguiente tabla mostramos algunos valores de las cantidades  $\Delta l$ ,  $\Delta s$ ,  $\Delta\tilde{l}$  y  $\Delta j$  e indicamos cuando la transición es permitida o no según las reglas dadas en las relaciones anteriores.

$\Delta l$	$\Delta s$	$\Delta\tilde{l}$	$\Delta j$	Transición
$\pm 1$	$0$	$\pm 1$	$\pm 1$	permitida
$1$	$2$	$3$	$2$	prohibida
$-1$	$2$	$1$	$0$	permitida
$1$	$-2$	$-1$	$0$	permitida
$-1$	$-2$	$-3$	$-2$	prohibida
$3$	$-2$	$1$	$2$	prohibida



#### 4.4- Efectos del plasma sobre el potencial efectivo.

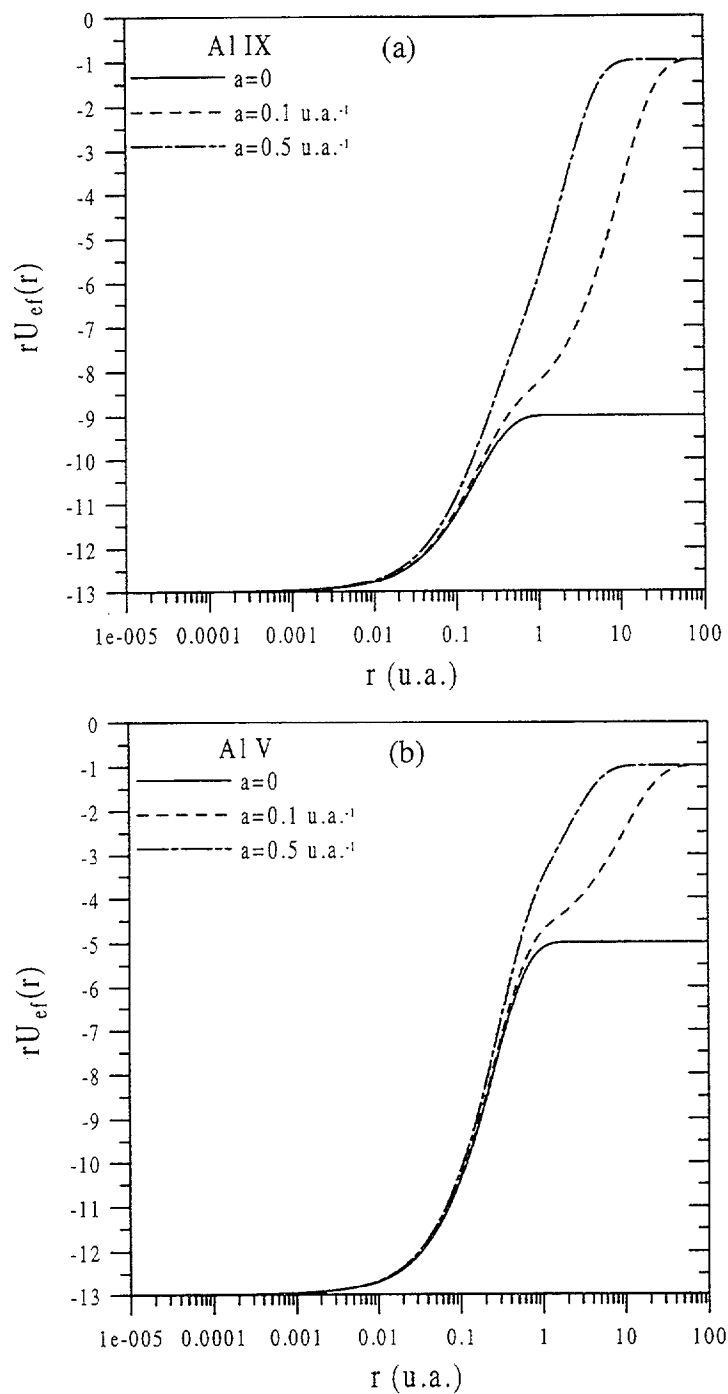
Para el análisis del potencial efectivo a lo largo de este apartado representaremos siempre  $rU_{ef}$  frente a  $r$  (es decir,  $-Z_{ef}$  frente a  $r$ ) al objeto de que las diferencias entre los potenciales sean más evidentes. Por otro lado, es conviene recordar desde el comienzo de este apartado, que el potencial analítico aislado del que partíamos, el asociado al core, corresponde al potencial efectivo no aislado para el caso en el que el radio inverso de Debye tenga un valor nulo.

Dicho esto y con el propósito de analizar los efectos que produce el plasma sobre el potencial efectivo propuesto en el capítulo anterior es conveniente definir el desplazamiento del potencial efectivo como

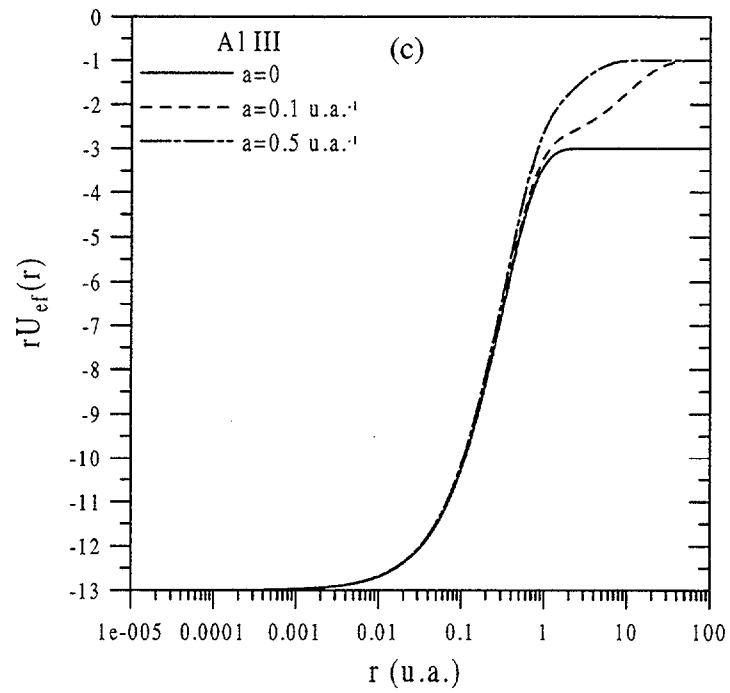
$$\delta U(r) = U_{ef}^{A0}(r) - U_{N-1}^0(r) \quad (4.39)$$

que es potencial ejercido por el plasma en la aproximación de electrón óptico asintótico, o sea  $\delta U(r) = U_p^{A0}(r)$ .

En el capítulo anterior se estudió el comportamiento en el infinito y en el origen de la función de carga efectiva, dado por (3.46) y (3.51), obteniéndose que el potencial efectivo no aislado coincide con el aislado en el origen, y que tiene un comportamiento coulombiano a largas distancias (del tipo  $-1/r$ ), que, para la correspondiente función de carga efectiva, se corresponderá con una tendencia a 1. Este comportamiento asintótico se puede ver en las gráficas como -1 por lo que hemos indicado al comienzo de este apartado sobre la representación del potencial. En las figuras 1-4 se representa la función de carga efectiva para distintos iones de aluminio, hierro, plata y oro, y para distintos radios inversos de Debye (es decir, para diversas condiciones del plasma, incluyendo el caso límite  $a=0$  como ausencia de plasma o situación aislada tal y como hemos dicho). En estas representaciones se

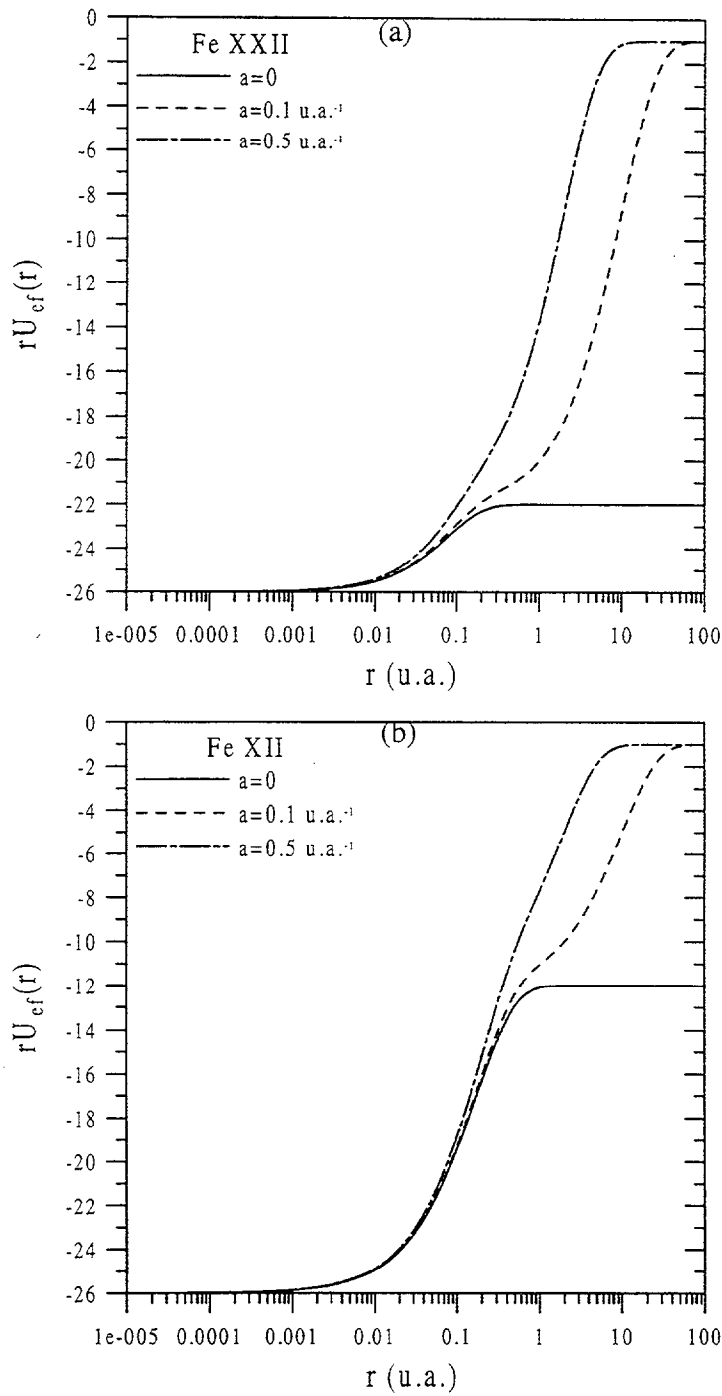


**Figura 1.** Representación de  $rU_{ef}^{A0}(r) (= -Z_{ef}^{A0}(r))$  (en u.a.) frente a  $r$  en diferentes condiciones del plasma ( $a=0, 0.1$  y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ ) para los iones de aluminio Al IX (a) y Al V (b).

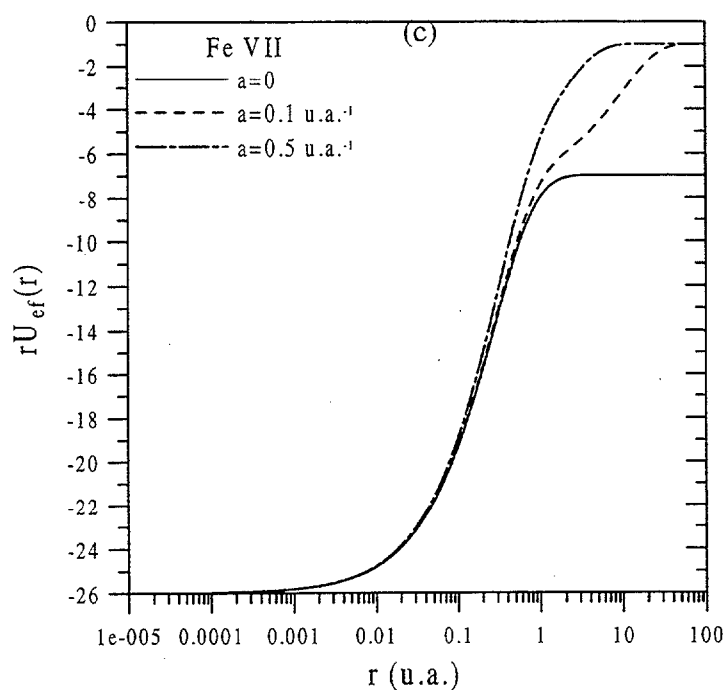


**Figura 1 bis.** Representación de  $rU_{ef}^{AO}(r)$  ( $= -Z_{ef}^{AO}(r)$ ) (en u.a.) frente a  $r$  en diferentes condiciones del plasma ( $a=0, 0.1$  y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ ) para el ion de aluminio Al III (c).

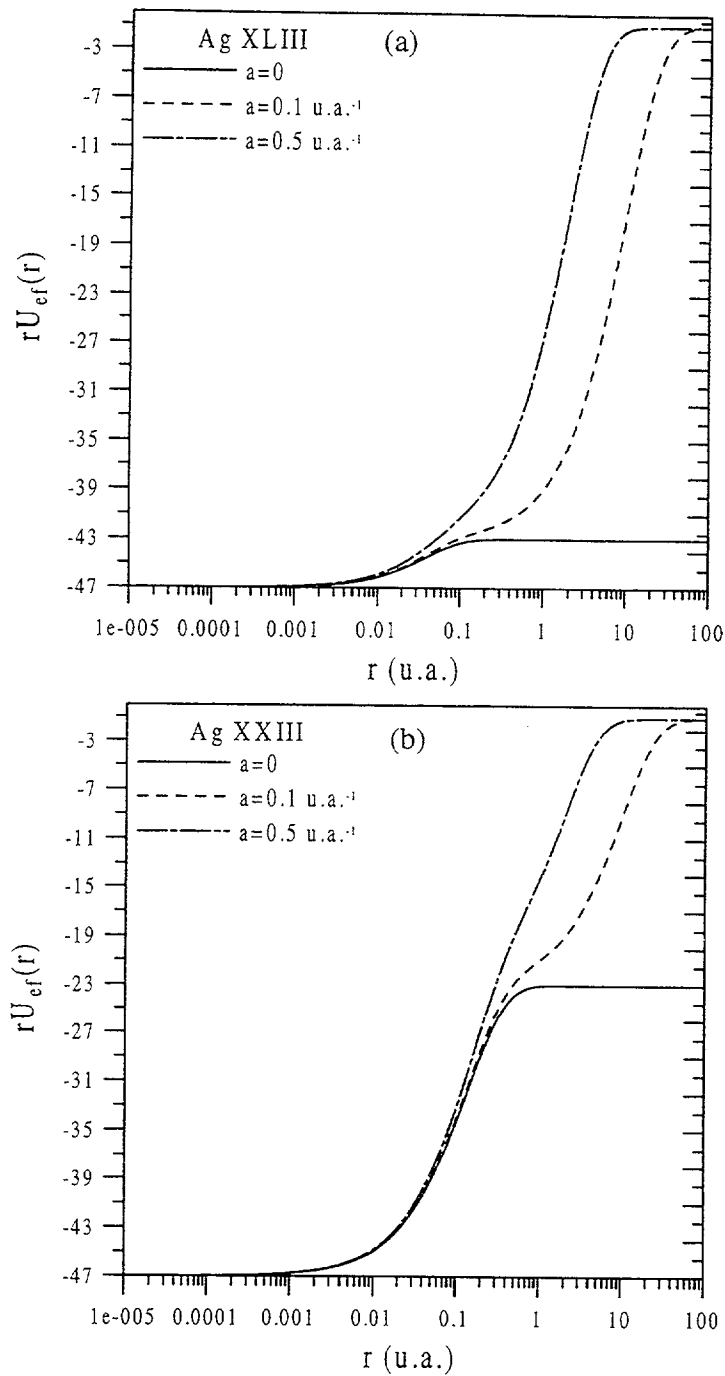




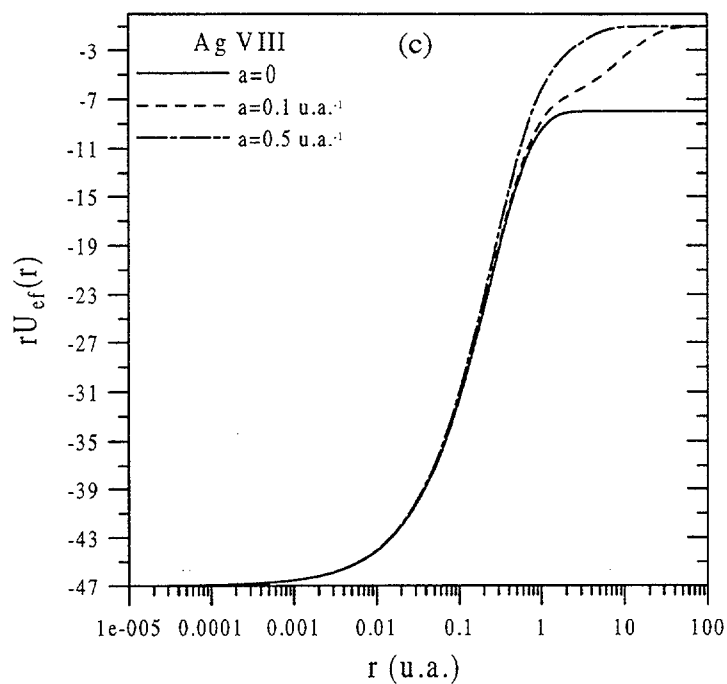
**Figura 2.** Representación de  $rU_{ef}^{AO}(r) (= -Z_{ef}^{AO}(r))$  (en u.a.) frente a  $r$  en diferentes condiciones del plasma ( $a=0, 0.1$  y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ ) para los iones de hierro Fe XXII (a) y Fe XII (b).



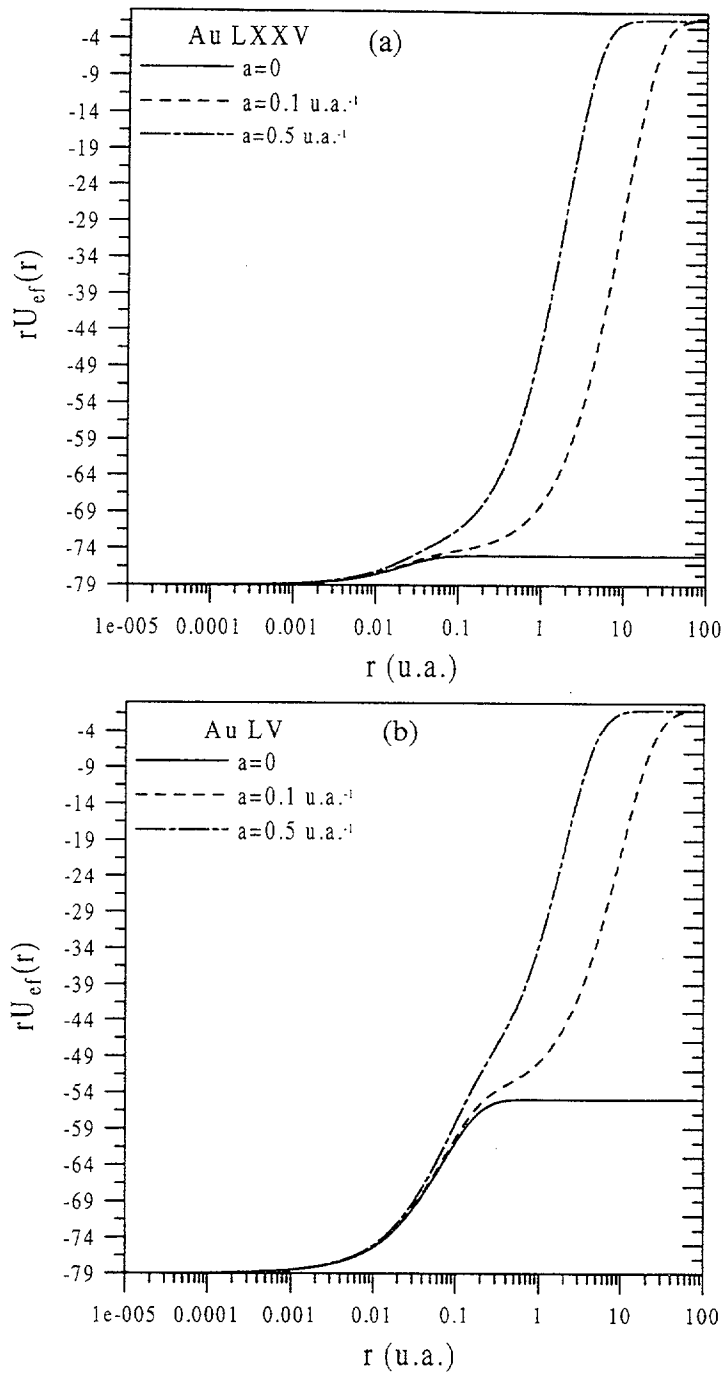
**Figura 2 bis.** Representación de  $rU_{ef}^{A0}(r) (= -Z_{ef}^{A0}(r))$  (en u.a.) frente a  $r$  en diferentes condiciones del plasma ( $a=0, 0.1$  y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ ) para el ion de hierro Fe VII (c).



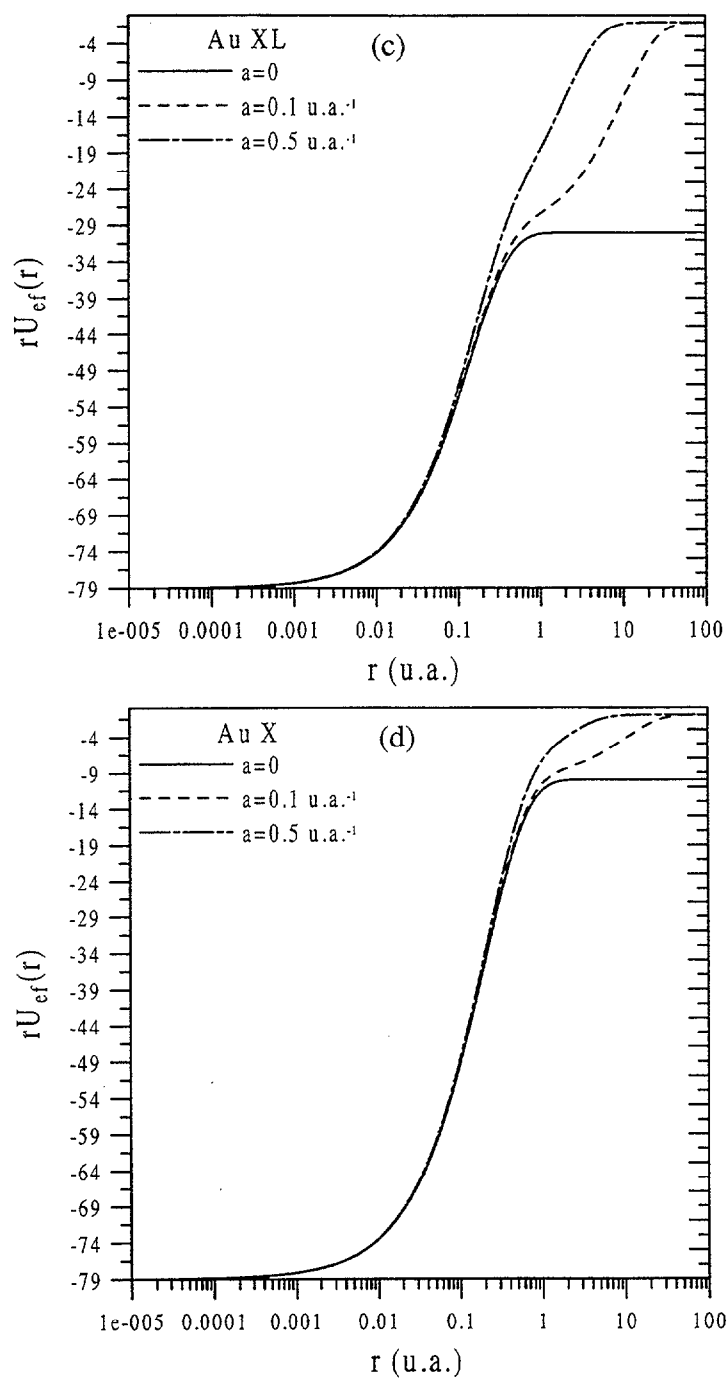
**Figura 3.** Representación de  $rU_{ef}^{A0}(r) (= -Z_{ef}^{A0}(r))$  (en u.a.) frente a  $r$  en diferentes condiciones del plasma ( $a=0, 0.1$  y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ ) para los iones de plata Ag XLIII (a), y Ag XXIII (b).



**Figura 3 bis.** Representación de  $rU_{ef}^{A0}(r) (= -Z_{ef}^{A0}(r))$  (en u.a.) frente a  $r$  en diferentes condiciones del plasma ( $a=0, 0.1$  y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ ) para el ion de plata Ag VIII (c).



**Figura 4.** Representación de  $rU_{ef}^{A0}(r) (= -Z_{ef}^{A0}(r))$  (en u.a.) frente a  $r$  en diferentes condiciones del plasma ( $a=0, 0.1$  y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ ) para los iones de oro Au LXXV (a) y Au LV (b).



**Figura 4 bis.** Representación de  $rU_{ef}^{AO}(r) (= -Z_{ef}^{AO}(r))$  (en u.a.) frente a  $r$  en diferentes condiciones del plasma ( $a=0, 0.1$  y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ ) para los iones de oro Au XL (c) y Au X (d).

observa el comportamiento del potencial efectivo en el origen y a largas distancias, pudiendo corroborar en todos los casos el comportamiento mencionado.

Como consecuencia del comportamiento indicado, el desplazamiento del potencial efectivo es cero en el origen e igual a  $-\chi/r$  para largas distancias, siendo  $\chi = Z - N$  la ionicidad del ion, independientemente de cuales sean las condiciones del plasma. Esto, que es evidente de la observación de las gráficas anteriores, es fácilmente deducible sin más que considerar los límites a cortas y largas distancias de los potenciales efectivos  $U_{ef}^{A0}$  y  $U_{N-1}^{A0}$  (dados por (3.105), (3.106) y (3.94), (3.95) respectivamente) y evaluar (4.39) en estas situaciones.

De acuerdo con lo visto en el capítulo anterior el comportamiento en el origen fue impuesto en las condiciones de contorno introducidas para la resolución de la ecuación diferencial (3.8), sin embargo el comportamiento en el infinito es consecuencia de haber considerado al electrón óptico en el modelo de interacción entre el ion y el plasma, siguiendo las ideas de Theimer y Keppler (1970) y de Schlüter (1990).

Podemos observar para un ion dado con carga nuclear  $Z$  y  $N$  electrones ligados, se encuentra que el efecto del plasma sobre el potencial efectivo da lugar a una disminución en valor absoluto respecto del valor de éste en situación aislada ( $a=0$ ), y por tanto, es desplazado hacia valores positivos. Teniendo en cuenta que el potencial efectivo es negativo, entonces el desplazamiento  $\delta U$  o potencial que ejerce el plasma es positivo, lo que corresponde con el hecho de que el plasma ejerce una repulsión electrostática sobre los electrones ligados.

Como era de esperar al aumentar el valor de  $a$ , que representa las condiciones de densidad y temperatura del plasma, se produce un aumento de  $\delta U$  y por tanto de la repulsión que sufre los electrones ligados del ion. Este aumento del desplazamiento del potencial efectivo con el radio inverso de Debye puede ser

ilustrado también en las figuras 1-4. Por ejemplo, si nos centramos en el ion de aluminio Al IX (fig. 1a), se observa que al aumentar el radio inverso de  $0.1 \text{ u.a.}^{-1}$  a  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$  se produce una mayor separación de la función de carga efectiva con respecto a la correspondiente en situación aislada, o lo que es lo mismo un mayor desplazamiento hacia los valores positivos del potencial efectivo, y por tanto, un mayor potencial ejercido por el plasma. Esta tendencia puede apreciarse también en la figura 5, donde se representa el potencial del plasma ( $rU_p^{A0} = -Z_p^0$ ) frente al radio  $r$  para diferentes iones de hierro y distintos radios inversos de Debye.

Además se tiene, que al aumentar el radio inverso se produce un aumento de la pendiente del potencial efectivo cerca del origen, y a largas distancias se alcanza antes el comportamiento asintótico. Por ejemplo, para el ion Fe XXII (figura 2a), se observa cuando  $a=0.1 \text{ u.a.}^{-1}$  que las diferencias, con respecto a la situación aislada, entre ambos potenciales comienzan a notarse a partir de una distancia al núcleo del orden de  $0.05 \text{ u.a.}$ , mientras que para un radio inverso mayor, de  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ , las diferencias no se aprecian hasta una distancia del orden de  $0.01 \text{ u.a.}$ . También se ilustra este comportamiento para el ion FeXXII en la figura 5a, donde se representa  $rU_p^{A0}$ . Para largas distancias, se encuentra para el ion Au XL (ver figura 4c) que para un radio inverso de  $0.1 \text{ u.a.}^{-1}$  el comportamiento coulombiano se alcanza a una distancia del orden de  $60 \text{ u.a.}$ , mientras que para  $a=0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ , se alcanza a una distancia menor, del orden de  $10 \text{ u.a.}$ . Esto obedece al hecho de que cuanto más importantes son los efectos del plasma, el potencial efectivo liga menos a sus electrones como consecuencia de la repulsión electrostática que ejerce el plasma sobre los electrones ligados.

Los comportamientos del desplazamiento del potencial efectivo con el radio inverso de Debye y la ionicidad pueden deducirse analíticamente para el caso de distancias cercanas al origen y en el infinito. Para cortas distancias se tiene el siguiente comportamiento para el potencial asociado al plasma



$$\begin{aligned}
 U_p^{A0}(r \rightarrow 0) &= U_{ef}^{A0}(r \rightarrow 0) - U_{N-1}^0(r \rightarrow 0) \approx \\
 &= a\chi + a^2(N-1) \left[ \frac{a_2}{a_1^2 - a^2} - a_1 C(a_1, a_2) \right] + a^3(N-1)C(a_1, a_2) \quad (4.40)
 \end{aligned}$$

expresión que ha sido obtenida teniendo en cuenta el comportamiento cerca del origen de  $U_{N-1}^0$  y  $U_{ef}^{A0}$ , dados respectivamente en (3.95) y (3.105). De la expresión anterior se deduce que la diferencia entre los dos potenciales cerca del origen, o el potencial que ejerce el plasma sobre el ion cerca del origen, es constante y aumenta cuando aumenta el radio inverso de Debye, o también cuando lo hace la ionicidad. Si hacemos el análisis para la función de carga efectiva se tiene, sin más que multiplicar por menos uno y por  $r$  la ecuación anterior,

$$Z_p^{A0}(r \rightarrow 0) = - \left\{ a\chi + a^2(N-1) \left[ \frac{a_2}{a_1^2 - a^2} - a_1 C(a_1, a_2) \right] + a^3(N-1)C(a_1, a_2) \right\} r \quad (4.41)$$

de modo que el efecto del plasma en el origen es nulo y el comportamiento de la función de carga efectiva a cortas distancias al aumentar el radio inverso o la ionicidad es aumentar la pendiente de la función cerca del origen, es decir aumentar  $a\chi$ , como ha sido discutido. Se observa que para átomos neutros el primer término de la ecuación anterior es nulo, y el efecto del plasma viene dado por el segundo y tercer término con lo que la dependencia del potencial ejercido por el plasma cerca del origen es no lineal con el radio inverso de Debye. Para átomos muy ionizados el término que predomina es el primero frente a los otros dos, teniéndose para el caso de iones con un electrón (máxima ionización) que el segundo y tercer términos son nulos debido a que lo es la cantidad  $(N-1)$ . Por tanto, para alta ionización, el potencial que ejerce el plasma cerca del origen tiene una dependencia lineal con  $a$ .

Para largas distancias al origen se tiene el siguiente comportamiento del potencial ejercido por el plasma

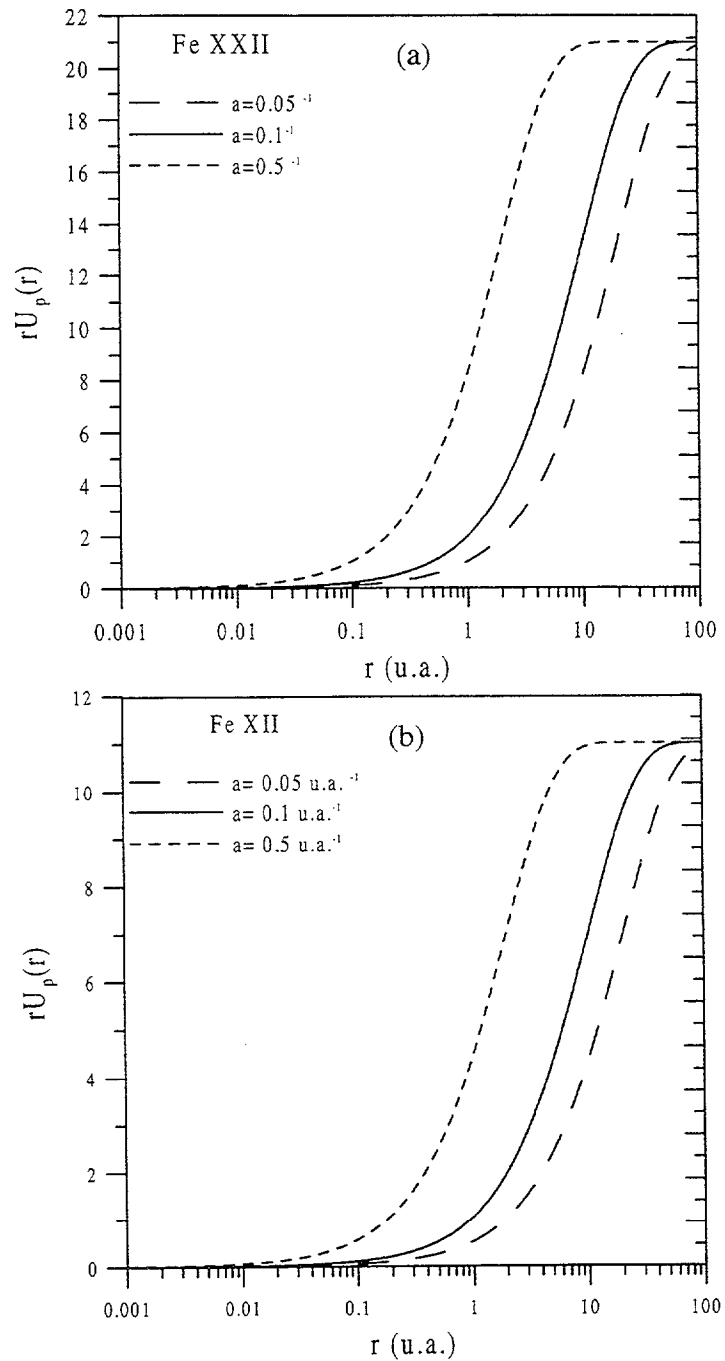
$$U_p^{A0}(r \rightarrow \infty) = U_{ef}^{A0}(r \rightarrow \infty) - U_{N-1}^0(r \rightarrow \infty) \approx -\frac{1}{r} - \left[ -\frac{(Z - N + 1)}{r} \right] = \frac{\chi}{r} \quad (4.42)$$

donde se ha tenido en cuenta el comportamiento del potencial aislado a largas distancias  $(-(Z - N + 1)/r)$  y la ecuación (3.46) para el potencial efectivo no aislado  $U_{ef}^{A0}$ . Por tanto, a largas distancias se tiene que la diferencia entre ambos potenciales depende de la ionicidad, y del radio inverso de Debye. Nuevamente, multiplicando por menos uno y por  $r$  obtenemos el comportamiento para la correspondiente función de carga efectiva del plasma

$$Z_p^{A0}(r \rightarrow \infty) \approx -\chi \quad (4.43)$$

de modo que el efecto del plasma a largas distancias coincide con la ionicidad del ion, y se alcanzará antes el comportamiento asintótico para mayores valores del radio inverso de Debye.

Otro comportamiento que se encuentra para unas condiciones determinadas de densidad y temperatura es que el desplazamiento del potencial efectivo,  $\delta U$ , aumenta cuando aumenta la ionicidad del ion (es decir, cuando aumenta la carga nuclear  $Z$  o disminuye el número de electrones ligados  $N$ ). Este comportamiento se ilustra para el aluminio en las figuras 1a y 1c, donde al aumentar la ionicidad de 2 (fig. 1c) a 8 (fig.1a), se observa un aumento sensible en la diferencia entre el potencial efectivo aislado y no aislado. Lo mismo se podría observar para el hierro en las figuras 2a y 2c, para la plata en las figuras 3a y 3c, y en el oro en las figuras 4a y 4c.

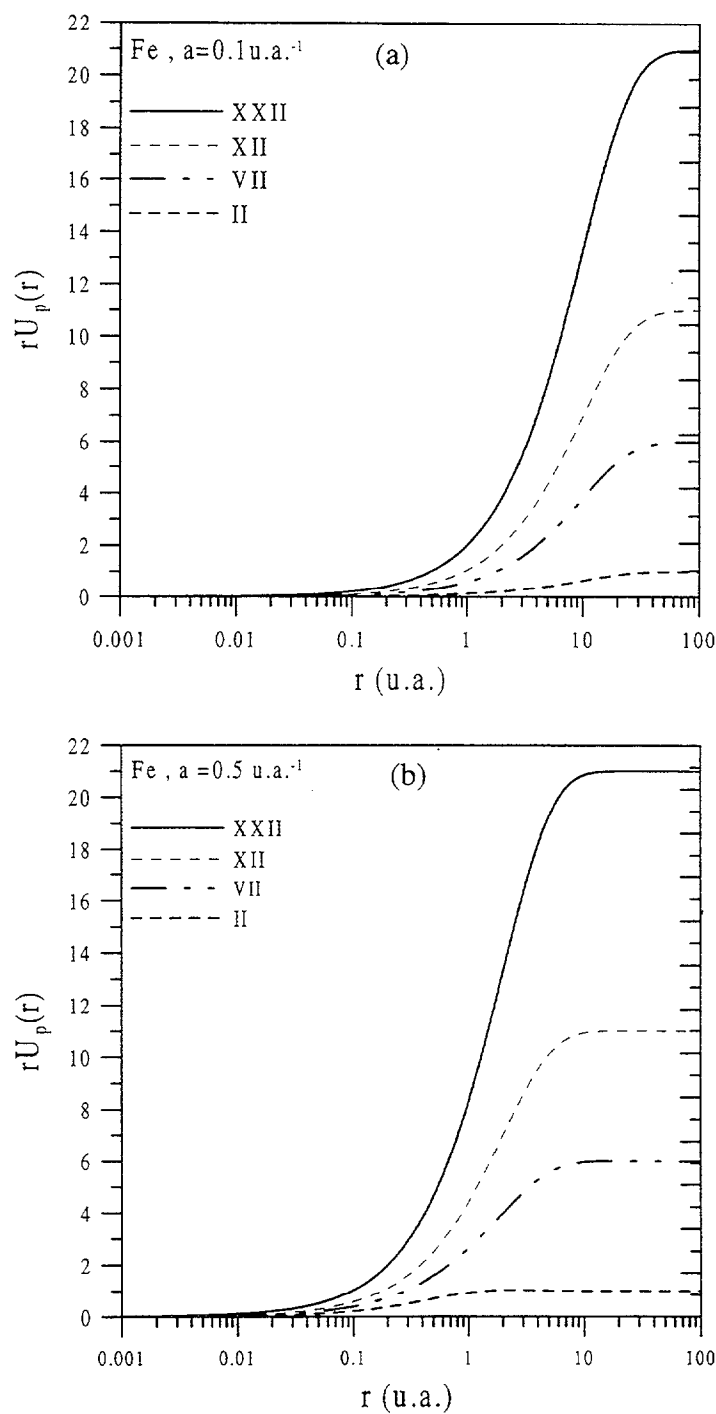


**Figura 5.** Representación de  $rU_p^{AO}(r)(=-Z_p^{AO}(r))$  (en u.a.) frente a  $r$  en diferentes condiciones del plasma ( $a=0.05, 0.1$  y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ ) para los iones de hierro Fe XXII (a), Fe XII (b).

Por otro lado se observa, que cuando crece la ionicidad se produce un aumento de la pendiente de la función de carga efectiva cerca del origen. Por ejemplo, en las figuras 2a, 2b y 2c, que se corresponden con diferentes iones de hierro, podemos ver que para un radio inverso  $a=0.1$  u.a.<sup>-1</sup>, las diferencias con el potencial correspondiente al caso aislado se empiezan a notar aproximadamente a partir de las 0.01 u.a.<sup>-1</sup> para el Fe XXII ( $\chi = 21$ ), a partir de 0.05 u.a.<sup>-1</sup> para el Fe XII ( $\chi = 11$ ), o de 0.1 u.a.<sup>-1</sup> para el Fe VII ( $\chi = 6$ ); por tanto, la pendiente de la función de carga del plasma aumenta con la ionicidad.

Estos comportamientos con la ionicidad se ilustran en la figura 6, donde se representa el potencial ejercido por el plasma para diferentes iones de hierro y plata a unos radios inversos de Debye de 0.1 y 0.5 u.a.<sup>-1</sup>. En esta misma figura se observa que la ionicidad no tiene influencia (o es débil) sobre la rapidez con la que el potencial del plasma alcanza el comportamiento asintótico, al contrario de lo que ocurría con el radio inverso de Debye. Por ejemplo vemos en la figura 6, que para todos los estados de ionización del hierro, cuando  $a$  es 0.1 u.a.<sup>-1</sup>, el comportamiento asintótico se alcanza a una misma distancia a partir de las 50 o 60 u.a., y para un valor de  $a$  de 0.5 u.a.<sup>-1</sup>, se alcanza a partir de 10 u.a..

De lo dicho se tiene que el potencial ejercido por el plasma sobre iones de distintas especies químicas con igual ionicidad, tendrán el mismo comportamiento a cortas y largas distancias. Esta dependencia con la ionicidad es tan importante que si nos restringimos al caso de radios inversos pequeños, el potencial ejercido por el plasma es aproximadamente el mismo para los iones de diferentes especies químicas con igual ionicidad. Este comportamiento se ilustra en la figura 7, para iones de hierro y plata (7a) y de aluminio y oro (7b). En esta figura se observa que los potenciales ejercidos por el plasma sobre los iones Fe XXII y Ag XXII son muy cercanos, y algo similar se aprecia para los iones Al IX y Au IX. En las mismas figuras nuevamente se pone de manifiesto como al aumentar la ionicidad, aumenta el potencial ejercido por el plasma.



**Figura 6.** Representación de  $rU_p^{A0}$  ( $= -Z_p^{A0}$ )  $= r\delta U$  (en u.a.) frente a  $r$  en condiciones del plasma de  $a=0.1$  y  $0.5$  u.a.<sup>-1</sup> para distintos iones de hierro.

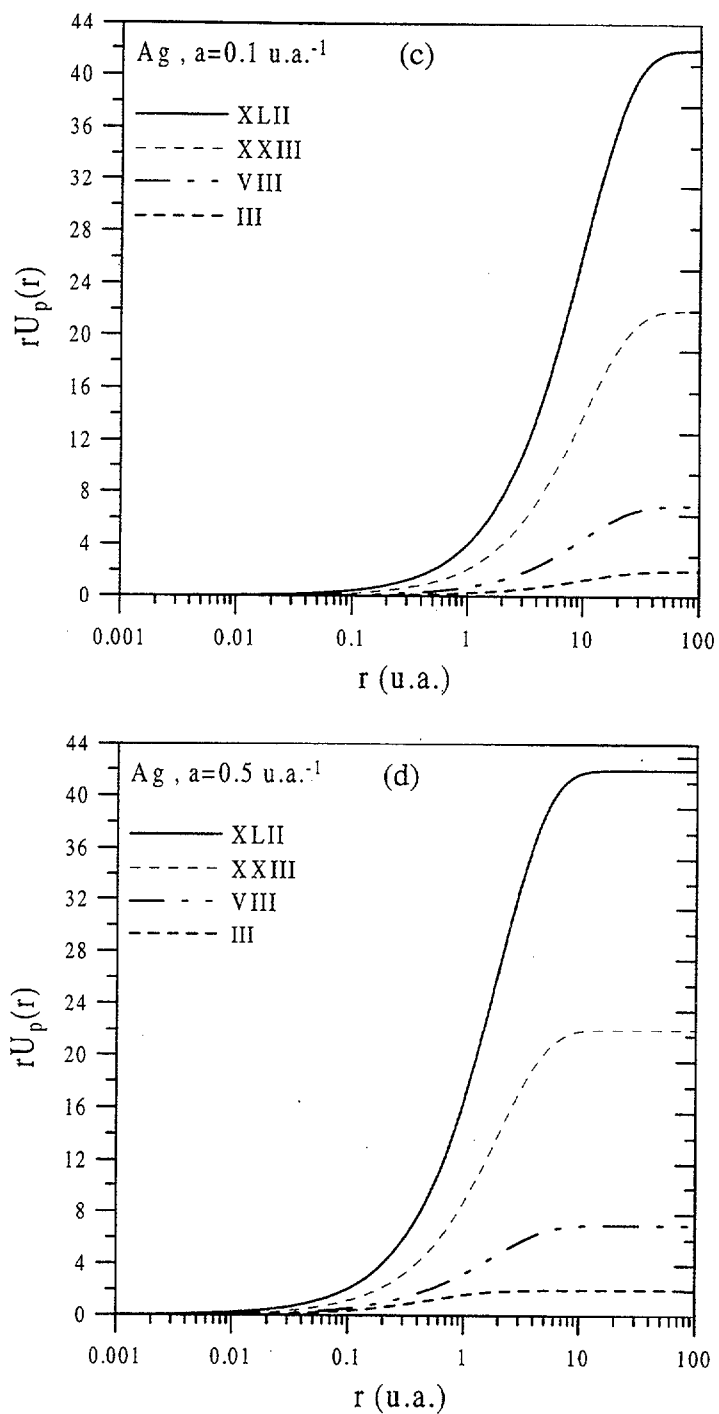
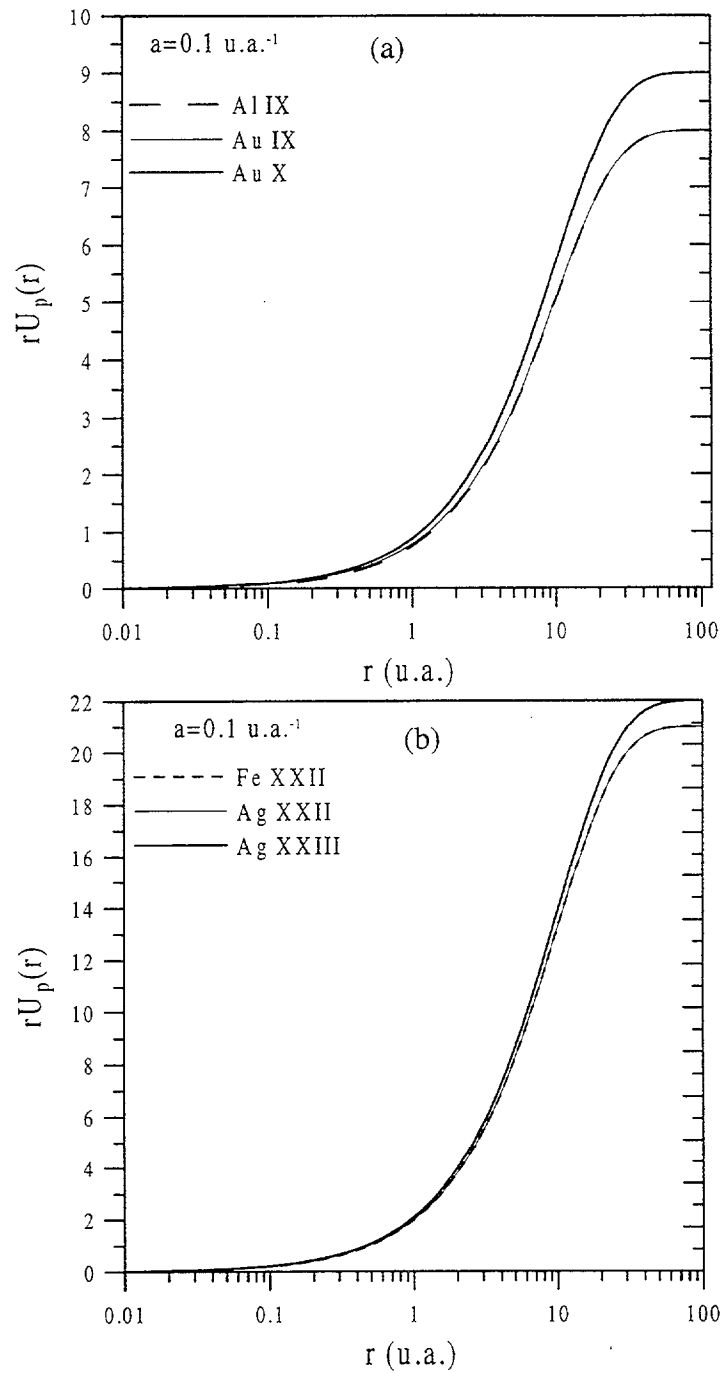
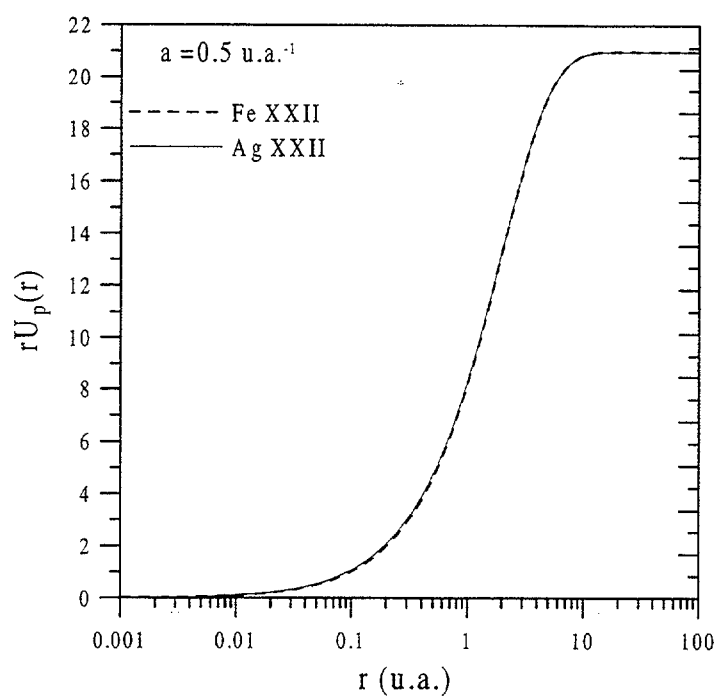


Figura 6 bis. Representación de  $rU_p^{A0} (= -Z_p^{A0}) = r\delta U$  (en u.a.) frente a  $r$  en condiciones del plasma de  $a=0.1$  y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$  para distintos iones de plata.



**Figura 7.** Representación de  $rU_p^{AO} (= -Z_p^{AO}) = r\delta U$  (en u.a.) frente a  $r$  en condiciones del plasma de  $a=0.1 \text{ u.a.}^{-1}$  para iones de aluminio y oro (a), y hierro y plata (b).



**Figura 8.** Representación de  $rU_p^{A0}(r)(= -Z_p^{A0}(r))$  (en u.a.) frente a  $r$  en condiciones del plasma de  $a = 0.5 \text{ u.a.}^{-1}$  para los iones Fe y Ag XXII.



Si se aumenta el radio inverso pero los iones tienen una ionización alta, el comportamiento comentado se sigue manteniendo como se aprecia en la figura 8 para los iones de Fe XXII y Ag XXII, y un radio inverso de  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ .

Las diferencias aparecen cuando se aumenta el radio inverso de Debye y se disminuye la ionicidad, como se ilustra en la figura 9. En la figura 9a se representan los iones Fe VII y Ag VII para un radio inverso de Debye de  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ , y se aprecian diferencias en el potencial del plasma aunque la ionicidad sea la misma. Además se observa que sufre mayor potencial por parte del plasma (o que existe una diferencia mayor entre el potencial efectivo aislado y no aislado, un  $\delta U$  más grande) el ion que tiene mayor carga nuclear y mayor número de electrones, que en este caso es el ion de plata. Comportamiento similar se aprecia en la figura 9b para los iones Al X y Au X.

Por tanto, para pequeños radios inversos de Debye o iones muy ionizados, los efectos del plasma no dependen de la estructura del ion o de los detalles del potencial del core, es decir, no depende de los parámetros del potencial del core aislado  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$ . En cambio cuando empieza a disminuir la ionicidad para una especie química dada, la estructura del ion empieza a tener influencia en el potencial que ejerce el plasma sobre el ion.

Estos comportamientos se pueden justificar si se tienen en cuenta en el potencial efectivo no aislado  $U_{ef}^{A0}$ , o en el potencial ejercido por el plasma  $U_p^{A0}$ , algunas consideraciones sobre el radio inverso de Debye y los parámetros asociados al potencial del core  $U_{N-1}^0$ . En efecto, si consideramos iones con un número de electrones menor o igual a once, el potencial que ejerce el plasma viene dado por

$$U_p^{A0}(r) = -\frac{I}{r} \left\{ (Z - N) [e^{-ar} - 1] + a^2 (N - 1) C(a_1, a_2) [e^{-ar} - e^{-a_1 r}] - a^2 (N - 1) \frac{I}{a_1^2 - a^2} a_2 r \right\} \quad (4.44)$$

donde se puede observar, que en general ésta depende tanto del radio inverso como de los parámetros  $a_1$  y  $a_2$ .

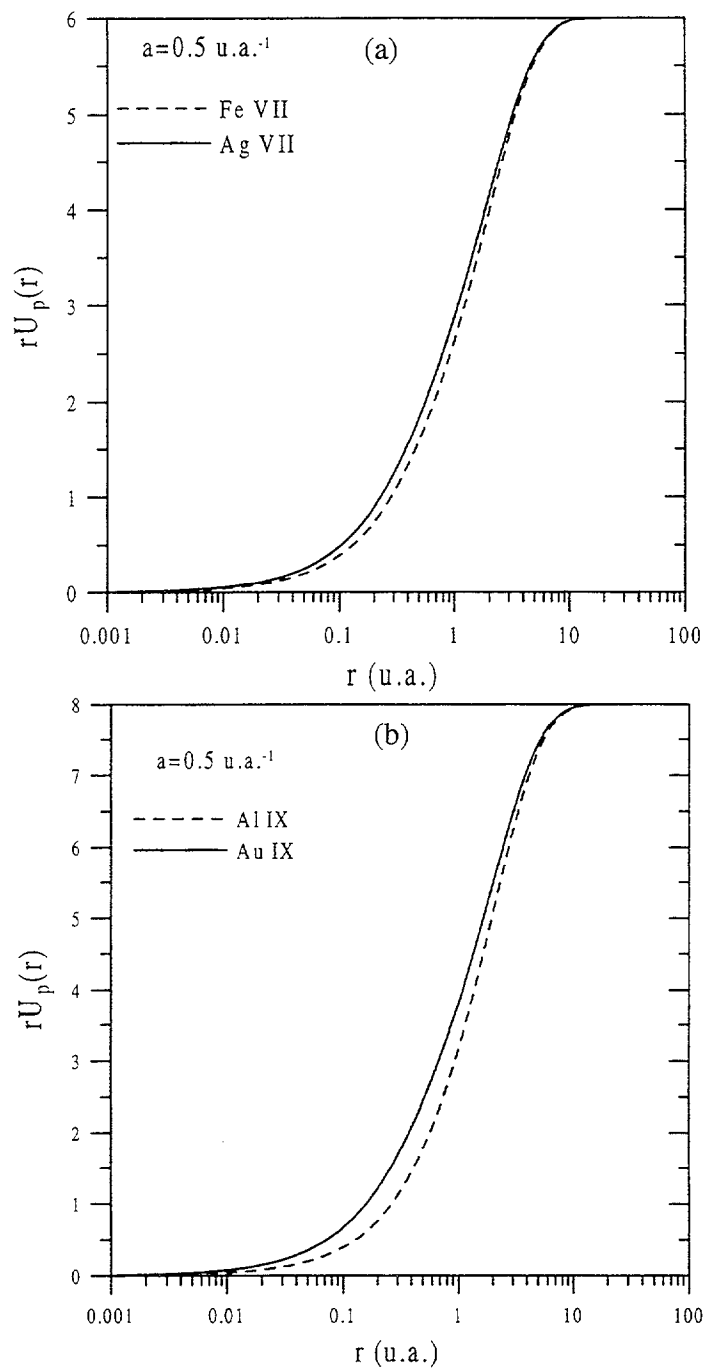
Para radios de Debye pequeños se tiene el siguiente comportamiento de la función de carga del plasma,

$$U_p^{A0}(r) = -\frac{I}{r}(Z - N)[e^{-ar} - 1] \quad (4.45)$$

que corrobora el hecho de que el potencial que ejerce el plasma sólo depende del estado de ionización como se ilustró en la figura 7, y no de la estructura de los iones ya que no aparecen los parámetros  $a_1$  y  $a_2$ . En efecto, basta con tener en cuenta que cuando  $a \rightarrow 0$  los términos en  $a^2$  de la expresión (4.44) van más rápido a cero que el término exponencial  $e^{-ar}$ .

Para átomos que cumplen la condición  $a_1 \gg a$ , que para un valor de  $a$  dado se cumplirá cuanto más ionizado esté el ion por crecer el parámetro  $a_1$  cuando aumenta la ionicidad (Martel, 1995), la función de carga del plasma tiene el mismo comportamiento que el dado en (4.45), corroborando lo ilustrado en la figura 8. Para llegar a dicho comportamiento hemos tenido en cuenta que la condición  $a_1 \gg a$  o  $a/a_1 \rightarrow 0$  lleva a que  $a^2 C(a_1, a_2) \rightarrow 0$  y  $a^2 / (a_1^2 - a^2) \rightarrow 0$ , quedando el mismo comportamiento que en (4.40). Por tanto, para mantener este comportamiento cuando se aumenta el radio inverso de Debye, se tiene que aumentar la ionicidad para que aumente  $a_1$  y se siga cumpliendo la condición  $a_1 \gg a$ .

Por el contrario, si no se cumple que  $a_1 \gg a$ , entonces los términos  $a^2 C(a_1, a_2)$  y  $a^2 / (a_1^2 - a^2)$  no son despreciables y queda una dependencia de  $U_p^{A0}$  con  $a_1$  y  $a_2$  como se ilustró en la figura 9.



**Figura 9.** Representación de  $rU_p^{A0}(r)(= -Z_p^{A0}(r))$  (en u.a.) frente a  $r$  en condiciones del plasma de  $a = 0.1 \text{ u.a.}^{-1}$  para los iones Fe y Ag XXII (a), y Fe y Ag VII (b).

Con el propósito de evaluar la influencia del plasma sobre el potencial, hemos calculado el desplazamiento relativo medio de la función de carga efectiva no aislada respecto de la aislada dado por

$$\langle (\delta U)_{rel} \rangle = \langle (\delta Z)_{rel} \rangle = \sum_{i=1}^{nrd} \frac{|U_{ef}(r_i) - U_{N-1}^0(r_i)|}{U_{N-1}^0(r_i)} \quad (4.46)$$

En la tabla 1 se muestra dicha cantidad para el potencial no aislado  $U_{ef}^{A0}$  y para diferentes iones con ionicidades comprendidas entre 5 y 60, y diferentes radios inversos de Debye. Como era de esperar se encuentra que el desplazamiento relativo medio aumenta con el radio inverso de Debye. También se tiene que éste depende de la ionicidad, siendo creciente con la misma, si bien el aumento es pequeño. Para una ionicidad también se encuentra un muy ligero aumento del desplazamiento al aumentar  $Z$  o  $N$ . Por ejemplo, para un estado de ionización  $\chi = 5$  el desplazamiento relativo medio oscila entre 3.55%, para el ion con  $Z=10$  y  $N=5$ , y un 3,53%, para el ion con  $Z=50$  y  $N=45$ , cuando el radio inverso de Debye es de  $0.01 \text{ u.a.}^{-1}$ ; para los mismos iones, y un radio inverso de Debye de  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$  se tiene una oscilación entre un 19.67% y un 19.59% respectivamente.

En cualquier caso, despreciando las pequeñas diferencias en los desplazamientos relativos con  $Z$ ,  $N$  y  $\chi$ , podemos decir aproximadamente que los desplazamientos relativos del potencial efectivo para un radio inverso de  $0.01 \text{ u.a.}^{-1}$  son del orden del 4%, para  $0.05 \text{ u.a.}^{-1}$  del 11%, para  $0.1 \text{ u.a.}^{-1}$  del 15%, y por último, para  $1 \text{ u.a.}^{-1}$  del 22%.

Podemos comparar el potencial propuesto en este trabajo en la aproximación de orden cero con electrón óptico asintótico,  $U_{ef}^{A0}$ , con los potenciales efectivos  $U_{ef}^R$  (Roger, 1981) y  $U_{ef}^C$  (Rouse, 1969). En la figura 10 se representan las

Z	N	Z-N	$(\delta\bar{U})_{rel}$			
			a=0.01 u.a.	a=0.05 u.a.	a=0.1 u.a.	a=0.5 u.a.
10	5	5	3.55	9.72	12.77	19.73
20	15	5	3.54	9.69	12.73	19.67
30	25	5	3.54	9.65	12.66	19.56
40	35	5	3.53	9.64	12.64	19.55
50	45	5	3.53	9.62	12.61	19.55
20	10	10	3.87	10.61	13.95	21.59
30	20	10	3.87	10.58	13.89	21.46
40	30	10	3.87	10.57	13.88	21.43
50	40	10	3.86	10.55	13.84	21.34
60	50	10	3.86	10.54	13.82	21.31
20	5	15	4.00	10.96	14.41	22.42
30	15	15	4.00	10.94	14.38	22.30
40	25	15	3.99	10.93	14.35	22.20
50	35	15	3.99	10.92	14.33	22.14
60	45	15	3.99	10.90	14.31	22.08
30	10	20	4.06	11.13	14.64	22.75
40	20	20	4.06	11.15	14.61	22.65
50	30	20	4.06	11.11	14.60	22.61
60	40	20	4.05	11.10	14.57	22.53
70	50	20	4.05	11.09	14.56	22.48
30	5	25	4.10	11.24	14.79	23.03
40	15	25	4.10	11.24	14.77	22.99
50	25	25	4.10	11.22	14.75	22.93
60	35	25	4.10	11.22	14.74	22.83
70	45	25	4.10	11.21	14.72	22.78
40	10	30	4.13	11.32	14.88	23.16
40	5	35	4.15	11.37	14.96	23.29
50	10	40	4.16	11.41	15.01	23.36
60	15	45	4.17	11.44	15.05	23.41
70	20	50	4.18	11.46	15.07	23.45
80	25	55	4.19	11.48	15.10	23.49
90	30	60	4.20	11.50	15.12	23.52

**Tabla 1.** Desplazamientos relativos medios en tanto por ciento, para el potencial  $U_{ef}^{AO}$  y diferentes iones con ionización entre 5 y 60.

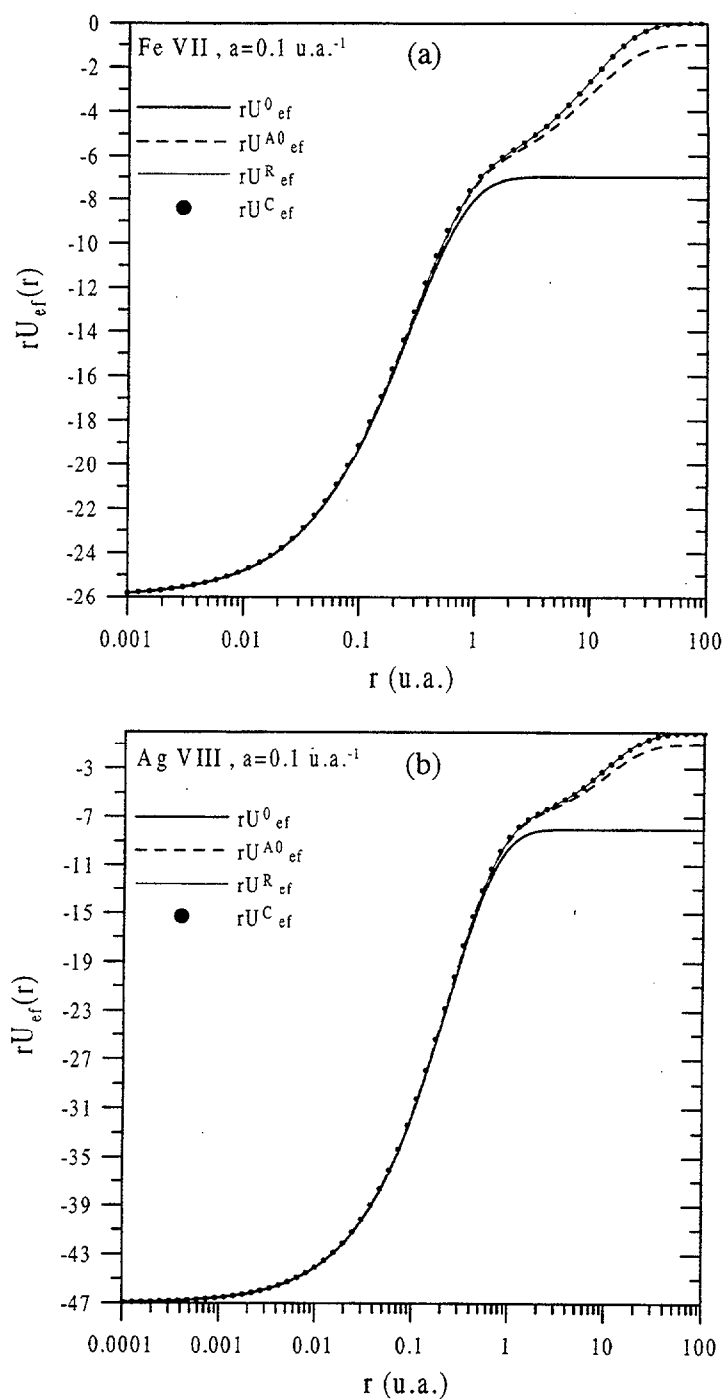
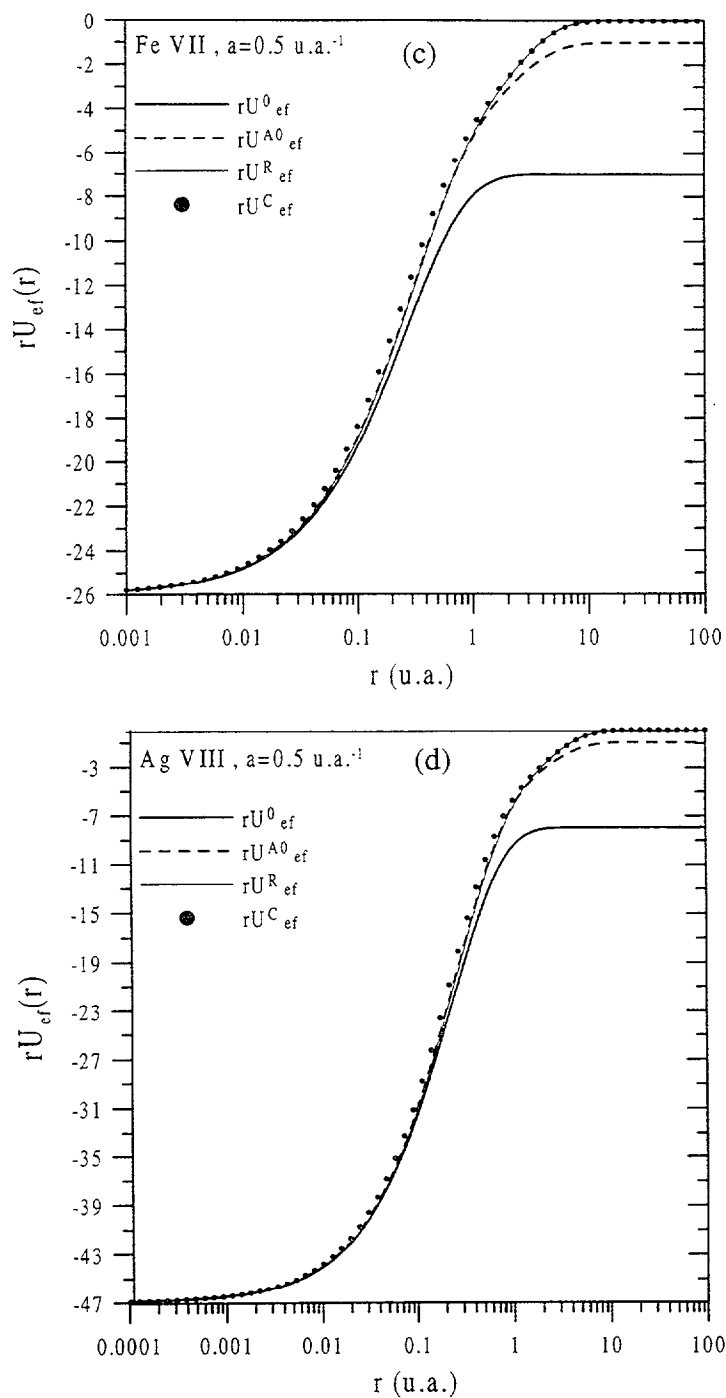


Figura 10. Representación de  $rU_{ef}(r)$  (en u.a.) frente a  $r$  para el potencial aislado  $U_{N-1}^0$  y los potenciales efectivos no aislados  $U_{ef}^{A0}$ ,  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ .



**Figura 10 bis.** Representación de  $rU_{ef}(r)$  (en u.a.) frente a  $r$  para el potencial aislado  $U_{N-1}^0$  y los potenciales efectivos no aislados  $U_{ef}^{A0}$ ,  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ .

correspondientes funciones de carga de estos tres potenciales para diferentes radios inversos de Debye, y se observa que el comportamiento asintótico de estos dos potenciales va a cero más rápido que  $-1/r$ , por lo que sus funciones de carga efectiva tienden a cero a largas distancias. Una consecuencia importante de estos comportamientos asintóticos es que el potencial de este trabajo tiene un número infinito de estados ligados, mientras que los otros dos tienen un número finito. Ya comentamos en el capítulo 2 la inconveniencia de truncar la función de partición interna mediante un potencial efectivo con un número finito de estados ligados, debido a que introducía discontinuidades en ciertas magnitudes macroscópicas. Además destacamos ahora que el no tener que desarrollar un método numérico iterativo para buscar para cada densidad y temperatura el número de estados ligados para el potencial, facilita la implementación del potencial en códigos de cálculo de propiedades ópticas de plasmas.

Los potenciales ejercidos por el plasma, o desplazamientos, asociados a los potenciales  $U_p^R$  y  $U_p^C$  vienen dados por

$$U_p^R(r) = (Z - N + 1)[e^{-ar} - 1] \quad (4.47)$$

y

$$U_p^C(r) = U_{N-1}^0(r)[e^{-ar} - 1] \quad (4.48)$$

Comparando estas dos ecuaciones con (4.44) podemos resaltar las principales diferencias entre los potenciales  $U_p^{A0}$ ,  $U_p^R$  y  $U_p^C$ . Se tiene que  $U_p^R$  depende de  $a$ ,  $Z$  y  $N$  (o la ionicidad  $\chi$ ) pero no depende de la estructura del ion por no aparecer los parámetros asociados al potencial del core, a diferencia de lo que se había visto para  $U_p^{A0}$  en (4.44). Además, el desplazamiento producido por el plasma para este potencial es el mismo para todos los iones de distintas especies químicas con la misma ionicidad, comportamiento análogo al que obtuvimos en (4.45) para



$U_p^{A0}$  valores pequeños del radio inverso de Debye. Para  $U_p^C$  se tiene que sí hay una dependencia con la estructura del ion por aparecer los parámetros en  $U_{N-1}^0$ .

Podemos contrastar analíticamente el comportamiento a cortas y largas distancias del origen de estos tres potenciales. Teniendo en cuenta el comportamiento a cortas distancias de los potenciales  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ , dados por (3.89) y (3.90) respectivamente, se tienen los siguientes comportamientos para los correspondientes potenciales ejercidos por el plasma

$$U_p^R(r \rightarrow 0) \approx a(\chi + 1) \quad (Z_p^R(r \rightarrow 0) \approx -a(\chi + 1)r) \quad (4.49)$$

$$U_p^C(r \rightarrow 0) \approx aZ \quad (Z_p^C(r \rightarrow 0) \approx -aZ r) \quad (4.50)$$

y para largas distancias

$$U_p^{R,C}(r \rightarrow \infty) \approx \frac{(\chi + 1)}{r} \quad (4.51)$$

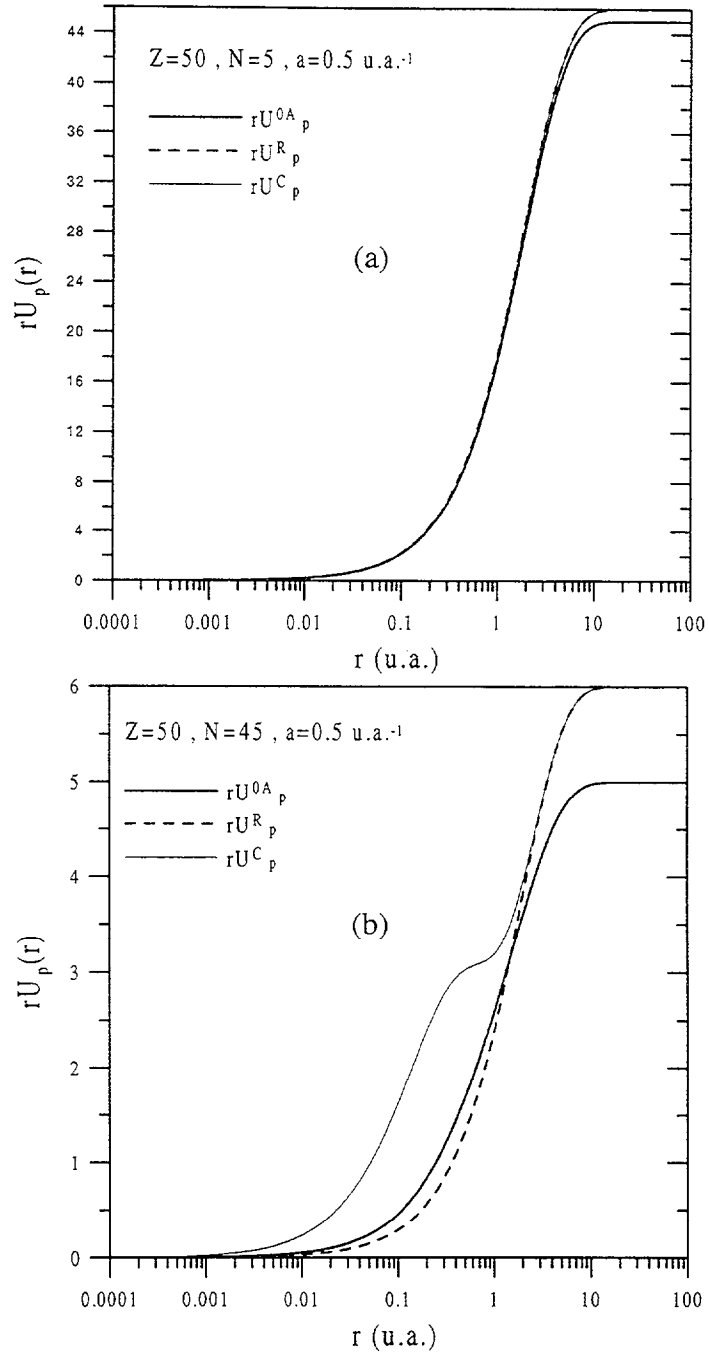
$$Z_p^{R,C}(r \rightarrow \infty) \approx -(\chi + 1) \quad (4.52)$$

Comparando (4.49) y (4.50) con (4.40) podemos apreciar las principales analogías y diferencias entre los tres potenciales. Para el caso de átomos muy ionizados se tiene la misma dependencia funcional para los tres potenciales ejercidos por el plasma con el radio inverso y la distancia al origen  $r$ , aunque para  $U_p^{A0}$  aparece la ionicidad  $\chi$  y para  $U_p^R$  y  $U_p^C$  aparece  $\chi + 1$ . Para largas distancias comparamos (4.51) y (4.42), observando nuevamente las diferencias en la dependencia con la ionicidad. Debido a estas diferencias los potenciales  $U_p^R$  y  $U_p^C$  dan lugar a desplazamientos mayores que  $U_p^{A0}$ . Nuevamente estas diferencias son consecuencia de las consideraciones hechas sobre el electrón óptico, que son más importante conforme menos ionizado esté el ion.

Para el caso de átomos poco ionizados hay que tener en cuenta que el comportamiento de  $U_p^{A0}$  a cortas distancias viene gobernado por el segundo y tercer término de (4.40), por lo que el comportamiento con el radio inverso de Debye de este potencial es no lineal, mientras que para  $U_p^R$  y  $U_p^C$  es lineal. Esta diferencia puede dar lugar a que el potencial  $U_p^{A0}$  produzca mayores desplazamientos cerca del origen que  $U_p^R$ . En la figura 11 se ilustra este comportamiento para el ion con  $Z=50$  y con  $N=5$  (figura 11 a) y  $N=45$  (figura 11 b).

Con el propósito de evaluar las diferencias entre los potenciales  $U_{ef}^{A0}$ ,  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$  en la tabla 2 mostramos los desplazamientos relativos medios de estos potenciales respecto de  $U_{N-1}^0$ , para diferentes iones y ionicidades comprendidas entre 5 y 60. En dicha tabla se observa que las mayores diferencias se encuentran para ionicidades bajas, donde el potencial  $U_{ef}^{A0}$  da lugar a unos desplazamientos relativos más pequeños. Al ir aumentando la ionicidad los desplazamientos relativos de los tres potenciales tienden a igualarse. Para una ionicidad baja,  $\chi = 5$ , se encuentra un desplazamiento relativo medio del 3.55% para  $U_{ef}^{A0}$  frente el 4.26% y 4.27% de los potenciales  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$  respectivamente. Para una ionicidad alta,  $\chi = 60$ , se tiene para  $U_{ef}^{A0}$ ,  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$  los desplazamientos relativos medios del 4.20%, 4.27% y 4.27% respectivamente.

También se puede observar que los desplazamientos asociados a  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$  son muy parecidos en el todo el rango de ionicidades y radios inversos de Debye calculados, siendo el desplazamiento relativo asociado a  $U_{ef}^C$  el mismo para todos los iones y un valor fijo de  $a$ . Este comportamiento es obvio si tenemos en cuenta (4.46)



**Figura 11.** Representación de  $rU_p(r)$  (en u.a.) frente a  $r$  para los potenciales  $U_{ef}^{AO}$ ,  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$  para el ion con  $Z=50$  y  $N=5$  (a) y  $N=45$  (b).

y (4.48) con lo que el desplazamiento relativo para este potencial es  $[e^{-ar} - 1]$ , es decir, sólo depende de  $a$ .

Habíamos visto para cortas distancias al origen y átomos poco ionizados que el potencial  $U_{ef}^{AO}$  producía mayores desplazamientos que  $U_{ef}^R$  ionizado (figura 11 b). Sin embargo en la tabla 2 se encuentra sistemáticamente para los desplazamientos relativos que  $\langle (\delta U_{ef}^{AO})_{rel} \rangle < \langle (\delta U_{ef}^R)_{rel} \rangle < \langle (\delta U_{ef}^C)_{rel} \rangle$ .

Z	N	Z-N	$(\delta U)_{rel}$			
			$a=0.01$ u.a.	$a=0.05$ u.a.	$a=0.1$ u.a.	$a=0.5$ u.a.
10	5	5 A0	3.55	9.72	12.77	19.73
		R	4.26	11.67	15.33	23.68
		C	4.27	11.69	15.39	23.97
20	10	10	3.87	10.61	13.95	21.59
			4.26	11.67	15.34	23.75
			4.27	11.69	15.39	23.97
20	5	15	4.00	10.96	14.41	22.42
			4.27	11.69	15.34	23.91
			4.27	11.69	15.39	23.97
30	10	20	4.06	11.13	14.64	22.75
			4.27	11.69	15.37	23.90
			4.27	11.69	15.39	23.97
30	5	25	4.10	11.24	14.79	23.03
			4.27	11.69	15.39	23.95
			4.27	11.69	15.39	23.97
40	10	30	4.13	11.32	14.88	23.16
			4.27	11.69	15.39	23.93
			4.27	11.69	15.39	23.97
40	5	35	4.15	11.37	14.96	23.29
			4.27	11.69	15.39	23.96
			4.27	11.69	15.39	23.97
50	10	40	4.16	11.41	15.01	23.36
			4.27	11.70	15.38	23.95
			4.27	11.69	15.39	23.97
60	15	45	4.17	11.44	15.05	23.41
			4.27	11.69	15.39	23.93
			4.27	11.69	15.39	23.97
70	20	50	4.18	11.46	15.07	23.45
			4.27	11.69	15.37	23.91
			4.27	11.69	15.39	23.97
80	25	55	4.19	11.48	15.10	23.49
			4.27	11.69	15.37	23.91
			4.27	11.69	15.39	23.97
90	30	60	4.20	11.50	15.12	23.52
			4.27	11.69	15.37	23.91
			4.27	11.69	15.39	23.97

**Tabla 2.** Desplazamientos relativos medios en tanto por ciento, para los potenciales  $U_{ef}^{A0}$ ,  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ , y diferentes iones con ionización entre 5 y 60

#### 4.5- Efectos del plasma sobre las energías de nivel.

Una vez estudiada la influencia del plasma sobre el potencial efectivo, abordaremos la influencia sobre las energías de nivel monoeléctricas. Para este propósito se analizará el desplazamiento de energía de nivel o desplazamiento de nivel, definido como

$$\delta E_{nlj} = E_{nlj} - E_{nlj}^0 \quad (4.53)$$

siendo  $E_{nlj}^0$  la energía en situación aislada del nivel monoeléctrico con número cuántico principal  $n$ , número cuántico de momento angular orbital  $l$  y momento angular total  $j$ , y  $E_{nlj}$  la energía de dicho nivel en situación no aislada.

Comenzaremos mostrando el comportamiento de las energías de nivel y de los correspondientes desplazamientos con el radio inverso de Debye, y a continuación aprovechando estos resultados estudiaremos el comportamiento con la densidad y la temperatura del plasma a partir de la dependencia del radio inverso con estas dos magnitudes. Seguiremos analizando el comportamiento de los desplazamientos de nivel con los números cuánticos, así como el de los desplazamientos relativos. Finalmente, se estudiará como se comportan los desplazamientos de nivel y los desplazamientos relativos con la carga nuclear  $Z$  y el número de electrones ligados  $N$ .

Terminaremos este apartado comparando las energías de nivel proporcionadas por el potencial efectivo propuesto,  $U_{ef}^{A0}$ , con las que proporcionan los potenciales  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ .

Los comportamientos de las energías de nivel y de los desplazamientos con el radio inverso de Debye y con los números cuánticos que a continuación se ilustran

para diferentes iones de hierro son similares para otras especies químicas. Hemos elegido para este estudio un solo ion con el fin de mostrar mejor dichos comportamientos. También, como veremos al estudiar los comportamientos con los números cuánticos este depende fundamentalmente del número cuántico principal  $n$ , por ello y a fin de mostrar de forma más clara la influencia del plasma sobre las energías de nivel hemos elegido para su ilustración principalmente niveles con  $l=0$ .

Como consecuencia de la interacción del ion con el plasma se observa para un ion dado con carga nuclear  $Z$  y  $N$  electrones que todas las energías de los niveles monoeléctricos ligados,  $E_{nlj}$ , disminuyen en valor absoluto respecto de las correspondientes energías en situación aislada,  $E_{nlj}^0$ , y por tanto las energías de los niveles ligados son desplazadas hacia los valores de energías positivas. Entonces el desplazamiento de nivel es positivo, y como cabe esperar, cuando aumenta el radio inverso de Debye se produce un aumento de este desplazamiento.

Debido a este desplazamiento de las energías hacia los valores positivos, se tiene que un electrón ligado a un ion inmerso en un plasma está menos ligado que si se considera el ion en la situación aislada. Esto se debe, como se vio en el apartado anterior, a que el plasma origina una repulsión electrostática que da lugar a un potencial efectivo con un pozo de potencial menos profundo (o tal como se ve en las figuras del apartado anterior, un pozo más estrecho), y por tanto, que liga menos.

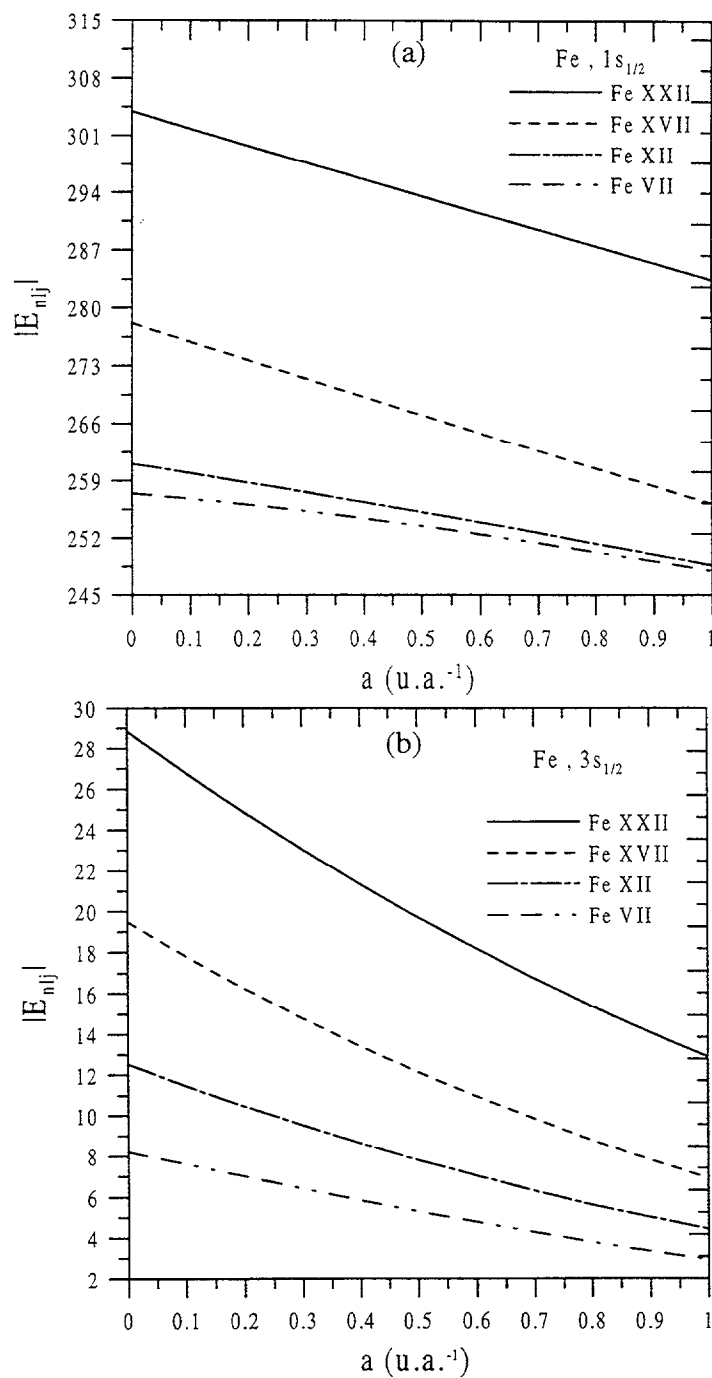
Este comportamiento con el radio inverso de Debye se ilustra en las figuras 12 y 13 para los niveles  $1s_{1/2}$ ,  $3s_{1/2}$ ,  $5s_{1/2}$  y  $7s_{1/2}$ , donde se representan las energías de nivel en valor absoluto de distintos iones de hierro frente al radio inverso de Debye, así como los correspondientes desplazamientos de nivel. En la figura 12 (c) y (d) también se observa que a partir de un cierto valor de  $a$  las energías de los niveles  $5s_{1/2}$  y  $7s_{1/2}$  varían muy poco, tendiendo a alcanzar un valor de la energía constante, así como los correspondientes desplazamientos (ver figuras 13 (c) y (d)), y esta tendencia es más acusada conforme se consideran estados con mayor número

cuántico principal. Además, el valor de la energía es independiente del estado de ionización del ion y coincide con el correspondiente valor de la energía del átomo de hidrógeno. Para el nivel  $7s_{1/2}$  del ion Fe XII aislado se tiene una energía en valor absoluto de 1.7410 u.a. y para  $a=1$  u.a.<sup>-1</sup> pasa a valer 0.0289 u.a., valor cercano al valor 0.020 u.a. del nivel del átomo de hidrógeno (no relativista). Esta tendencia se puede justificar si tenemos en cuenta que los niveles monoeléctricos más externos (con alto número cuántico principal) tienen una alta densidad de probabilidad a largas distancias al origen, por lo que es en esta región del espacio donde el potencial efectivo  $U_{ef}^{A0}$  tiene más peso en la determinación del valor de la energía de los niveles externos, región en la cual el potencial efectivo tiene un comportamiento coulombiano al igual que el átomo de hidrógeno. Este comportamiento asintótico es interesante ya que dentro de la aproximación de electrón óptico asintótico, los niveles excitados de cualquier ion inmerso en un plasma pueden ser aproximados por los correspondientes niveles del átomo de hidrógeno, lo que permite un tratamiento analítico de estos niveles. Una mejor aproximación de las funciones de onda para estos niveles externos se consigue considerando la carga nuclear del ion como un parámetro variacional o como un parámetro a ajustar mediante algún procedimiento. Una forma de ajustar la carga nuclear, es de modo que proporcione las mejores energía totales de los iones o los correspondientes potenciales de ionización (More, 1982).

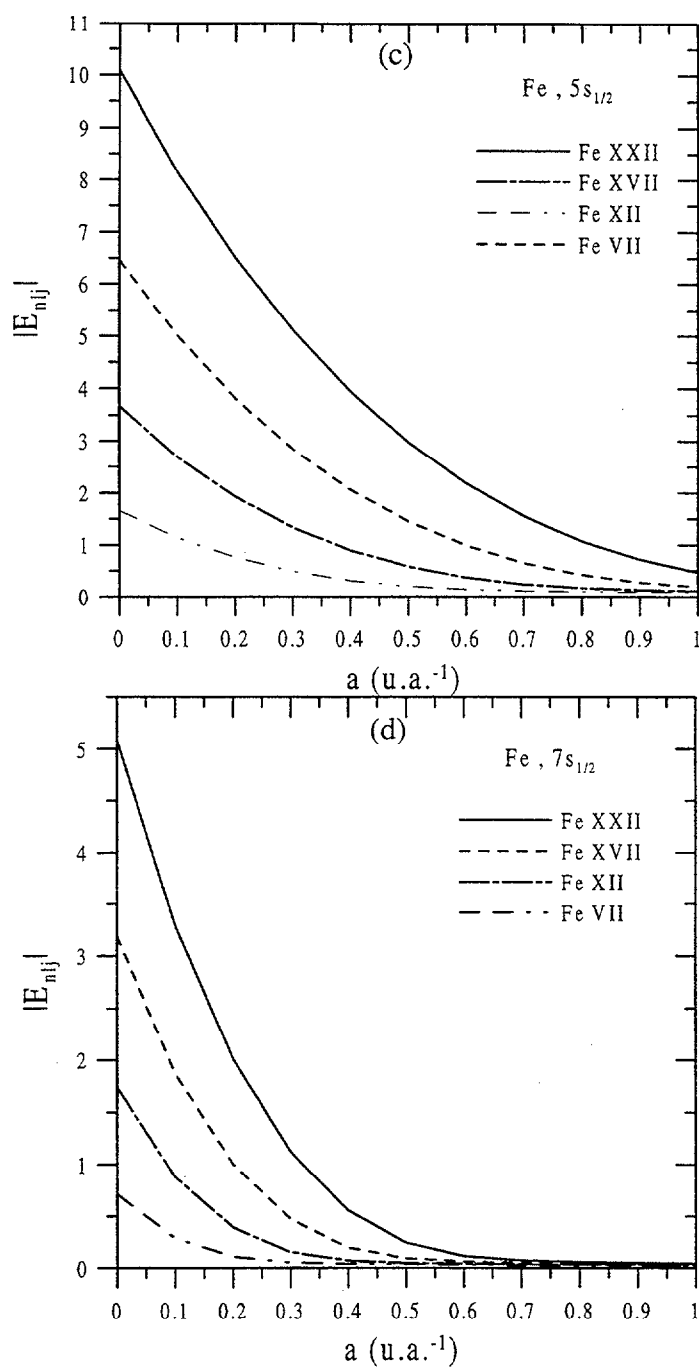
Para los niveles más internos se tendrá una tendencia similar pero cuando los valores de  $a$  sean muy grandes. Esto es debido al comportamiento del potencial efectivo para valores muy grandes del radio inverso de Debye, que como comentamos en el capítulo anterior, tiende al potencial del átomo de hidrógeno.

En resumen, los efectos del plasma producen un desplazamiento sobre los niveles de energías  $E_{nlj}$ , acercándolos hacia los correspondiente valores de energía del átomo de hidrógeno  $E_{nlj}^H$ , efecto que es más acusado para los niveles excitados o

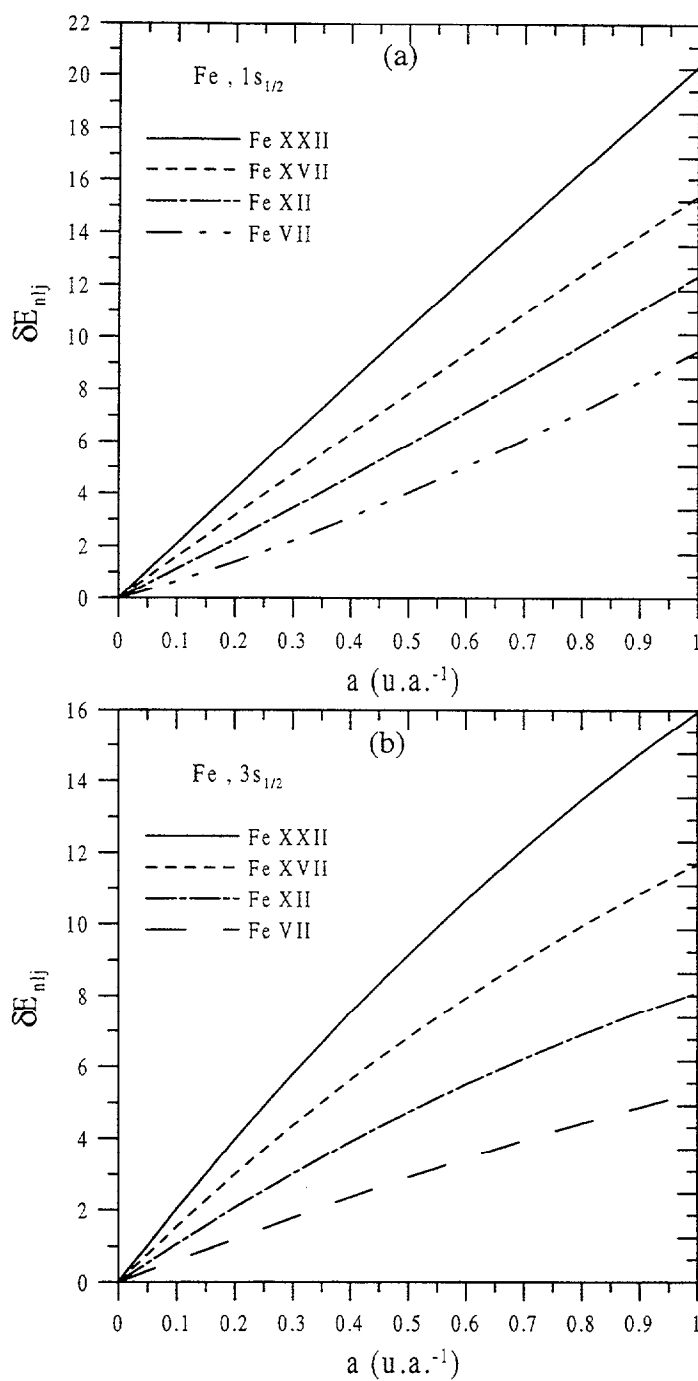




**Figura 12.** Representación de las energías de nivel en valor absoluto (en u.a.) de distintos iones de hierro frente al radio inverso de Debye, para los niveles  $1s_{1/2}$  (a) y  $3s_{1/2}$  (b).



**Figura 12 bis.** Representación de las energías de nivel en valor absoluto (en u.a.) de distintos iones de hierro frente al radio inverso de Debye, para los niveles  $5s_{1/2}$  (c) y  $7s_{1/2}$  (d).



**Figura 13.** Representación de los desplazamientos de nivel (en u.a.) de distintos iones de hierro frente al radio inverso de Debye, para los niveles  $1s_{1/2}$  (a) y  $3s_{1/2}$  (b).

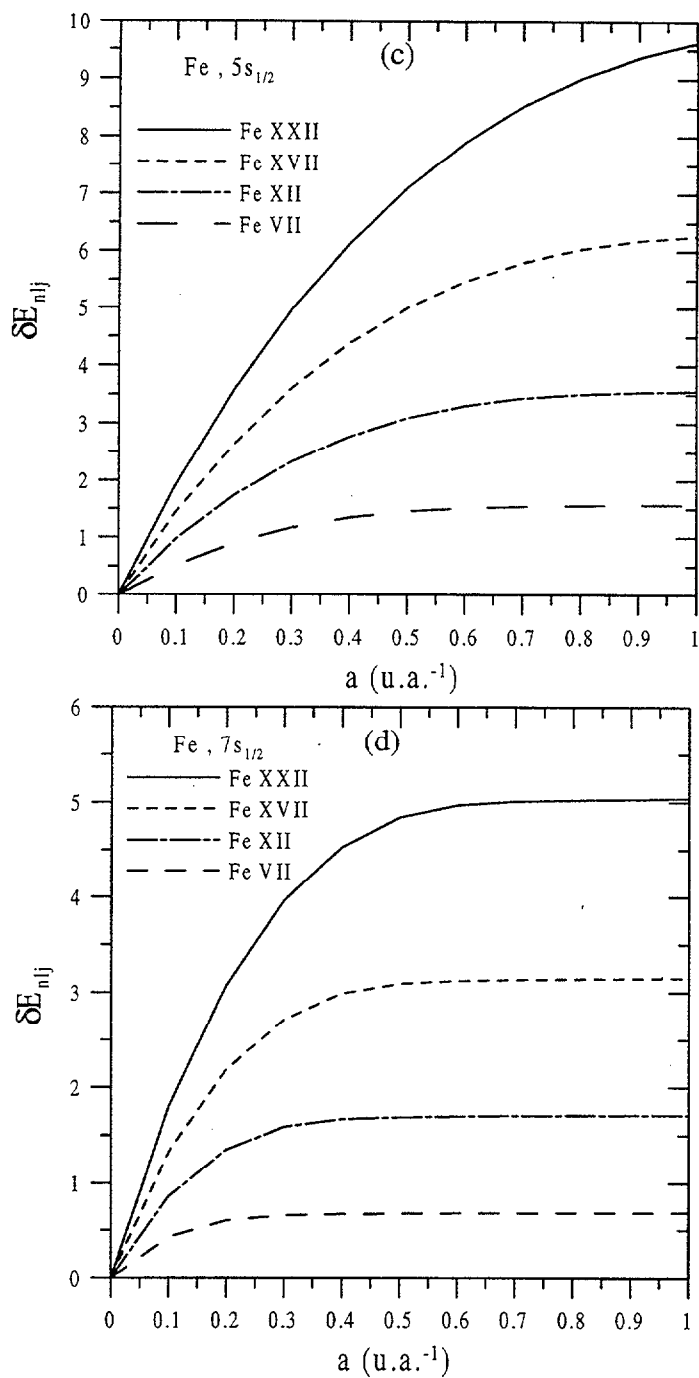


Figura 13 bis. Representación de los desplazamientos de nivel (en u.a.) de distintos iones de hierro frente al radio inverso de Debye, para los niveles  $5s_{1/2}$  (c) y  $7s_{1/2}$  (d).

externos. Por tanto, el desplazamiento de un nivel crece con  $a$  hasta un valor límite

$$\delta E_{nlj} = E_{nlj}^O - E_{nlj}^H.$$

Se observa para átomos muy ionizados que el desplazamiento del nivel  $1s_{1/2}$  tiene un comportamiento lineal con el radio inverso de Debye en el rango representado, mientras que éste desaparece al disminuir la ionicidad. Este comportamiento se ilustra en la figura 13 (a), donde para el ion Fe XXII se aprecia un comportamiento lineal de  $\delta E_{nlj}$  con  $a$ , comportamiento que no se da para el ion Fe VII. Se puede justificar a partir del comportamiento del potencial efectivo cerca del origen, que es la región del potencial que más influye en el valor de la energía del nivel  $1s_{1/2}$ . Para iones con un número de electrones menor o igual a once, el desplazamiento del nivel  $1s_{1/2}$  viene dado aproximadamente por

$$\delta E_{1s_{1/2}}^{AO} = a\chi + a^2(N-1) \left[ \frac{a_2}{a_1^2 - a^2} - a_1 C(a_1, a_2) \right] + a^3(N-1)C(a_1, a_2) \quad (4.54)$$

La expresión anterior ha sido obtenida aplicando la teoría de perturbaciones independiente del tiempo al potencial efectivo  $U_{ef}^{AO}$  cerca del origen, dado por (4.41). Para un átomo neutro, se anula el primer término en la expresión anterior y queda un comportamiento no lineal del desplazamiento con el radio inverso de Debye. Si aumentamos la ionicidad el primer término gana en importancia, y tenemos en cuenta que el parámetro  $a_1$  aumenta con la ionicidad dando lugar a una disminución del segundo y tercer término de la expresión anterior, se tiene finalmente un comportamiento lineal de  $\delta E_{nlj}^{AO}$  frente a  $a$ .

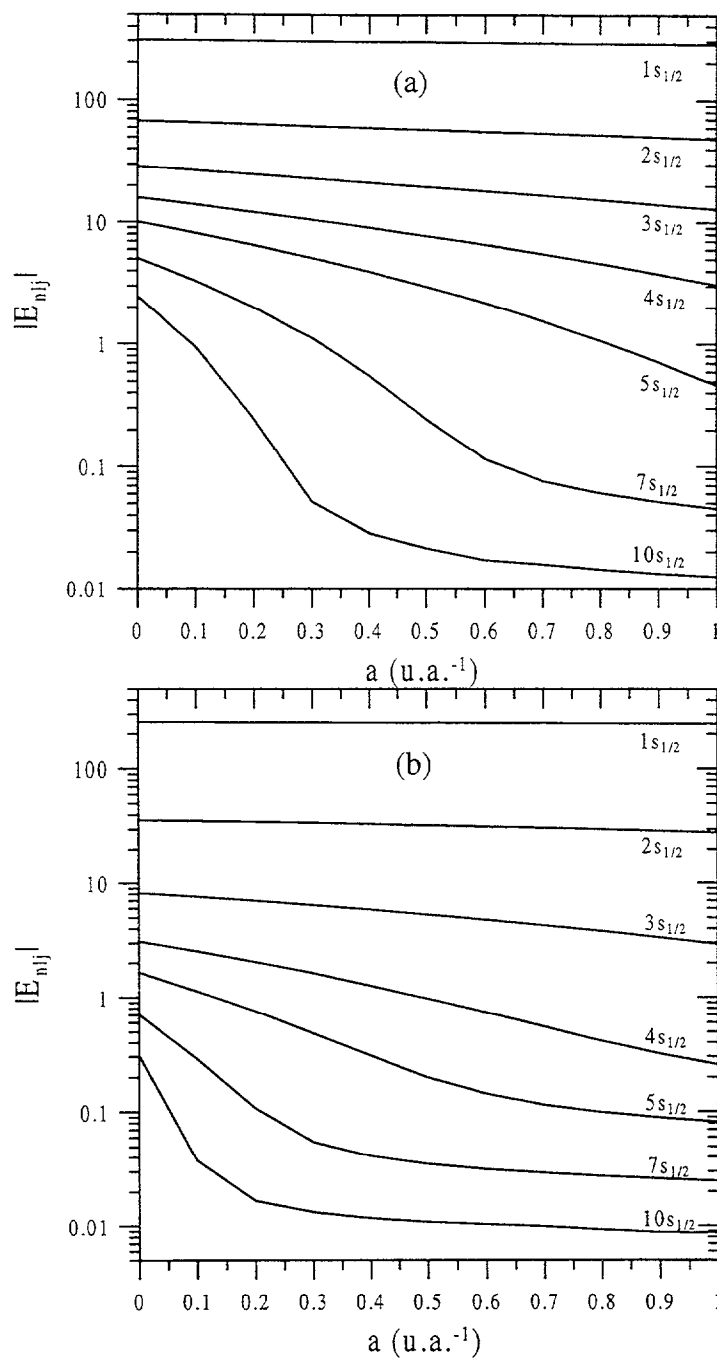
Una vez establecido el comportamiento de las energías de nivel y de los correspondientes desplazamientos con el radio inverso de Debye, se puede analizar el comportamiento de los niveles con la densidad y la temperatura recordando la relación de estas dos últimas magnitudes con  $a$ , que viene dada por

$$a \propto \left( \frac{\rho}{kT} \right)^{1/2} \quad (4.55)$$

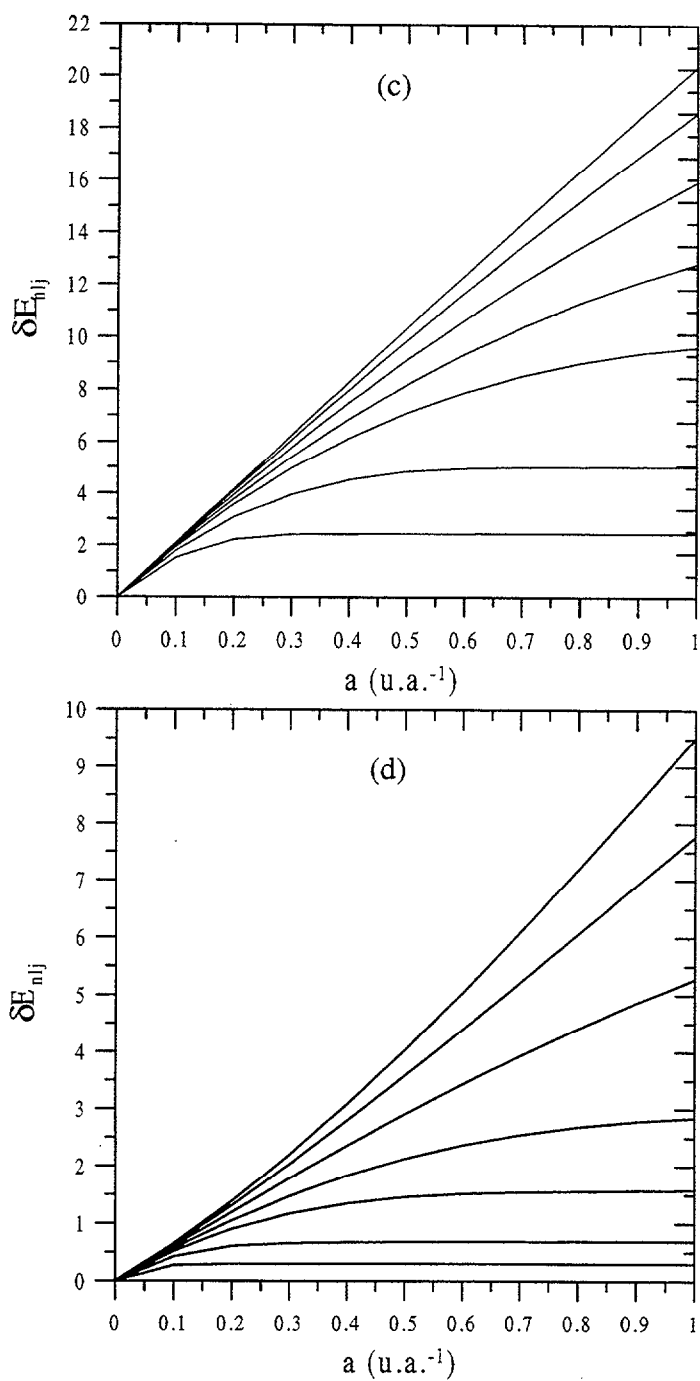
Por tanto, para una densidad fija al aumentar la temperatura se produce una disminución del radio inverso de Debye y como consecuencia según hemos visto una disminución del desplazamiento de nivel y un acercamiento de la energía del nivel hacia la energía aislada. Además esta disminución es mayor cuanto menor sea la densidad. Esto se puede explicar teniendo en cuenta que al aumentar la temperatura aumenta la energía cinética media de las partículas del plasma, y entonces son menos importantes los efectos de repulsión electrostática o de apantallamiento originados por el plasma.

Para una temperatura fija, al aumentar la densidad tenemos un aumento del radio inverso de Debye y por tanto un aumento del desplazamiento de nivel y un desplazamiento de la energía del nivel hacia el continuo. Además este desplazamiento es mayor cuanto menor sea la temperatura. Esto se podría explicar teniendo en cuenta que al aumentar la densidad se disminuye la distancia media entre las partículas del plasma y entonces aumentan en importancia los efectos de repulsión electrostática originados por el plasma.

Se han encontrado regularidades con los números cuánticos para los desplazamientos de nivel. Para un ion dado inmerso en un plasma a una densidad y temperatura dadas ( $Z$ ,  $N$  y  $a$  fijos), se cumple que los desplazamientos de nivel presentan una fuerte dependencia con el número cuántico principal  $n$ , de manera que cuando éste aumenta, el desplazamiento de nivel disminuye. Este comportamiento se ilustra en la figura 14, donde se representan las energías en valor absoluto y desplazamientos de diferentes niveles para los iones Fe XXII y Fe VII, así como en la tabla 3, donde se muestran los desplazamientos para estos mismos iones de hierro y diferentes niveles con  $l=0$ . Se ha escogido el eje de energías de las gráficas de la figura 14 a y b con escala logarítmica con el fin de poder representar distintos niveles.



**Figura 14.** Representación de las energías de nivel en valor absoluto (en u.a.) frente al radio inverso de Debye para el ion Fe XXII.



**Figura 14 bis.** Representación de los desplazamientos de nivel (en u.a.) frente al radio inverso de Debye para el ion Fe VII. El orden de los niveles sigue siendo el mismo que el de la figura 14 a y b.



$a$	$\delta E_{1S1/2}$	$\delta E_{2S1/2}$	$\delta E_{3S1/2}$	$\delta E_{4S1/2}$	$\delta E_{5S1/2}$	$\delta E_{6S1/2}$	$\delta E_{7S1/2}$	$\delta E_{8S1/2}$	$\delta E_{9S1/2}$	$\delta E_{10S1/2}$
0.1	2.094	2.074	2.041	1.995	1.938	1.870	1.794	1.710	1.621	1.526
0.2	4.176	4.099	3.969	3.7959	3.584	3.342	3.079	2.800	2.514	2.224
0.3	6.245	6.074	5.790	5.417	4.975	4.485	3.965	3.433	2.909	2.420
0.4	8.303	8.002	7.511	6.877	6.143	5.348	4.530	3.727	3.006	2.443
0.5	10.349	9.884	9.135	8.187	7.111	5.974	4.842	3.813	3.023	2.450
0.6	12.383	11.720	10.668	9.358	7.901	6.398	4.972	3.833	3.031	2.456
0.7	14.406	13.512	12.113	10.400	8.530	6.655	5.011	3.842	3.035	2.456
0.8	16.417	15.261	13.475	11.322	9.016	6.786	5.026	3.848	3.037	2.457
0.9	18.416	16.968	14.757	12.131	9.375	6.840	5.036	3.851	3.039	2.458
1	20.405	18.633	15.963	12.836	9.624	6.863	5.042	3.854	3.041	2.459

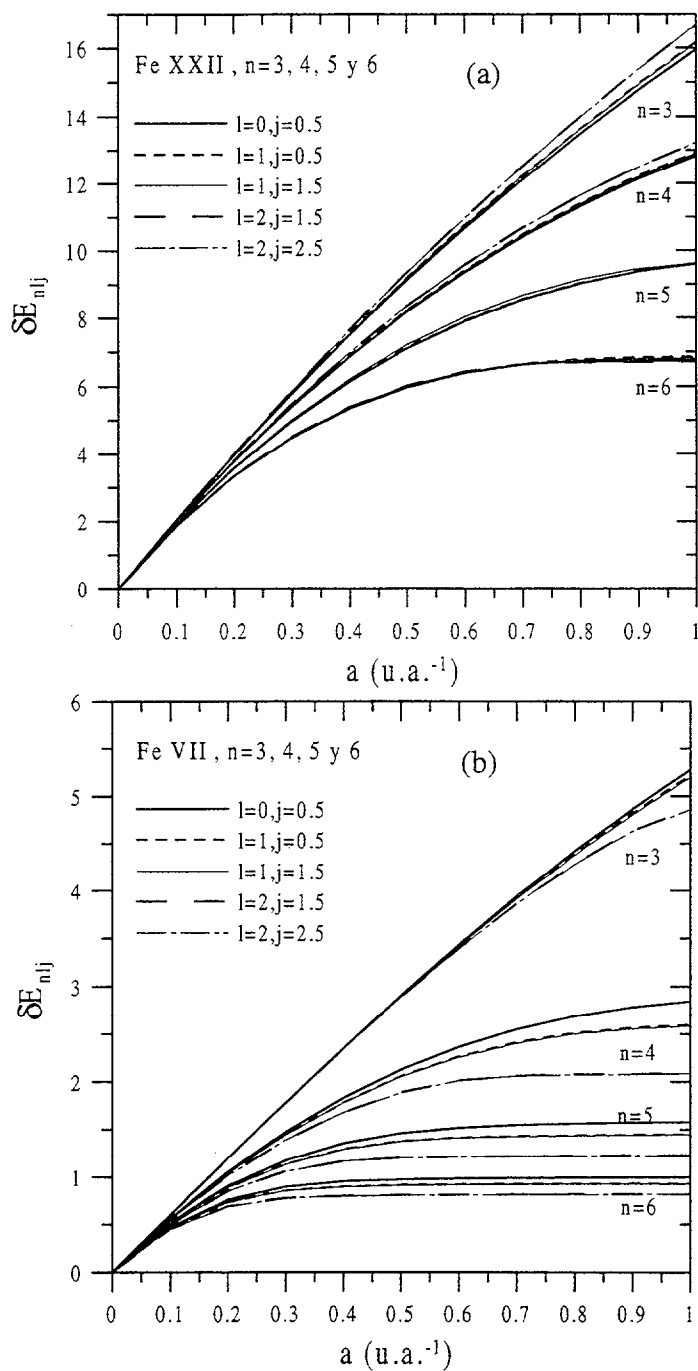
**Tabla 3a.** Desplazamientos de nivel del ion Fe XXII para niveles con momento angular nulo y diferentes radios inversos de Debye.

$a$	$\delta E_{1S1/2}$	$\delta E_{2S1/2}$	$\delta E_{3S1/2}$	$\delta E_{4S1/2}$	$\delta E_{5S1/2}$	$\delta E_{6S1/2}$	$\delta E_{7S1/2}$	$\delta E_{8S1/2}$	$\delta E_{9S1/2}$	$\delta E_{10S1/2}$
0.1	1.1173	1.0984	1.0672	1.0266	0.9777	0.9213	0.8587	0.7915	0.7216	0.6498
0.2	2.2676	2.1924	2.0711	1.9186	1.7435	1.5511	1.3491	1.1457	0.9511	0.7794
0.3	3.4482	3.2803	3.0145	2.6912	2.3342	1.9590	1.5869	1.2488	0.9837	0.7907
0.4	4.6569	4.3607	3.8999	3.3561	2.7772	2.1961	1.6682	1.2676	0.9908	0.7944
0.5	5.8916	5.4322	4.7293	3.9234	3.0949	2.3101	1.6895	1.2746	0.9941	0.7963
0.6	7.1503	6.4936	5.5046	4.4007	3.3083	2.3538	1.6986	1.2784	0.9961	0.7975
0.7	8.4311	7.5437	6.2275	4.7967	3.4386	2.3710	1.7040	1.2809	0.9975	0.7982
0.8	9.7324	8.5818	6.8997	5.1185	3.5093	2.3807	1.7075	1.2826	0.9984	0.7988
0.9	11.0526	9.6068	7.5225	5.3731	3.5449	2.3874	1.7102	1.2839	0.9992	0.7991
1	12.3903	10.6180	8.0975	5.5683	3.5635	2.3921	1.7121	1.2849	0.9997	0.7996

**Tabla 3b.** Desplazamientos de nivel del ion Fe VII para niveles con momento angular nulo y diferentes radios inversos de Debye.

Por ejemplo para el ion Fe VII se ve en la tabla 3b que el desplazamiento disminuye desde el valor 1.1173 u.a. para  $n=1$  hasta el valor 0.6498 u.a. para  $n=10$ , cuando  $a=0.1$  u.a.<sup>-1</sup>; cuando el radio inverso de Debye vale 0.5 u.a.<sup>-1</sup> la disminución va desde el valor 5.8916 u.a. hasta 0.7963 u.a.. Por tanto para radios inversos de Debye grandes, las diferencias entre los desplazamientos de los distintos niveles se hace mayor que para radios inversos pequeños como también se ilustra en las figuras 14 c y d. En estas mismas figuras también se aprecia la tendencia de los niveles de energía a acercarse a un valor constante igual a la energía del átomo de hidrógeno cuando aumenta  $a$ , sobre todo para los niveles más externos que en la figura 14 bis son los niveles  $7s_{1/2}$  y  $10s_{1/2}$ .

Además se tiene para pequeños radios inversos de Debye, que dos niveles con igual número cuántico  $n$  presentan desplazamientos similares (es decir, para dos niveles  $k(nlj)$  y  $k'(n'l'j')$  se cumple que si  $n'>n$  entonces  $\delta E_k > \delta E_{k'}$ , y que si  $n=n'$  entonces  $\delta E_k \approx \delta E_{k'}$ ). Este comportamiento se ilustra en la figura 15, donde se representan para los iones Fe XXII (15a) y Fe VII(15b) los desplazamientos de los niveles con número cuántico principal  $n=3, 4, 5$  y  $6$ , y diferentes valores de los números cuánticos  $l$  y  $j$ . Todos los desplazamientos parten del valor cero para la situación aislada ( $a=0$ ) y conforme aumenta el radio inverso de Debye la energía  $E_{nlj}$  de cada nivel tiende al valor de la energía  $E_{nlj}^H$  del átomo de hidrógeno, como ya hemos visto, y eso da lugar a una diferencia entre los desplazamientos de los niveles con igual número cuántico principal, como se puede observar en la figura 15 a y b. Estos comportamientos también se pueden observar en la tabla 4 donde muestran los desplazamientos de nivel para los niveles con número cuántico principal  $n=3,5$  con diferentes valores de los números cuánticos  $l$  y  $j$ , para los mismos iones de la figura 15. Por ejemplo, para el ion Fe XXII en un plasma con  $a=0.1$  u.a.<sup>-1</sup> se tiene que el desplazamiento de todos los niveles con  $n=3$  oscila entre 2.041 u.a. para el nivel con  $l=0$  y  $j=1/2$  (ver tabla 3a), y 2.0516 u.a. cuando  $l=2$  y  $j=3/2$  (ver tabla 4a), correspondiéndole a esta capa un desplazamiento medio de 2.0478 u.a.; para los



**Figura 15.** Representación de los desplazamientos de nivel (en u.a.) frente al radio inverso de Debye para diferentes niveles con número cuántico principal  $n=3, 4, 5$  y  $6$ , y los iones Fe XXII (a) y Fe VII (b).

$a$	$\delta E_{3P1/2}$	$\delta E_{3P3/2}$	$\delta E_{3D3/2}$	$\delta E_{3D5/2}$	$\delta E_{5P1/2}$	$\delta E_{5P3/2}$	$\delta E_{5D3/2}$	$\delta E_{5D5/2}$	$\delta E_{5F5/}$	$\delta E_{5F7/}$
									2	2
0.1	2.0442	2.0438	2.0516	2.0515	1.9397	1.9392	1.9455	1.9453	1.9573	1.9572
0.2	3.9810	3.9796	4.0095	4.0090	3.5900	3.5880	3.6106	3.6100	3.6532	3.6529
0.3	5.8161	5.8132	5.8778	5.8769	4.9880	4.9839	5.0290	5.0278	5.1149	5.1143
0.4	7.5546	7.5495	7.6602	7.6585	6.1622	6.1554	6.2258	6.2237	6.3620	6.3610
0.5	9.2008	9.1931	9.3596	9.3570	7.1355	7.1257	7.2205	7.2176	7.4088	7.4073
0.6	10.7588	10.7479	10.9787	10.9751	7.9275	7.9144	8.0293	8.0253	8.2648	8.2628
0.7	12.2320	12.2176	12.5199	12.5151	8.5551	8.5384	8.6650	8.6599	8.9351	8.9325
0.8	13.6236	13.6054	13.9852	13.9790	9.0339	9.0134	9.1387	9.1325	9.4169	9.4138
0.9	14.9367	14.9143	15.3762	15.3686	9.3789	9.3547	9.4592	9.4517	9.6633	9.6592
1	16.1740	16.1469	16.6946	16.6854	9.6062	9.5785	9.6341	9.6255	9.6656	9.6614

**Tabla 4a.** Desplazamientos de nivel del ion Fe XXII para los niveles con  $n=3,5$  para diferentes valores del momento angular y diferentes radios inversos de Debye.

$a$	$\delta E_{3P1/2}$	$\delta E_{3P3/2}$	$\delta E_{3D3/2}$	$\delta E_{3D5/2}$	$\delta E_{5P1/2}$	$\delta E_{5P3/2}$	$\delta E_{5D3/2}$	$\delta E_{5D5/2}$	$\delta E_{5F5/2}$	$\delta E_{5F7/2}$
0.1	1.0672	1.0669	1.0686	1.0685	0.9741	0.9737	0.9695	0.9694	0.9726	0.9725
0.2	2.0712	2.0699	2.0762	2.0759	1.7307	1.7291	1.7132	1.7128	1.7219	1.7218
0.3	3.0145	3.0118	3.0246	3.0238	2.3071	2.3040	2.2679	2.2672	2.2780	2.2778
0.4	3.8993	3.8948	3.9145	3.9133	2.7307	2.7258	2.6587	2.6576	2.6569	2.6566
0.5	4.7274	4.7205	4.7465	4.7446	3.0239	3.0171	2.9048	2.9035	2.8616	2.8612
0.6	5.5002	5.4906	5.5201	5.5175	3.2079	3.1992	3.0264	3.0244	2.8995	2.8990
0.7	6.2189	6.2063	6.2345	6.2311	3.3066	3.2963	3.0631	3.061	2.9026	2.9021
0.8	6.8846	6.8686	6.8883	6.8840	3.3505	3.3392	3.0728	3.0706	2.9123	2.9118
0.9	7.4981	7.4785	7.4793	7.4741	3.3692	3.3575	3.0799	3.0777	2.9126	2.9121
1	8.0604	8.0369	8.0043	7.9980	3.3792	3.3675	3.0877	3.0855	2.9127	2.9122

**Tabla 4b.** Desplazamientos de nivel del ion Fe VII para los niveles con  $n=3,5$  para diferentes valores del momento angular y diferentes radios inversos de Debye.

niveles con  $n=5$  de este mismo ion se obtienen unos desplazamientos que oscilan entre 1.938 y 1.9573 u.a., y tiene esta capa un desplazamiento medio de 1.9490 u.a, datos que corroboran los comportamientos indicados con el número cuántico principal  $n$ .

El comportamiento de los desplazamientos de nivel es más complejo cuando analizamos estados con el mismo número cuántico principal para cualquier radio inverso de Debye, sin embargo sí hay un comportamiento simple cuando el número cuántico orbital  $l$  permanece constante. Si bien por ser estados con igual  $n$  los desplazamientos son similares, como se vio anteriormente, en este caso el desplazamiento de nivel disminuye ligeramente al aumentar el número cuántico de momento angular total  $j$ . (Es decir, para dos estados  $k(nlj)$  y  $k'(n'l'j')$  se cumple que si  $n=n'$ ,  $l=l'$  y  $j < j'$ , entonces  $\delta E_k > \delta E_{k'}$ ). En la tabla 4 se puede observar este comportamiento para el ion Fe VII (ver tabla 4b) donde para  $a=0.1$  u.a.<sup>-1</sup>,  $n=3$  y  $l=1$ , el desplazamiento disminuye de 1.0672 u.a. para  $j=1/2$  a 1.0669 u.a. para  $j=3/2$ .

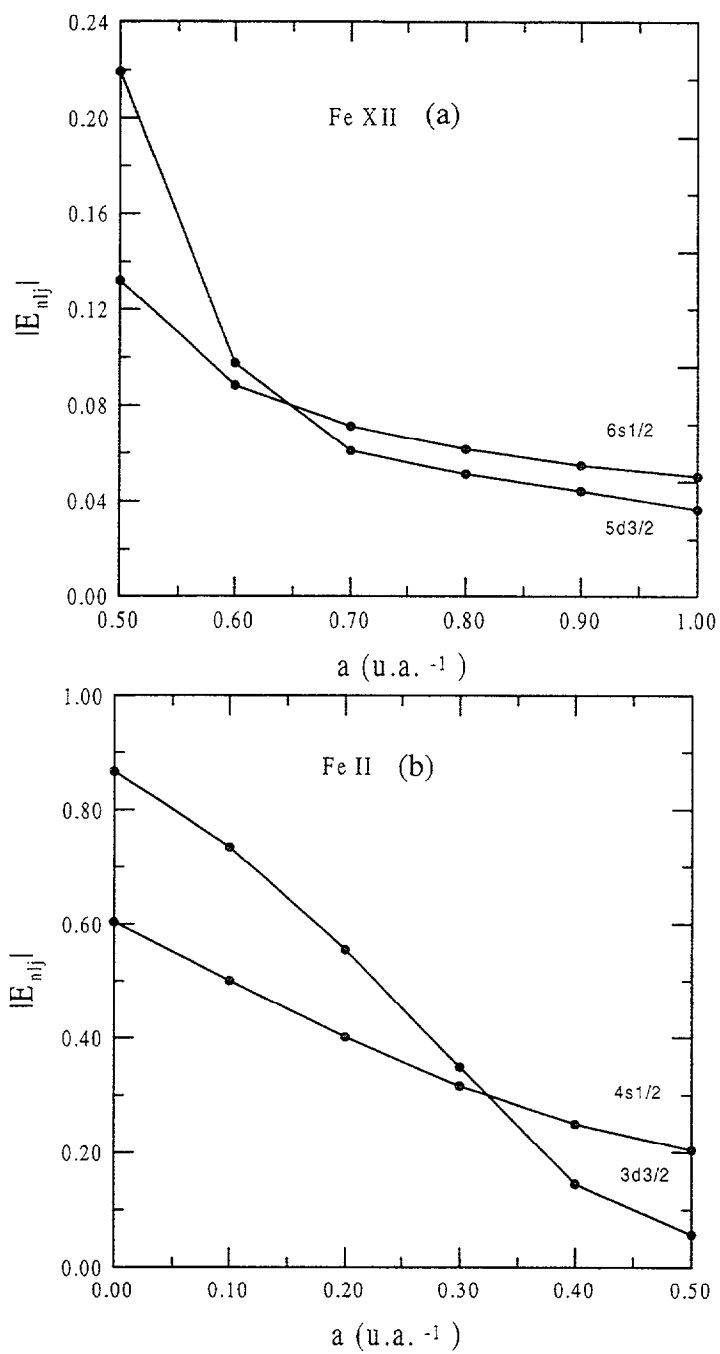
Si el momento angular  $j$  total permanece constante, el desplazamiento de nivel puede aumentar o disminuir cuando aumenta el número cuántico orbital, como se ilustra en la figura 15, donde para el ion Fe XXII se produce un aumento del desplazamiento de la energía al aumentar  $l$  y para el ion Fe VII se produce una disminución. Teniendo en cuenta que la energía de un ion aislado disminuye al aumentar el número cuántico  $l$ , para el primer ion se producirá una compresión de los niveles de energía y para el segundo ion una descompresión. El comportamiento general es que los desplazamientos aumenten con  $l$  cuando se trata de niveles poco excitados, y se observa una inversión de este comportamiento cuando aumenta el número cuántico principal, el número de electrones del ion (disminuye la ionicidad) o el radio inverso de Debye. Para el caso del ion de hierro con once electrones y un radio inverso de Debye de 0.1 u.a.<sup>-1</sup> hemos visto como las capas con  $n=2,3,4$  y 5 tienen un desplazamiento creciente con  $l$ , mientras que para  $n$  mayor que cinco el desplazamiento disminuye. Este comportamiento también lo vemos para los iones de

hierro con cinco y veinticinco electrones, si bien la inversión del comportamiento del desplazamiento con  $l$  se produce a partir de la capa con  $n=8$  en el caso del hierro con cinco electrones, y a partir de la capa  $n=3$  para el hierro con veinticinco electrones.

Con los comportamientos observados para las energías de nivel y sus desplazamientos, el efecto del plasma sobre las energías de nivel es comprimir las distintas capas del ion, es decir, acercar las energías de los niveles con distinto número cuántico principal; comprimir los estados que sólo se diferencian en el momento angular total, con lo que tiende a desaparecer la estructura fina; y dependiendo de la capa, acercar o alejar las energías de los niveles de una misma capa con distintos números cuánticos orbitales. Este último comportamiento puede traer consigo un cambio en la ordenación de algunos niveles, o inversión al aumentar  $a$ , si ordenamos los niveles en orden decreciente de energías en valor absoluto y tomamos como referencia el orden de los niveles en situación aislada. Por ejemplo en la figura 16a podemos observar esta inversión entre las energías de los niveles  $5d_{3/2}$  y  $6s_{1/2}$  del ion de hierro con quince electrones, produciéndose la inversión para un valor de  $a$  entre  $0.6$  y  $0.7$  u.a.<sup>-1</sup>; también se tiene inversión entre los niveles  $3d_{3/2}$  y  $4s_{1/2}$  del ion de hierro con veinticinco electrones, produciéndose la inversión entre  $0.3$  y  $0.4$  u.a.<sup>-1</sup>, como se ilustra en la figura 16b.

A continuación analizamos el comportamiento de las energías de nivel y de los desplazamientos, con la carga nuclear, el número de electrones y la ionicidad. Para un ion con carga nuclear  $Z$  inmerso en un plasma a una densidad y temperatura dadas ( $Z$  y  $a$  fijos), los niveles de energía se desplazan menos hacia el continuo cuando aumenta el número de electrones del ion, y por tanto, el desplazamiento que sufre un nivel disminuye cuando aumenta el número de electrones  $N$ .

Para un ion con  $N$  electrones inmerso en un plasma a una densidad y temperatura dadas ( $N$  y  $a$  fijos), los niveles de energía se desplazan más hacia el



**Figura 16.** Representación de las energías de nivel en valor absoluto (en u.a.) frente al radio inverso de Debye para los iones Fe XII (a) y Fe II (b).

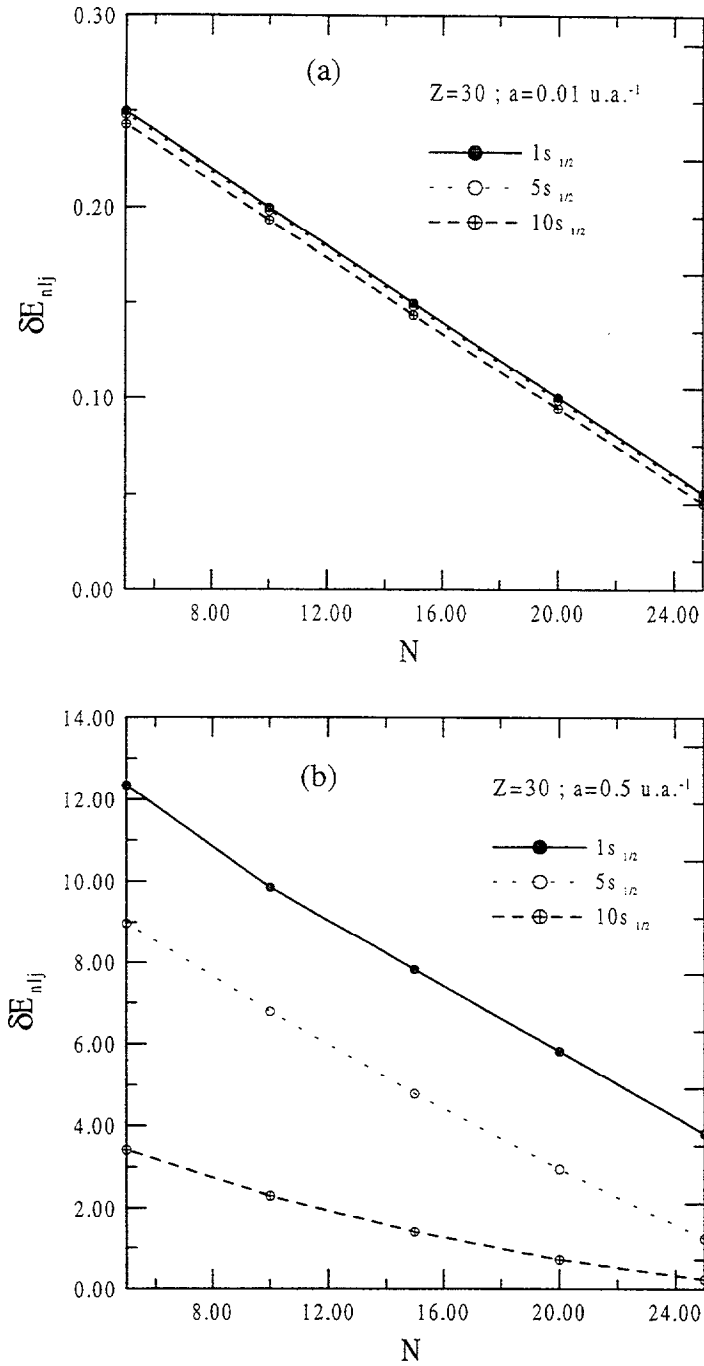
continuo cuando aumenta la carga nuclear  $Z$ , y por tanto, el desplazamiento aumenta con la carga nuclear  $Z$ .

Estos comportamientos se ilustran en la figura 17 donde se representa, para los radios de Debye de 0.01 y 0.5 u.a. y los niveles  $1s_{1/2}$ ,  $5s_{1/2}$  y  $10s_{1/2}$ , el desplazamiento de nivel para una carga nuclear fija  $Z=30$  frente al número de electrones (figuras 17 a y b), o el desplazamiento de un nivel para un número de electrones fijo  $N=5$  frente a la carga nuclear (figuras 17 c y d). Para radios de Debye pequeños,  $0.01 \text{ u.a.}^{-1}$  en las figuras, vemos que los desplazamientos tienden a un comportamiento lineal para los tres niveles representados, tanto con el número de electrones como con la carga nuclear. Este comportamiento lineal desaparece al aumentar el radio inverso, como podemos apreciar en las figuras 17 b y d correspondientes a un radio inverso de  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ , si bien siempre los desplazamientos de los niveles excitados dejan de comportarse de forma lineal para radios inversos más pequeños que los desplazamientos de los niveles poco excitados.

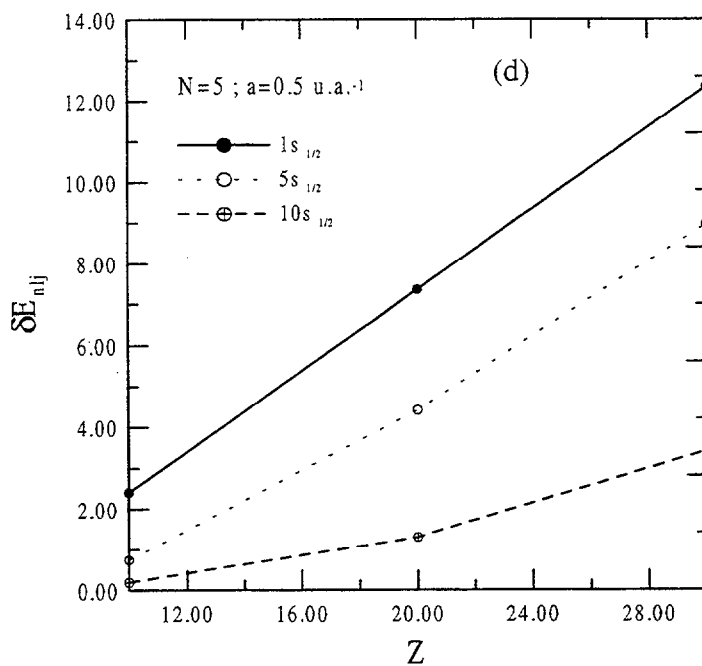
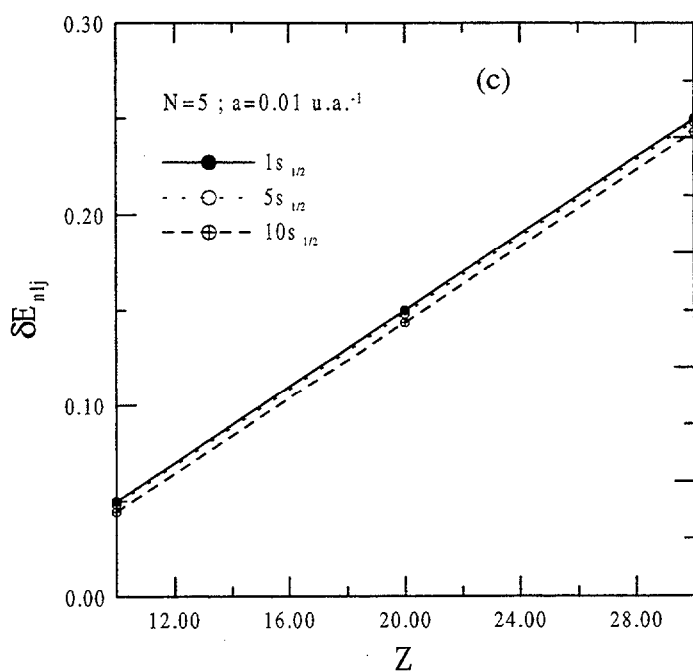
Ambos comportamientos dan lugar a que manteniendo constante el radio inverso de Debye, el desplazamiento de un nivel aumente cuando aumenta la ionicidad. Este comportamiento se muestra en la tabla 5, donde se representa el desplazamiento del nivel  $1s_{1/2}$  para diferentes iones y distintos radios inversos de Debye y el desplazamiento medio para cada ionicidad. Si para cada ionicidad nos centramos en dicha tabla en los iones de menor carga nuclear y número de electrones se aprecia para un radio inverso de Debye de  $0.01 \text{ u.a.}^{-1}$  que el desplazamiento del nivel  $1s_{1/2}$  crece al aumentar la ionicidad. Este desplazamiento toma el valor de  $0.0499 \text{ u.a.}$  para una ionicidad igual a cinco, hasta el valor  $0.2499 \text{ u.a.}$  para una ionicidad de veinticinco; para estas mismas ionicidades y un radio  $a=0.1 \text{ u.a.}^{-1}$  se tiene un aumento desde el valor  $0.4961 \text{ u.a.}$  hasta  $2.939 \text{ u.a.}$ .

Además se encuentra que para radios inversos de Debye pequeños y para una ionicidad fija el desplazamiento de un nivel varía poco cuando variamos la carga





**Figura 17.** Representación de los desplazamientos de nivel (en u.a.) frente al número de electrones  $N$  para iones con carga nuclear  $Z=30$  y radios inversos de  $a=0.01 \text{ u.a.}^{-1}$  (a) y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$  (b).



**Figura 17bis.** Representación de los desplazamientos de nivel (en u.a.) frente a la carga nuclear  $Z$  para iones con un número de electrones  $N=5$  y radios inversos de  $a=0.01 \text{ u.a.}^{-1}$  (c) y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$  (d).

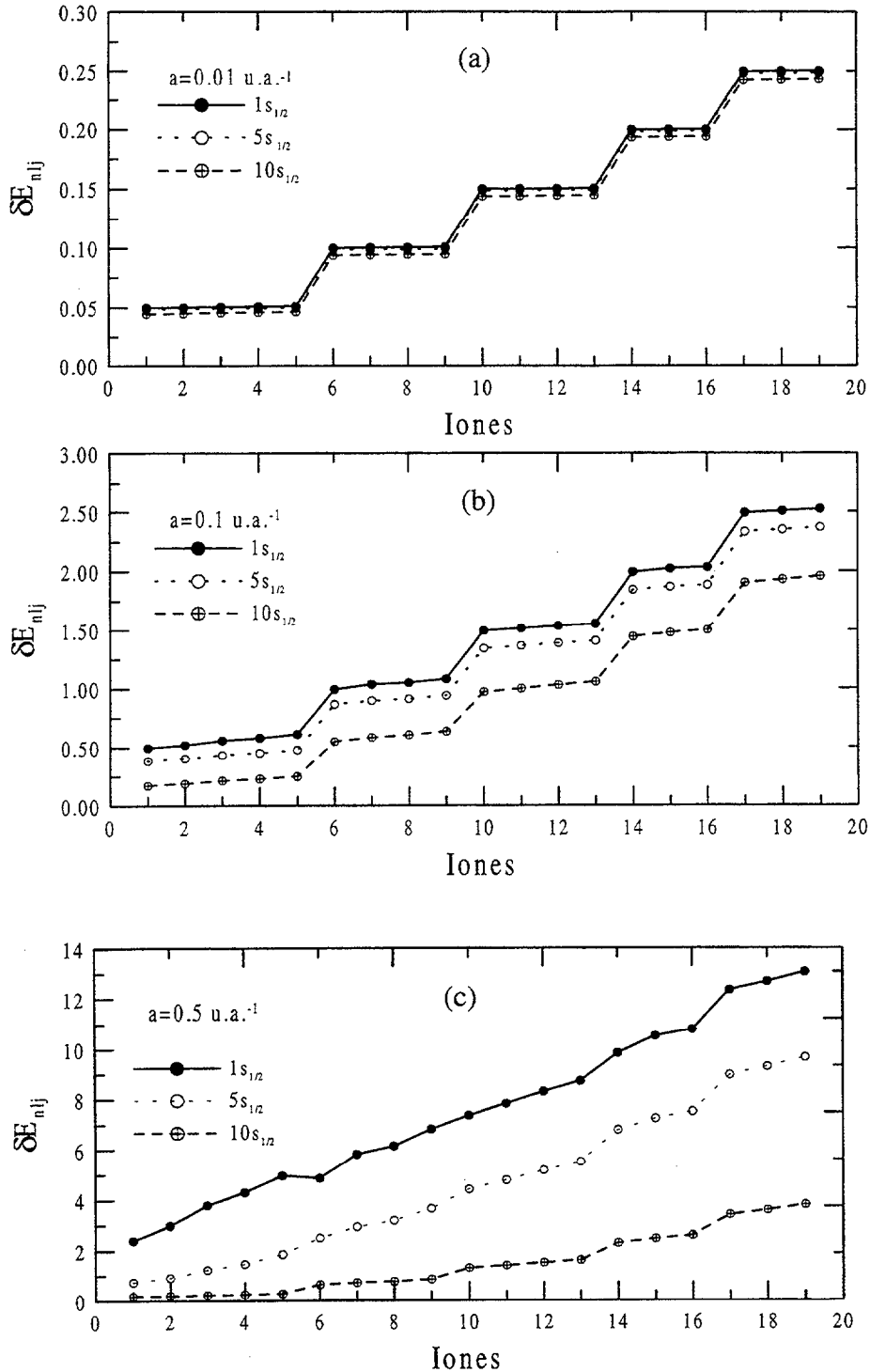
nuclear o el número de electrones, aunque para una ionicidad dada el desplazamiento es mayor para los iones con mayor carga nuclear y mayor número de electrones. Al aumentar el radio inverso empiezan a crecer las diferencias de los desplazamientos de iones con igual ionicidad. También en la tabla 4 se puede observar este comportamiento. Por ejemplo, para una ionicidad de cinco y un radio inverso de  $0.01 \text{ u.a.}^{-1}$  vemos en la tabla que todos los iones con una ionicidad igual a cinco tienen unos desplazamientos cercanos al valor  $0.0506 \text{ u.a.}$ , pasando el desplazamiento desde  $0.0499 \text{ u.a.}$ , para el ion con carga nuclear de  $Z=10$  y número de electrones  $N=5$ , hasta  $0.0511 \text{ u.a.}$  cuando la carga nuclear y el número de electrones crecen hasta  $50$  y  $45$  respectivamente; por tanto se tiene una diferencia de  $0.001 \text{ u.a.}$  entre el mayor y el menor desplazamiento. Para esta misma ionicidad pero un radio inverso de  $0.1 \text{ u.a.}^{-1}$ , se observa una mayor diferencia entre los desplazamientos de los iones, ya que el desplazamiento pasa del valor  $0.4961 \text{ u.a.}$  para el ion con  $Z=10$  y  $N=5$  a  $0.6132 \text{ u.a.}^{-1}$  para el ion con  $Z=50$  y  $N=45$ ; es decir, ahora la diferencia entre el mayor y menor desplazamiento es  $0.12 \text{ u.a.}$ . Para el caso de un radio inverso de Debye de  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$  esta diferencia entre los desplazamientos a una misma ionicidad vale  $2.56 \text{ u.a.}$ .

Con el objeto de ilustrar gráficamente estos resultados, en la figura 18 se ha representado en el eje de ordenadas el desplazamiento de los niveles  $1s_{1/2}$ ,  $5s_{1/2}$  y  $10s_{1/2}$  de un gran número de iones de distintas especies químicas, y se ha utilizado el eje de abscisas para ordenar los iones en orden creciente de ionicidad, después de carga nuclear, y por último, por orden creciente de número de electrones. Se han representado los mismos iones que los que aparecen en la tabla 5 de manera que el desplazamiento que se corresponde con  $\chi=1$  es el del ion con  $Z=10$  y  $N=5$  (de menor ionicidad, menor carga nuclear y menor número de electrones) y el que corresponde con  $\chi=19$  es del ion con  $Z=50$  y  $N=45$  (de mayor ionicidad, mayor carga y mayor número de electrones). En dicha figura se han representado los desplazamientos correspondientes a los radios inversos de Debye de  $0.01$ ,  $0.1$  y  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$ , y vemos para cada radio que aumenta el desplazamiento al aumentar la ionicidad, y para radios inversos de Debye pequeños ( $a=0.01 \text{ u.a.}$ ) que los desplazamientos son

$\delta E_{1s_{1/2}}$						
$Z$	$N$	$\chi$	$a=0.01$	$a=0.05$	$a=0.1$	$a=0.5$
10	5	5	0.0499	0.2490	0.4961	2.4052
20	15	5	0.0502	0.2557	0.5223	2.9960
30	25	5	0.0507	0.2653	0.5599	3.8060
40	35	5	0.0510	0.2712	0.5822	4.3052
50	45	5	0.0511	0.2792	0.6132	4.9610
$\chi=5$	$\delta E_m$		0.0506	0.2641	0.5547	3.6965
20	10	10	0.1000	0.4987	0.9947	4.8670
30	20	10	0.1004	0.5094	1.0371	5.8211
40	30	10	0.1007	0.5128	1.0502	6.1449
50	40	10	0.1009	0.5210	1.0818	6.8241
$\chi=10$	$\delta E_m$		0.1005	0.5105	1.0410	5.9143
20	5	15	0.1500	0.7486	1.4944	7.3592
30	15	15	0.1501	0.7535	1.5142	7.8259
40	25	15	0.1503	0.7590	1.5353	8.3088
50	35	15	0.1506	0.7635	1.5539	8.7317
$\chi=15$	$\delta E_m$		0.1502	0.7562	1.5244	8.0564
30	10	20	0.1999	0.9985	1.9937	9.8508
40	20	20	0.2002	1.0058	2.0230	10.5215
50	30	20	0.2003	1.0084	2.0343	10.7948
$\chi=20$	$\delta E_m$		0.2001	1.0042	2.0170	10.3890
30	5	25	0.2499	1.2484	2.4939	12.3452
40	15	25	0.2502	1.2522	2.5084	12.6965
50	25	25	0.2504	1.2563	2.5245	13.0670
$\chi=25$	$\delta E_m$		0.2501	1.2523	2.5089	12.7029

**Tabla 5.** Desplazamientos del nivel  $1s_{1/2}$  para distintos iones y radios inversos de Debye, así como el desplazamiento medio  $\delta E_m$  para cada ionicidad.

muy parecidos para una misma de ionicidad. Esta relación entre el desplazamiento y la ionicidad se traduce en dicha figura en una estructura en forma de escalera en la que podemos asociar cada escalón a una ionicidad, y asignar a cada ionicidad un valor medio del desplazamiento. También observamos que esta estructura se va descomponiendo al aumentar el radio inverso de Debye, de modo que los peldaños asociados a cada ionicidad adquieren una cierta inclinación de pendiente positiva que se corresponde con el aumento del desplazamiento al aumentar  $Z$  y  $N$ , como había sido comentado. Estas estructuras se mantienen hasta radios inversos de  $0.3$  u.a. aproximadamente, y para radios inversos mayores, desaparece esta estructura aunque se mantiene el aumento del desplazamiento con el aumento de  $Z$  y  $N$  a una ionicidad constante.



**Figura 18.** Representación de los desplazamientos de nivel (en u.a.) para diferentes iones, ordenados en el eje de abscisas en orden creciente de ionicidad, carga nuclear y número de electrones.

Por último se ha calculado el desplazamiento relativo en tanto por ciento de un nivel, dado por

$$(\delta E_{nlj})_{rel} = \frac{\delta E_{nlj}}{E_{nlj}^0} \times 100 \quad (4.56)$$

con el objeto de poder estimar la influencia del plasma relativa a los niveles de energía aislados.

En la tabla 6 se muestra el desplazamiento relativo de los niveles  $1s_{1/2}$  (6a),  $3s_{1/2}$  (6b) y  $5s_{1/2}$  (6c) para distintos iones y radios inversos de Debye. El desplazamiento relativo aumenta con el radio inverso, como era de esperar ya que el desplazamiento de nivel lo hace, y se puede ver también en esta tabla que el desplazamiento relativo crece cuando aumenta el número cuántico principal del nivel, al contrario de lo que ocurría con el desplazamiento. Por ejemplo se obtiene un desplazamiento relativo para el ion con  $Z=10$ ,  $N=5$  ( $\chi=5$ ) y un radio inverso de  $0.01$  u.a. de  $0.13\%$  para el nivel  $1s_{1/2}$  y de un  $6\%$  para el nivel  $5s_{1/2}$ . Estos porcentajes crecen de manera importante al aumentar el radio inverso de Debye, de modo que para un radio de  $0.1$  u.a. se tienen desplazamientos relativos para los mismos niveles del  $1.3\%$  y del  $47.5\%$ .

En resumen, el desplazamiento de nivel disminuye y el desplazamiento relativo de nivel aumenta cuando crece el número cuántico principal  $n$ , y entonces se tiene que la influencia del plasma sobre las energías de nivel, respecto de las energías en situación aislada, son más importantes en los niveles externos que en los niveles internos.

Además se puede observar para cualquier radio inverso que el desplazamiento relativo de nivel no tiene una clara dependencia con la ionicidad, hecho que sí ocurría con el desplazamiento de nivel. Esto se puede observar también en la tabla 6 donde se tienen desplazamientos relativos muy distintos para algunos iones con igual

$(\delta E)_{rel} 1s_{1/2} (\%)$							
Z	N	$\chi$	$a=0.01$	$a=0.05$	$a=0.1$	$a=0.5$	$a=1$
10	5	5	0.1347	0.6713	1.3375	6.4844	12.4896
20	15	5	0.0377	0.1921	0.3924	2.2504	5.0587
30	25	5	0.0144	0.0755	0.1594	1.0836	2.7062
40	35	5	0.0079	0.0423	0.0907	0.6708	1.7578
50	45	5	0.0049	0.027	0.0592	0.48	1.3072
20	10	10	0.0647	0.3225	0.6431	3.147	6.1249
30	20	10	0.0282	0.1428	0.2908	1.6322	3.6058
40	30	10	0.0152	0.0775	0.1588	0.929	2.134
50	40	10	0.0096	0.0497	0.1032	0.6512	1.5682
20	5	15	0.0866	0.4324	0.8632	4.2509	8.344
30	15	15	0.0410	0.2061	0.4141	2.1403	4.4216
40	25	15	0.0224	0.1133	0.2292	1.2403	2.6745
50	35	15	0.014	0.0712	0.1449	0.8142	1.8146
30	10	20	0.0524	0.2618	0.5227	2.5825	5.0883
40	20	20	0.0294	0.1476	0.2969	1.544	3.2107
50	30	20	0.0184	0.0926	0.1868	0.9912	2.1055
30	5	25	0.0606	0.3029	0.605	2.9952	5.9169
40	15	25	0.0359	0.1794	0.3595	1.8195	3.6847
50	25	25	0.0227	0.1140	0.2291	1.1857	2.4578

**Tabla 6a.** Desplazamientos relativos (en u.a.) del nivel  $1s_{1/2}$  para diferentes iones con ionicidades comprendidas entre  $\chi = 5$  y  $\chi = 25$ .



$(\delta E)_{rel} 3s_{1/2} (\%)$							
Z	N	$\chi$	a=0.01	a=0.05	a=0.1	a=0.5	a=1
10	5	5	2.0383	9.8239	18.7805	66.4529	87.9661
20	15	5	1.3287	6.5172	12.7258	52.3315	80.2544
30	25	5	0.5553	2.8061	5.6782	29.6113	57.413
40	35	5	0.2907	1.4956	3.0887	18.2247	39.417
50	45	5	0.1477	0.7782	1.6496	11.0997	26.2211
20	10	10	1.1311	5.5501	10.8448	45.2751	72.7057
30	20	10	0.6702	3.3351	6.6286	31.215	56.7283
40	30	10	0.4638	2.3212	4.6454	23.0466	44.4788
50	40	10	0.2562	1.2987	2.6391	14.4192	30.2724
20	5	15	0.9625	4.739	9.2987	40.0719	66.8595
30	15	15	0.7217	3.5725	7.056	31.9343	56.3155
40	25	15	0.4954	2.4673	4.9098	23.4823	43.9987
50	35	15	0.3396	1.7001	3.4051	17.0573	33.5652
30	10	20	0.6901	3.4132	6.7346	30.2846	53.2306
40	20	20	0.4988	2.4797	4.9233	23.1943	42.9182
50	30	20	0.3896	1.942	3.868	18.6728	35.5511
30	5	25	0.6230	3.0849	6.0957	27.7259	49.4094
40	15	25	0.5067	2.5153	4.9855	23.2122	42.4986
50	25	25	0.3912	1.9473	3.8732	18.5200	34.9484

**Tabla 6b.** Desplazamientos relativos (en u.a.) del nivel  $3s_{1/2}$  para diferentes iones con ionicidades comprendidas entre  $\chi = 5$  y  $\chi = 25$ .

$(\delta E)_{rel} 5s_{1/2} (\%)$							
Z	N	$\chi$	a=0.01	a=0.05	a=0.1	a=0.5	a=1
10	5	5	6.0354	27.0828	47.5034	92.2835	94.7032
20	15	5	4.8385	22.2133	40.0375	90.7744	94.4269
30	25	5	3.4676	16.388	30.5726	86.4422	93.9896
40	35	5	2.7395	13.1651	25.0547	81.37	93.4688
50	45	5	1.9697	9.6845	18.9355	73.673	93.2563
20	10	10	3.4924	16.487	30.7343	88.8758	97.0371
30	20	10	2.7461	13.1533	24.9504	81.8688	96.4825
40	30	10	2.3623	11.3912	21.7846	76.2075	95.6046
50	40	10	1.8304	8.9382	17.3548	67.5403	93.5173
20	5	15	2.7522	13.1702	24.9583	82.0473	97.6092
30	15	15	2.3625	11.3817	21.7449	76.0768	96.63599
40	25	15	1.9908	9.656401	18.6019	69.2406	94.407
50	35	15	1.6984	8.2848	16.0699	62.9592	91.1469
30	10	20	2.0438	9.8961	19.0245	69.9718	95.0412
40	20	20	1.7418	8.480499	16.4128	63.4769	91.5075
50	30	20	1.554	7.5902	14.7469	58.7581	87.9949
30	5	25	1.7675	8.5979	16.6218	63.8654	91.831
40	15	25	1.5809	7.7144	14.9715	59.2254	88.3474
50	25	25	1.3949	6.8293	13.307	54.2669	84.0045

**Tabla 6c.** Desplazamientos relativos (en u.a.) del nivel  $5s_{1/2}$  para diferentes iones con ionicidades comprendidas entre  $\chi = 5$  y  $\chi = 25$ .

ionicidad y desplazamientos relativos muy parecidos para iones con distinta ionicidad.

Lo que se observa es que para una carga nuclear dada el desplazamiento relativo de nivel aumenta al aumentar el número de electrones (o disminuir la ionicidad). Por ejemplo para el nivel  $5s_{1/2}$  y  $a=0.01$  u.a.<sup>-1</sup> se tiene para  $Z=20$  que los desplazamientos relativos correspondientes a los iones con 5, 10 y 15 electrones son respectivamente 2.7522, 3.4924 y 4.8385.

También se tiene que para un número de electrones dado el desplazamiento relativo disminuye al aumentar la carga nuclear (o aumentar la ionicidad). Por ejemplo, nuevamente para el nivel  $5s_{1/2}$  y  $a=0.01$  u.a.<sup>-1</sup> se tiene para  $N=25$  que los desplazamientos correspondientes a las especies químicas con carga nuclear de 30, 40 y 50 son respectivamente 3.4676, 2.3623 y 1.3949.

Por tanto, para una ionicidad dada el desplazamiento relativo aumenta cuando disminuye la carga nuclear y el número de electrones, comportamiento contrario al que se daba para el desplazamiento de nivel. Esto era de esperar si se tiene en cuenta que los desplazamientos de nivel para una misma ionicidad eran del mismo orden y que la energía del nivel aislado aumenta en valor absoluto con la carga nuclear y el número de electrones.

Las diferencias analizadas en el apartado anterior entre el potencial efectivo propuesto en este trabajo,  $U_{ef}^{AO}$ , y los potenciales efectivos  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$  se reflejarán en diferencias entre las correspondientes propiedades atómicas, y en concreto entre las energías de nivel. Las diferencias entre estos potenciales a cortas distancias darán lugar a diferencias en los niveles internos, fundamentalmente en el nivel  $1s_{1/2}$ ; mientras que las diferencias entre los potenciales a largas distancias del origen se reflejarán en los niveles externos.

En las figuras 19 y 20 se representan las energías de nivel y los correspondientes desplazamientos para diferentes niveles de los iones FeXXII y FeVII respectivamente. El comportamiento general es que las energías determinadas con  $U_{ef}^{A0}$  son menos desplazadas hacia los valores positivos que las correspondientes energías calculadas con los potenciales efectivos  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ , de manera que se cumple  $\delta E_{nlj}^{A0} < \delta E_{nlj}^R < \delta E_{nlj}^C$ . Este comportamiento era de esperar debido a que en general el potencial ejercido por el plasma propuesto en este trabajo era menos repulsivo que el asociado los potenciales  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ , y por tanto el potencial efectivo propuesto liga más. En estas figuras se observa también que las diferencias entre los desplazamientos producidos por el potencial efectivo  $U_{ef}^{A0}$  y los otros dos sobre las energías de nivel, aumentan cuando aumenta el radio inverso de Debye.

Para el estado fundamental las energías determinadas con los tres potenciales sufren desplazamientos distintos, consecuencia directa de las diferencias entre dichos potenciales cerca del origen, comentadas en el apartado anterior. Así como para pequeños valores del radio inverso de Debye el potencial efectivo de este trabajo produce un desplazamiento del nivel  $1s_{1/2}$  lineal con  $a$  sólo para alta ionicidad, dado por la expresión (4.54), los desplazamientos asociados a los potenciales  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$  son lineales con  $a$  para cualquier ionicidad, y haciendo un estudio similar al realizado para determinar  $\delta E_{nl}^{A0}$  (dado por (4.54)) se obtiene

$$\delta E_{1s1/2}^R = a(Z - N + I) \quad (4.57)$$

$$\delta E_{1s1/2}^C = aZ \quad (4.58)$$

donde el comportamiento de los potenciales  $U_p^R$  y  $U_p^C$  se ha obtenido desarrollando las expresiones (4.47) y (4.48) para valores pequeños de  $r$ , obteniéndose respectivamente (4.57) y (4.58). Cabe destacar que en el caso del potencial  $U_{ef}^C$  el

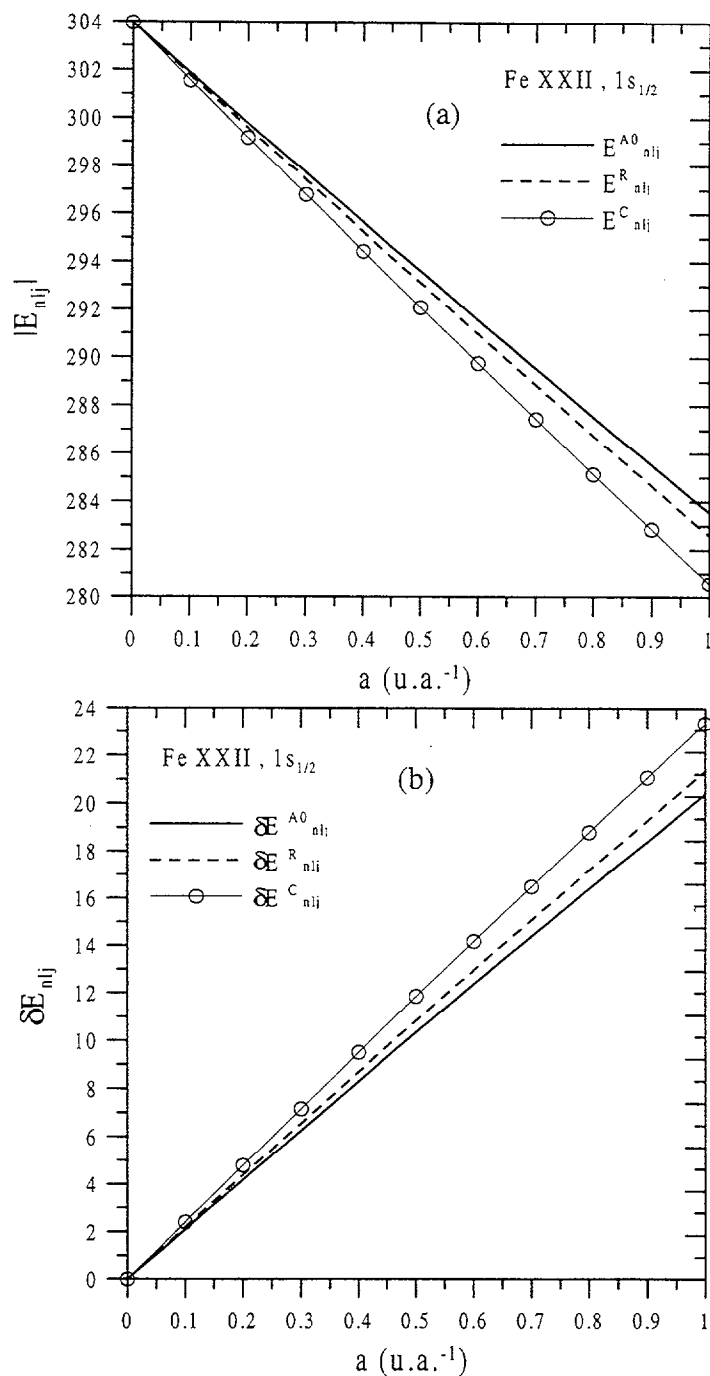
desplazamiento sólo depende de la carga nuclear  $Z$ , por lo que este potencial proporciona un desplazamiento similar para el nivel  $1s_{1/2}$  de todos los iones de una misma especie química. La diferencia entre los desplazamientos del nivel  $1s_{1/2}$  dados por (4.57) y (4.58) es  $\delta E^C - \delta E^R = a(N - I)$ , por lo que el desplazamiento producido por el potencial  $U_{ef}^C$  es mayor que el que produce  $U_{ef}^R$ , salvo para el átomo de hidrógeno donde  $N=I$ . En este caso ambos potenciales proporcionan el mismo desplazamiento de nivel igual  $aZ$ . Conforme consideramos iones con mayor número de electrones aumenta la diferencia entre los desplazamientos asociados a estos dos potenciales, y para una especie química con carga nuclear  $Z$  esta diferencia es máxima cuando el átomo es neutro. En este caso  $N=Z$  y entonces la diferencia entre desplazamientos es igual a  $a(Z - I)$ , tanto más importante conforme mayor es la carga nuclear.

Además se tiene, que para una ionización alta (ver figura 19 a y c para el ion Fe XXII) el potencial  $U_{ef}^{A0}$  produce el menor desplazamiento en la energía del nivel  $1s_{1/2}$ , mientras que si disminuye la ionicidad (ver figura 20 a y c para el ion VII), es  $U_{ef}^R$  el potencial que produce un menor desplazamiento para valores de  $a$  mayores de  $0.01 \text{ u.a.}^{-1}$ .

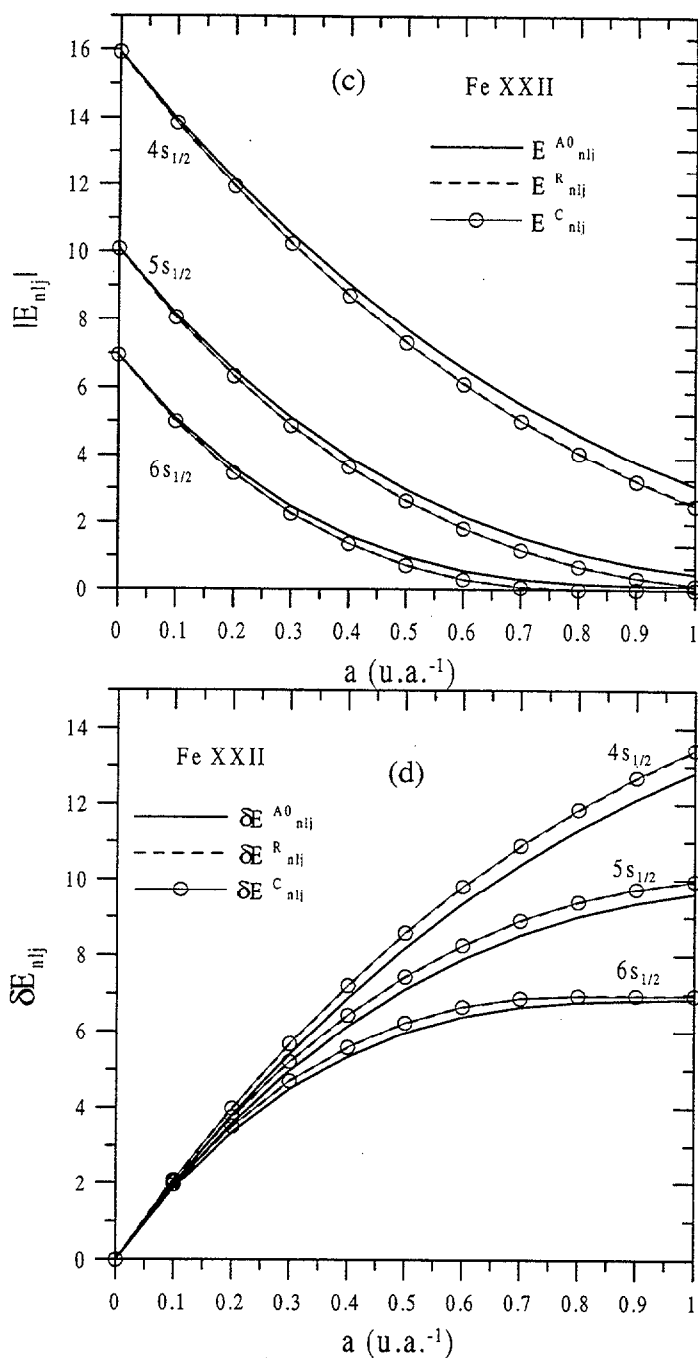
Para los estados excitados la principal diferencia está en que mientras el potencial efectivo  $U_{ef}^{A0}$  liga todos los niveles que existen en situación aislada para todo radio inverso de Debye, los potenciales  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$  tienen un número finito de niveles ligados, número que depende del valor de  $a$ . Esta desaparición de niveles es consecuencia de que estos potenciales van más rápido a cero que  $-1/r$  (Galindo, 1978). En las figuras 19 c y 20 c se ilustra el comportamiento del nivel  $6s_{1/2}$  y  $5s_{1/2}$  de los iones Fe XXII y Fe VII respectivamente, y se ha representado la desaparición del nivel dando el valor cero a la correspondiente energía. Esto se produce a partir de un valor  $a$  mayor de  $0.7 \text{ u.a.}^{-1}$  para el nivel  $6s_{1/2}$  del ion Fe XXII y para un valor  $a$

mayor de  $0.5 \text{ u.a.}^{-1}$  para el nivel  $5s_{1/2}$  ion Fe VII; es decir, al disminuir la ionicidad se produce la desaparición de los niveles a menores radios inversos de Debye. Así mismo se ve para los estados excitados que las energías determinadas con  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$  son muy cercanas.

Centrándonos en las analogías se tiene que el comportamiento establecido para el desplazamiento de nivel con los números cuánticos, para el potencial propuesto, también se extiende a los potenciales  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ . En las figuras 19 y 20 se puede observar que los desplazamientos de estos dos potenciales aumentan al aumentar el número cuántico  $n$ , y también se ilustra que para radios inversos pequeños los desplazamientos de los niveles con igual número cuántico principal son similares. En la tabla 7 se muestran los desplazamientos de nivel para diferentes niveles con momento angular nulo y distintos iones, con el objeto de ilustrar los comportamientos comentados para diferentes especies químicas e iones. En esta tabla también se observa que los comportamientos de los desplazamientos de nivel determinados con el potencial  $U_{ef}^{A0}$  cuando se varía la ionicidad, la carga nuclear y el número de electrones, también se dan para los desplazamientos determinados con los potenciales  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ . Es decir, para una ionicidad dada y valores de  $a$  pequeños, los desplazamientos son similares si bien este aumenta ligeramente al aumentar la carga nuclear y el número de electrones, y los desplazamientos crecen al aumentar la ionicidad. Por ejemplo para el potencial efectivo  $U_{ef}^R$  y en lo que respecta a una misma ionicidad se pueden observar en la tabla 7, para el nivel  $3s_{1/2}$ , una ionicidad  $\chi = 5$  y  $a=0.05 \text{ u.a.}^{-1}$ , los siguientes desplazamientos al cambiar la carga nuclear y el número de electrones:  $0.2865 \text{ u.a.}$ , para  $Z=10$  y  $N=5$ ,  $0.2910 \text{ u.a.}$ , para  $Z=20$  y  $N=15$ , y  $0.2951 \text{ u.a.}$ , para  $Z=30$  y  $N=25$ . Estos valores son muy cercanos si se tiene en cuenta que al aumentar la ionicidad a  $\chi = 10$  se obtiene el valor de  $0.5372 \text{ u.a.}$ , para  $Z=20$  y  $N=10$ , y  $0.5416 \text{ u.a.}$ , para  $Z=30$  y  $N=20$ , constatándose también con este ejemplo el aumento del desplazamiento con la ionicidad.

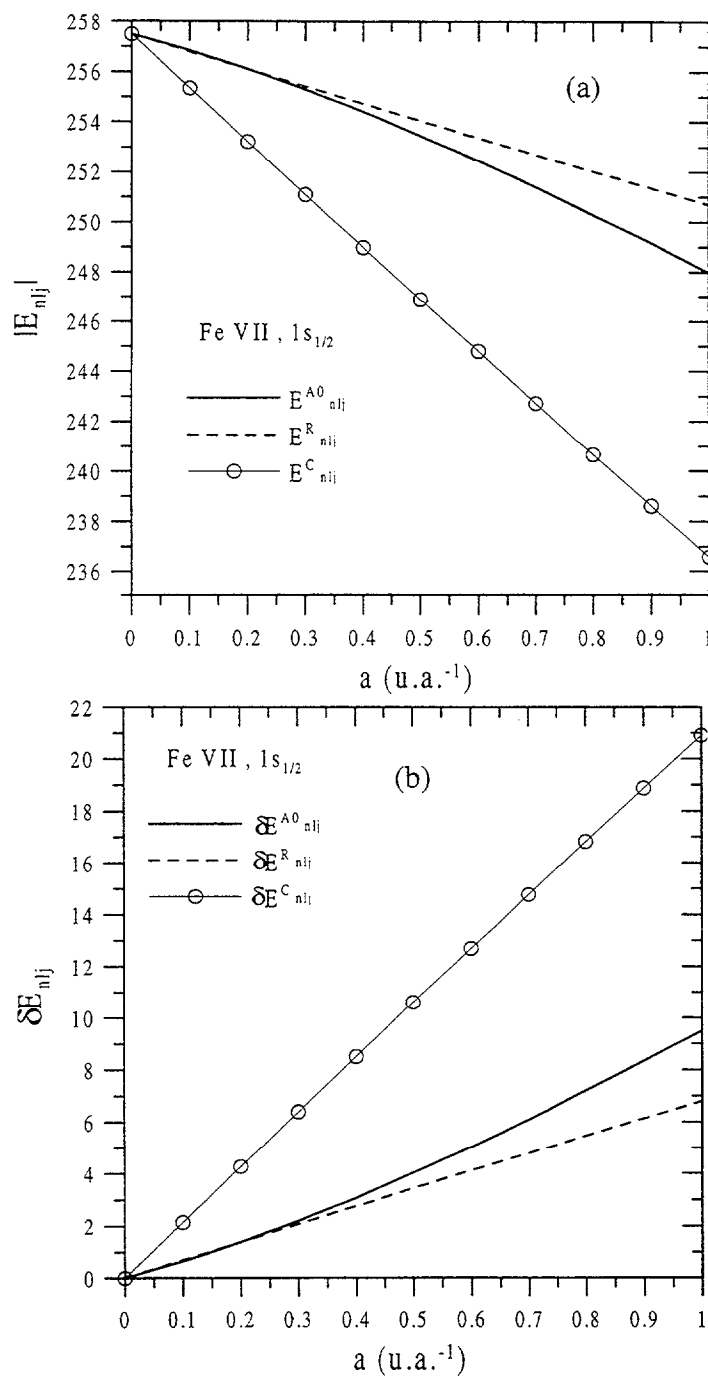


**Figura 19.** Representación de las energías de nivel en valor absoluto (en u.a.) (a) y de los desplazamientos (b) frente al radio inverso de Debye para diferentes niveles del ion Fe XII.

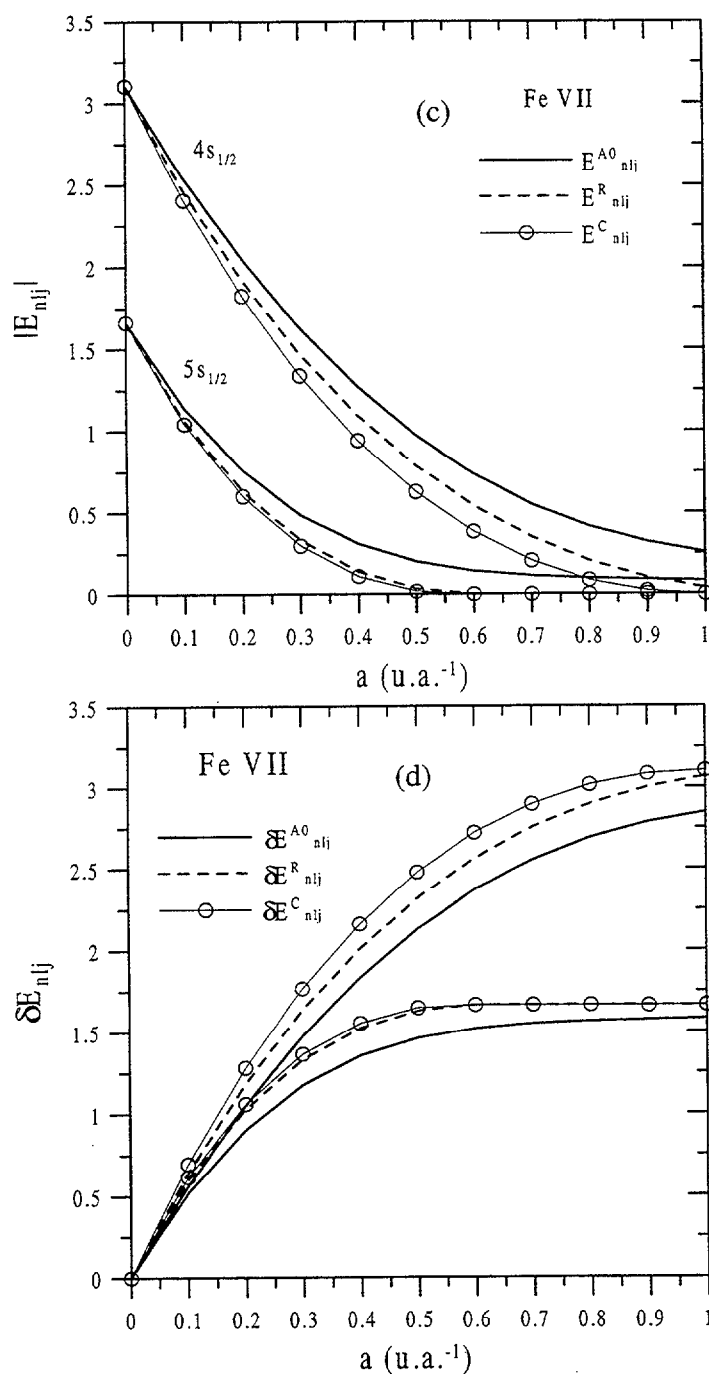


**Figura 19bis.** Representación de las energías de nivel en valor absoluto (en u.a.) (c) y de los desplazamientos (d) frente al radio inverso de Debye para diferentes niveles del ion Fe XII.





**Figura 20.** Representación de las energías de nivel en valor absoluto (en u.a.) (a) y los desplazamientos (b) frente al radio inverso de Debye para diferentes niveles del ion Fe VII.



**Figura 20bis.** Representación de las energías de nivel en valor absoluto (en u.a.) (c) y los desplazamientos (d) frente al radio inverso de Debye para diferentes niveles del ion Fe VII.

$Z=10, N=5, \chi=5$	$1s_{1/2}$			$3s_{1/2}$			$5s_{1/2}$			$7s_{1/2}$		
	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$
$a$												
0.01	0.0499	0.0599	0.0816	0.0495	0.0594	0.0602	0.0486	0.0584	0.0585	0.0475	0.0567	0.0568
0.05	0.2490	0.2988	0.4066	0.2388	0.2865	0.2898	0.2182	0.2618	0.2624	0.1907	0.2286	0.2287
0.1	0.4961	0.5953	0.8102	0.4564	0.5477	0.5541	0.3828	0.4587	0.4597	0.2941	0.3491	0.3493
0.5	2.4052	2.8862	3.9312	1.6151	1.9261	1.9462	0.7436	0.8019	0.8039	0.3767	0.3952	0.3959
$Z=50, N=45, \chi=5$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$
0.01	0.0511	0.0612	0.4307	0.0507	0.0603	0.1951	0.0498	0.0597	0.0691	0.0489	0.0582	0.0124
0.05	0.2792	0.3031	2.1517	0.2670	0.2902	0.9687	0.2448	0.2113	0.3331	0.2099	0.2533	0.2206
0.1	0.6134	0.5991	4.3003	0.5661	0.5900	1.9203	0.4787	0.5473	0.6364	0.4101	0.4099	0.4213
0.5	4.9700	2.9779	21.3764	3.8910	2.7614	8.9335	1.8626	1.9290	2.1669	0.6992	-----	-----
$Z=20, N=10, \chi=10$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$
0.01	0.1000	0.1100	0.1668	0.0991	0.1095	0.1116	0.0971	0.1085	0.1088	0.0939	0.1068	0.1069
0.05	0.4987	0.5489	0.8326	0.4782	0.5372	0.5475	0.4321	0.5118	0.5135	0.3695	0.4753	0.4758
0.1	0.9946	1.0958	1.6621	0.9154	1.0498	1.0702	0.7504	0.9539	0.9572	0.5500	0.8247	0.8256
0.5	4.8670	5.3964	8.1887	3.9840	3.9840	4.3814	2.5080	2.7196	2.7245	1.3556	-----	-----
$Z=60, N=50, \chi=10$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$
0.01	0.1013	0.1110	0.5281	0.1006	0.1103	0.2698	0.0996	0.1099	0.1255	0.0984	0.1080	0.1107
0.05	0.5261	0.5573	2.6411	0.5146	0.5499	1.3414	0.4913	0.5233	0.6121	0.4614	0.5012	0.5176
0.1	1.1042	1.0986	5.2791	1.0569	1.0855	2.6647	0.9648	1.0335	1.1872	0.8527	0.9283	0.9525
0.5	7.3343	5.4675	26.2739	6.1637	5.1525	12.6117	4.0784	4.0694	4.6173	2.2331	-----	-----

**Tabla 7.** Desplazamientos de nivel (en u.a.) de los niveles  $1s_{1/2}$ ,  $3s_{1/2}$ ,  $5s_{1/2}$  y  $7s_{1/2}$  para diferentes iones, calculados con los potenciales  $U_{ef}^{A0}(\delta E^{A0})$ ,  $U_{ef}^R(\delta E^R)$  y  $U_{ef}^C(\delta E^C)$ .

$Z=20, N=5, \chi=15$	$1s_{1/2}$			$3s_{1/2}$			$5s_{1/2}$			$7s_{1/2}$		
	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$
0.01	0.1500	0.1600	0.1808	0.1494	0.1594	0.1602	0.1483	0.1582	0.1584	0.1467	0.1565	0.1566
0.05	0.7486	0.7986	0.9022	0.7357	0.7847	0.7887	0.7099	0.7572	0.7579	0.6730	0.7179	0.7181
0.1	1.4943	1.5940	1.8011	1.4435	1.5398	1.5477	1.3452	1.4348	1.4363	1.2114	1.2919	1.2923
0.5	7.3592	7.8498	8.8721	6.2208	6.6342	6.6700	4.4223	4.6976	4.7016	2.6422	-----	-----
$Z=60, N=45$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$
0.01	0.1516	0.1603	0.5326	0.1503	0.1599	0.2849	0.1493	0.1591	0.1719	0.1480	0.1571	0.1604
0.05	0.7701	0.8121	2.6580	0.7578	0.7998	1.4169	0.7337	0.7702	0.8408	0.7012	0.7435	0.7590
0.1	1.5790	1.5984	5.3116	1.5302	1.5790	2.8150	1.4354	1.5119	1.6358	1.3129	1.3927	1.4180
0.5	9.2828	7.9524	26.4359	8.0985	7.4955	13.3377	5.9854	6.0781	6.5541	3.8647	4.0436	4.0835
$Z=30, N=10, \chi=20$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$
0.01	0.1999	0.2099	0.2652	0.1994	0.2094	0.2118	0.1984	0.2083	0.2087	0.1968	0.2066	0.2067
0.05	0.9985	1.0486	1.3250	0.9864	1.0358	1.0476	0.9606	1.0086	1.0107	0.9227	0.9689	0.9696
0.1	1.9939	2.0947	2.6470	1.9463	2.0437	2.0673	1.8466	1.9389	1.9431	1.7062	1.7913	1.7927
0.5	9.8508	10.3695	13.1068	8.7524	9.1904	9.3009	6.7919	7.1229	7.1380	4.5830	4.7553	4.7566
$Z=70, N=50, \chi=20$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$
0.01	0.2004	0.2031	0.6284	0.2003	0.2100	0.3625	0.1993	0.2091	0.2278	0.1979	0.2073	0.2116
0.05	1.0195	1.0532	3.1423	1.0078	1.0399	1.8049	0.9833	1.3340	1.1195	0.9494	1.0052	1.0135
0.1	2.0781	2.9690	6.2820	2.0304	2.0775	3.5904	1.9339	2.0091	2.1910	1.8042	1.8854	1.9225
0.5	11.7996	10.4485	31.2876	10.6196	9.9561	17.1900	8.4237	8.4657	9.2165	6.0087	6.2093	6.3064

(continuación tabla 7)

$Z=30, N=5, \chi=25$ $a$	$1s_{1/2}$			$3s_{1/2}$			$5s_{1/2}$			$7s_{1/2}$		
	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$
0.01	0.2499	0.2599	0.2806	0.2494	0.2594	0.2602	0.2483	0.2582	0.2584	0.2466	0.2565	0.2565
0.05	1.2484	1.2984	1.4007	1.2349	1.2843	1.2885	1.2077	1.2560	1.2568	1.1681	1.2148	1.2151
0.1	2.4938	2.5936	2.7981	2.4402	2.5378	2.5462	2.3347	2.4281	2.4298	2.1863	2.2738	2.2744
0.5	12.3452	12.8390	13.8528	11.0990	11.5426	11.5827	8.9707	9.3237	9.3301	6.4879	6.7127	6.7137
$Z=70; N=45$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$	$\delta E^{A0}$	$\delta E^R$	$\delta E^C$
0.01	0.2503	0.2687	0.6311	0.2501	0.2603	0.3802	0.2491	0.2599	0.2735	0.2476	0.2633	0.2609
0.05	1.2646	1.3286	3.1553	1.2529	1.2992	1.8930	1.2279	1.2701	1.3453	1.1926	1.2388	1.2555
0.1	2.5598	2.5969	6.3054	2.5112	2.5722	3.7658	2.4127	2.4938	2.6363	2.2774	2.3617	2.3950
0.5	13.8887	12.9360	31.4126	12.6959	12.3273	18.0396	10.4705	10.6096	11.2154	7.9120	8.1424	8.2428

(continuación tabla 7)

#### 4.6- Efectos del plasma sobre las energías totales.

Como se vio en el apartado 4.2, las energías totales del estado fundamental calculadas dentro del contexto del funcional de la densidad en la aproximación de Kohn y Sham dependen de las energías de nivel de los niveles ocupados y de la densidad electrónica total.

El comportamiento general observado es que la influencia del plasma sobre las energías totales es considerablemente menor a la estudiada sobre las energías de nivel. En general se observa que las energías totales disminuyen en valor absoluto al aumentar el radio inverso  $a$ , y se encuentra que son algo más sensibles al aumento de  $a$  los iones muy poco ionizados, permaneciendo prácticamente inalteradas para los iones muy ionizados. Con el fin de presentar la influencia del plasma sobre las energías totales, en la tabla 8 se muestra la energía total en valor absoluto y el correspondiente desplazamiento para iones con distintas ionicidades y distintos radios inversos de Debye.

Para los iones representado en la tabla 8 los máximos desplazamientos se obtienen para el ion con  $Z=60$  y  $N=50$ , con una ionización del 17%, que tiene un desplazamiento de 23 u.a. y un desplazamiento relativo del 0.24%; para el ion  $Z=50$  y  $N=45$ , que tiene una ionización del 10%, se encuentra un desplazamiento de 61.27 u.a. y un desplazamiento relativo del 1%. Si consideramos el ion muy ionizado  $Z=80$  y  $N= 10$ , se tiene una ionización de 87.5 %, el desplazamiento es 0.03 u.a. y el relativo  $2 \cdot 10^{-4}$ .

Como se puede apreciar los desplazamientos relativos que sufren las energías totales son menores que los que sufre el potencial efectivo. Basta con comparar la tabla 1, del apartado 4.4, con la tabla 8 para ver por ejemplo que mientras para el ion con  $Z=60$  y  $N=50$  en unas condiciones de plasma con  $a=0.1$  u.a.<sup>-1</sup> el desplazamiento relativo medio del potencial era del 13.82%, para la energía total se tiene un

$Z$	$N$	$Z-N$	$a$	$E$	$\delta E$
10	5	5	0	115.51	0
			0.1	115.50	0.01
			0.5	115.47	0.03
			1	115.24	0.27
50	45	5	0	6164.90	0
			0.1	6164.90	0
			0.5	6162.85	2.05
			1	6103.63	61.27
20	10	10	0	641.99	0
			0.1	641.98	0.01
			0.5	641.94	0.05
			1	641.68	0.31
60	50	10	0	9596.78	0
			0.1	9596.77	0.01
			0.5	9595.52	1.26
			1	9573.72	23.05
20	5	15	0	506.22	0
			0.1	506.22	0
			0.5	506.21	0.01
			1	506.12	0.1
60	45	15	0	9542.51	0
			0.1	9542.50	0.01
			0.5	9541.82	0.69
			1	9530.90	11.61
30	10	20	0	1566.10	0
			0.1	1566.10	0
			0.5	1566.08	0.02
			1	1565.94	0.16
70	50	20	0	13904.27	0
			0.1	13904.27	0
			0.5	13903.56	0.70
			1	13893.63	10.64
30	5	25	0	1181.34	0
			0.1	1181.33	0.01
			0.5	1181.33	0.01
			1	1181.29	0.05
70	45	25	0	13774.13	0
			0.1	13774.13	0
			0.5	13773.66	0.47
			1	13767.42	6.71
70	10	60	0	9787.05	0
			0.1	9787.04	0.01
			0.5	9787.03	0.02
			1	9787.00	0.05
80	10	70	0	13179.71	
			0.1	13179.70	0.01
			0.5	13179.70	0.01
			1	13179.68	0.03

**Tabla 8.** Energías totales y desplazamientos (en u.a.) para iones con ionicidades comprendidas entre 5 y 70.

desplazamiento relativo muy pequeño del  $0.0001\%$ , y para  $a=0.5$  u.a.<sup>-1</sup> se tiene para el potencial y la energía total respectivamente  $21.31\%$  y  $0.013\%$ .

Algo parecido se encuentra si comparamos los desplazamientos relativos de las energías totales con los correspondientes a las energías de nivel de los niveles poco internos. En este caso basta con comparar la tabla 6 con la tabla 8 para encontrar, nuevamente para el ion  $Z=30$  y  $N=25$  en un plasma con  $a=0.1$  u.a.<sup>-1</sup>, que los desplazamientos relativos de los niveles  $1s_{1/2}$ ,  $3s_{1/2}$  y  $5s_{1/2}$  son respectivamente  $0.16\%$ ,  $5.68\%$  y  $30.57\%$ , frente al  $0.001\%$  visto anteriormente para la energía total.

La baja influencia del plasma sobre las energías totales se puede entender si se tiene en cuenta que los niveles que intervienen en su determinación son los niveles ocupados, que en el caso de una configuración fundamental (que es el caso que estamos tratando) son los niveles más internos, y como hemos visto, son los que sufren un menor desplazamiento relativo. Cabría esperar mayores diferencias debido a los efectos del plasma si se consideran iones con cores excitados, ya que intervendrían niveles más externos y por tanto más sensibles a los efectos del plasma.

Hay que destacar que cada uno de los términos que constituyen la energía total (energía cinética,  $E_c$ , energía potencial electrostática núcleo-electrón,  $E_p(n-e)$ , energía potencial electrostática electrón-electrón,  $E_p(e-e)$ , y la energía de intercambio y correlación,  $E_{corr}$ ) son algo más sensibles a los efectos del plasma. En la tabla 9 se muestran estas cantidades, y se ilustra este comportamiento. Por ejemplo, se puede apreciar que mientras el desplazamiento de la energía total para  $a=0.5$  u.a.<sup>-1</sup> es de  $2.05$  u.a., se obtienen mayores desplazamientos para el resto de energías; por ejemplo un desplazamiento de  $78.14$  u.a. para la energía cinética o de  $78.25$  para la energía potencial electrón-electrón.

En general se observa que cuando aumenta el radio inverso de Debye se produce una disminución de la energía cinética, una disminución en valor absoluto de la energía potencial electrostática núcleo-electrón, una disminución de la energía



potencial electrostática electrón-electrón, y una disminución en valor absoluto de la energía de intercambio y correlación.

Este comportamiento era de esperar si tenemos en cuenta que comportamiento similar se obtiene al añadir electrones ligados a un ion. Se podría explicar si consideramos para los electrones del ion un modelo sencillo de tipo hidrogenoide dentro del contexto de partícula independiente en un campo central y consideramos las energías medias por electrón (More 1981). En este contexto la energía cinética media de cada electrón es proporcional a la carga nuclear, que se apantalla. Además la distancia media al núcleo aumenta, como se verá al estudiar la

a	E	Ec	Ep (n-e)	Ep (e-e)	Ecorr
0	6164.90	6363.25	-14717.29	2346.61	-157.46
0.1	6164.87	6359.94	-14710.94	2343.43	-157.33
0.2	6164.86	6350.28	-14692.38	2334.21	-156.96
0.3	6164.66	6334.52	-14661.82	2318.98	-156.35
0.4	6164.10	6312.81	-14618.8	2297.37	-155.49
0.5	6162.85	6285.11	-14561.98	2268.36	-154.35
0.6	6160.26	6250.80	-14487.69	2229.47	-152.848
0.7	6154.61	6208.46	-14384.91	2172.60	-150.75
0.8	6129.31	6145.24	-14150.03	2021.53	-146.05
0.9	6110.20	6103.83	-14006.81	1936.33	-143.56
1	6103.63	6068.01	-13934.46	1905.11	-142.29

**Tabla 9.** Energía total (en u.a.) para el ion  $Z=50$  y  $N=45$ , así como las diferentes contribuciones a la energía total, para distintos radios inversos de Debye.

influencia del plasma sobre las funciones de onda y la densidad de electrones ligados, y como la energía cinética media depende del inverso de esta distancia, este efecto también produce una disminución de la energía cinética. Por tanto se produce una disminución de la energía cinética media y de la energía cinética total. Explicación similar se tiene para la energía potencial núcleo-electrón, y también electrón-electrón. Por último, el término de intercambio y correlación es más difícil de explicar en este contexto, pero su comportamiento se puede entender si se tiene en

cuenta que así como ésta aumenta al aumentar el número de electrones, la energía por electrón disminuye. De modo que al añadir más partículas al plasma, la energía de intercambio y correlación por electrón disminuye, y por tanto, la energía total.

Estos resultados implican que los potenciales de ionización, que son fundamentales para la determinación de las abundancias de las distintas especies iónicas presentes en un plasma, se ven poco perturbados por los efectos del plasma, fundamentalmente para las especies muy ionizadas.

En la siguiente tabla mostramos las energías totales obtenidas con los potenciales  $U_{ef}^{A0}$ ,  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$  para un ion con una ionización baja y otra alta. Como se puede observar siempre el potencial  $U_{ef}^C$  genera un mayor desplazamiento, aunque cuando el ion está muy ionizado los tres potenciales proporcionan resultados muy similares. Para el caso de baja ionización ocurre algo parecido a lo que ocurría con el nivel fundamental  $1s_{1/2}$  y los niveles poco excitados, es decir, a partir de un valor de  $a=0.1$  u.a.<sup>-1</sup> el potencial  $U_{ef}^R$  es el que genera menos desplazamientos en la energía total, tendiendo el potencial  $U_{ef}^{A0}$  al valor que proporciona el potencial  $U_{ef}^C$ . Esto era de esperar ya que en la determinación de la energía total de los iones que estamos estudiando ( $N>50$ ), son los niveles poco excitados los que intervienen.

	Z=50 ; N=45			Z=70 ; N=10		
	$E^{A0}$	$E^R$	$E^C$	$E^{A0}$	$E^R$	$E^C$
0	6164.90	6164.90	6164.90	9787.04	9787.04	9787.04
0.1	6164.90	6164.90	6164.38	9787.05	9787.04	9787.04
0.2	6164.86	6164.88	6162.31	9787.05	9787.04	9787.04
0.3	6164.66	6164.83	6158.30	9787.04	9787.04	9787.03
0.4	6164.10	6164.70	6151.87	9787.04	9787.04	9787.03
0.5	6162.85	6164.44	6142.18	9787.03	9787.04	9787.01
0.6	6160.26	6164.01	6127.23	9787.03	9787.03	9787.00
0.7	6154.61	6163.31	6110.88	9787.02	9787.03	9786.98
0.8	6129.31	6162.21	6105.15	9787.02	9787.02	9786.96
0.9	6110.20	6160.45	6098.47	9787.01	9787.01	9786.94
1	6103.63	6157.16	6101.38	9787.00	9787.00	9786.91

**Tabla 10.** Energías totales (en u.a.) calculadas con los potenciales  $U_{ef}^{A0}$ ,  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ .

## 4.7. Efectos del plasma sobre las funciones de onda y la densidad radial.

Con el fin de analizar la influencia del plasma sobre las funciones de onda de un ion utilizaremos el desplazamiento de la función de onda del nivel  $k$  ( $nlj$ ), definido por

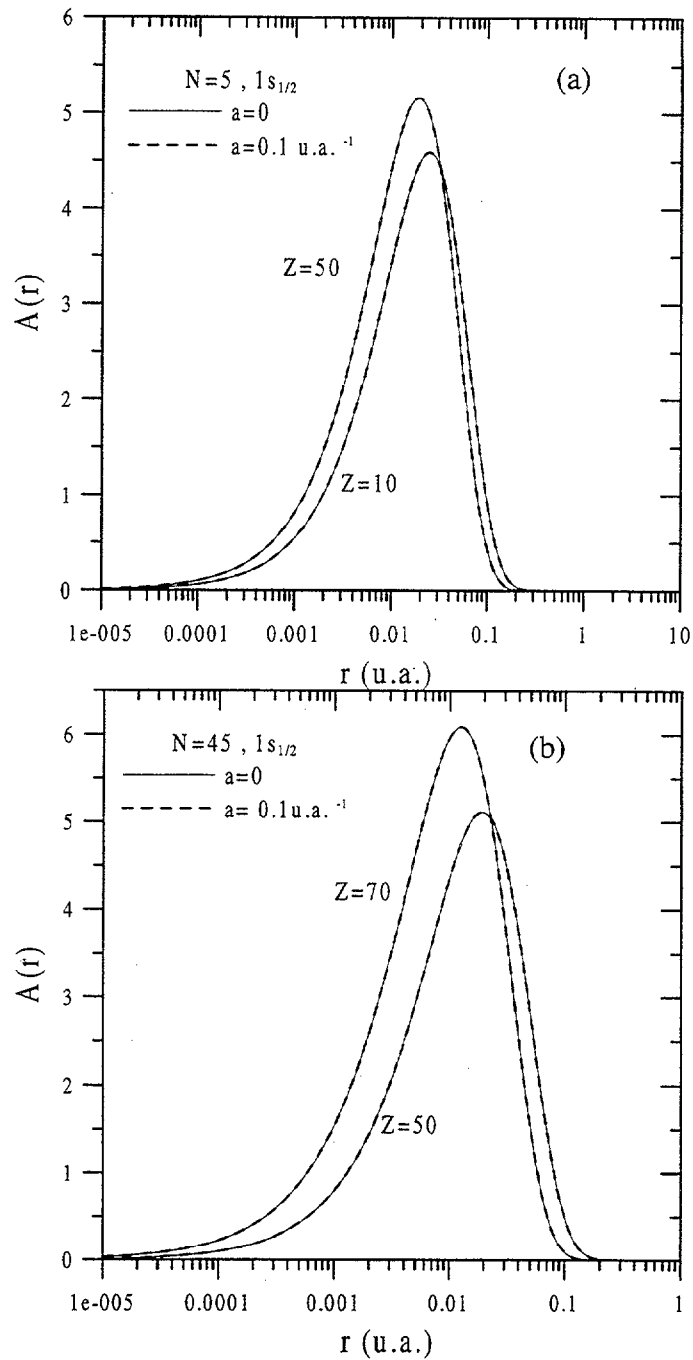
$$\delta\varphi_k(r) = \varphi_k(r) - \varphi_k^0(r) \quad (4.59)$$

donde  $\varphi_k^0(r)$  es la función de onda en situación aislada y  $\varphi_k(r)$  es la correspondiente en situación no aislada, y el desplazamiento medio dado por

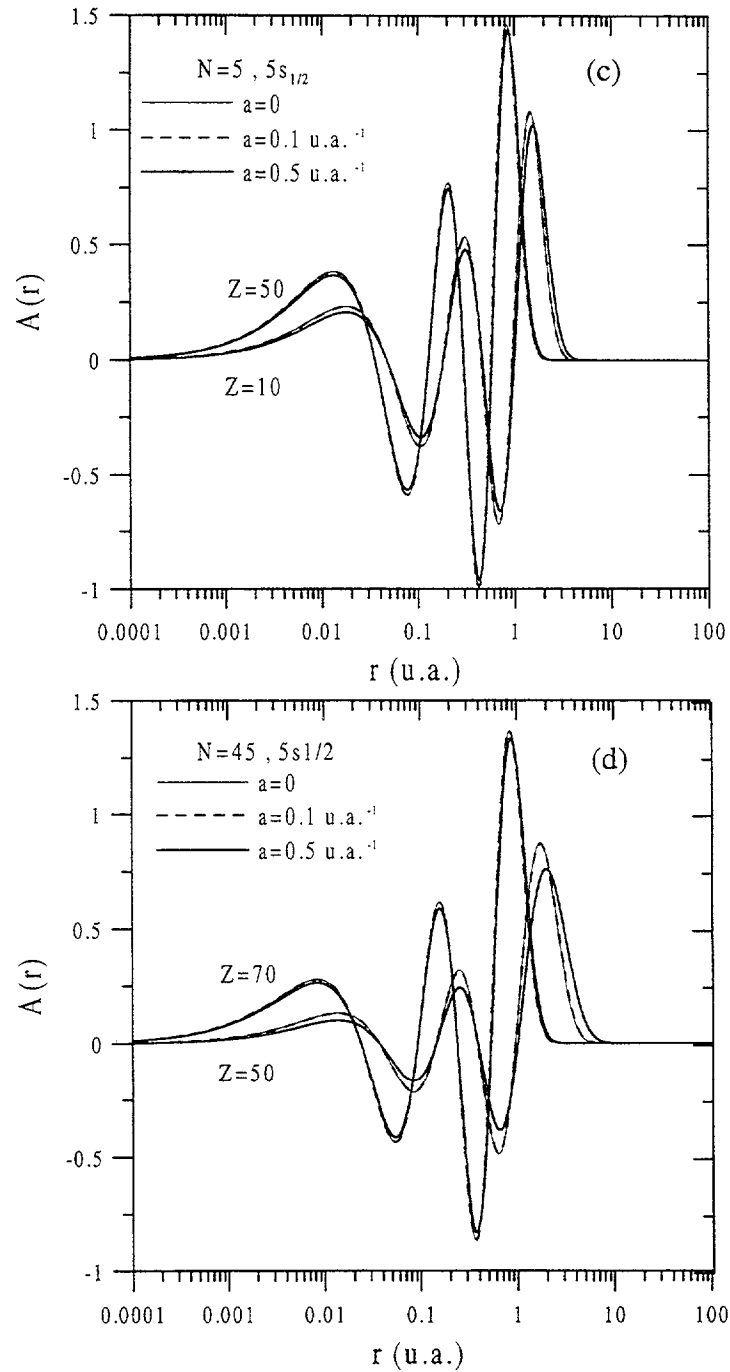
$$\delta(\varphi_k)_m = \frac{1}{Nr} \sum_{i=1}^{Nr} \delta\varphi_k(r_i) \quad (4.60)$$

donde  $Nr$  es el número de puntos de la malla radial donde ha sido resuelta numéricamente la ecuación radial de Dirac.

En general y como consecuencia de la repulsión o apantallamiento electrostático producido por el plasma las funciones de onda sufren un desplazamiento respecto de la correspondiente función de onda aislada. Esta perturbación desplaza los nodos de las funciones de onda hacia puntos más alejados del origen y disminuye en valor absoluto el valor de los máximos y mínimos relativos. El desplazamiento aumenta cuando aumenta el radio inverso de Debye. En la figura 21 se representa para diferentes iones y radios inversos de Debye la componente mayor de la función de onda para los niveles  $1s_{1/2}$  y  $5s_{1/2}$  pudiendo corroborar el comportamiento comentado. También se encuentra para un ion dado que las funciones de onda de los niveles externos, el nivel  $5s_{1/2}$  en la figura 22 b, sufren mayores desplazamientos que las correspondientes a los niveles internos, en este caso el nivel  $1s_{1/2}$  en la figura 22 a. Es decir, al aumentar el número cuántico



**Figura 21.** Representación de la componente mayor de la función de onda radial del nivel  $1s_{1/2}$  para distintos iones y radios inversos de Debye.



**Figura 21bis.** Representación de la componente mayor de la función de onda radial del nivel  $5s_{1/2}$  para distintos iones y radios inversos de Debye.

principal aumenta el desplazamiento que sufre la función de onda. En general se cumple que las funciones de onda aisladas que dan lugar a distribuciones de carga media más alejadas del origen sufren mayores desplazamientos. Esto se puede ver mejor en la figura 22 donde para los mismos iones se representan los desplazamientos de las funciones de onda y se encuentra para el ion con  $Z=10$  y  $N=5$  y un valor de  $a=0.5$  u.a.<sup>-1</sup> que los desplazamientos del nivel  $1s_{1/2}$  están acotados entre los valores  $-0.0004$  y  $0.0004$  u.a., mientras que para el nivel  $5s_{1/2}$  el desplazamiento toma valores entre  $-0.2$  y  $0.15$  u.a..

Si nos centramos en un nivel, se tiene como comportamiento general que para un número de electrones fijo se produce una disminución del desplazamiento al aumentar la carga nuclear.

Si se mantiene la carga nuclear, se encuentra un aumento del desplazamiento al aumentar el número de electrones. Para el nivel  $5s_{1/2}$  del ion con  $Z=10$  y por ejemplo  $a=0.5$  u.a.<sup>-1</sup>, encontramos que cuando  $N=5$  el desplazamiento toma valores comprendidos entre  $-0.2$  y  $0.175$  u.a. y para  $N=50$  entre  $-0.245$  y  $0.245$  u.a..

Eran de esperar estos comportamientos con  $Z$  y  $N$  si se tiene en cuenta que la función de onda aislada de un nivel se acerca hacia el origen cuando se aumenta la carga nuclear (a  $N$  fijo) y se aleja cuando se aumenta el número de electrones (a  $Z$  fijo), y además lo comentado anteriormente, que establecía que las funciones de onda aisladas más alejadas del origen son las que se ven más desplazadas por los efectos del plasma.



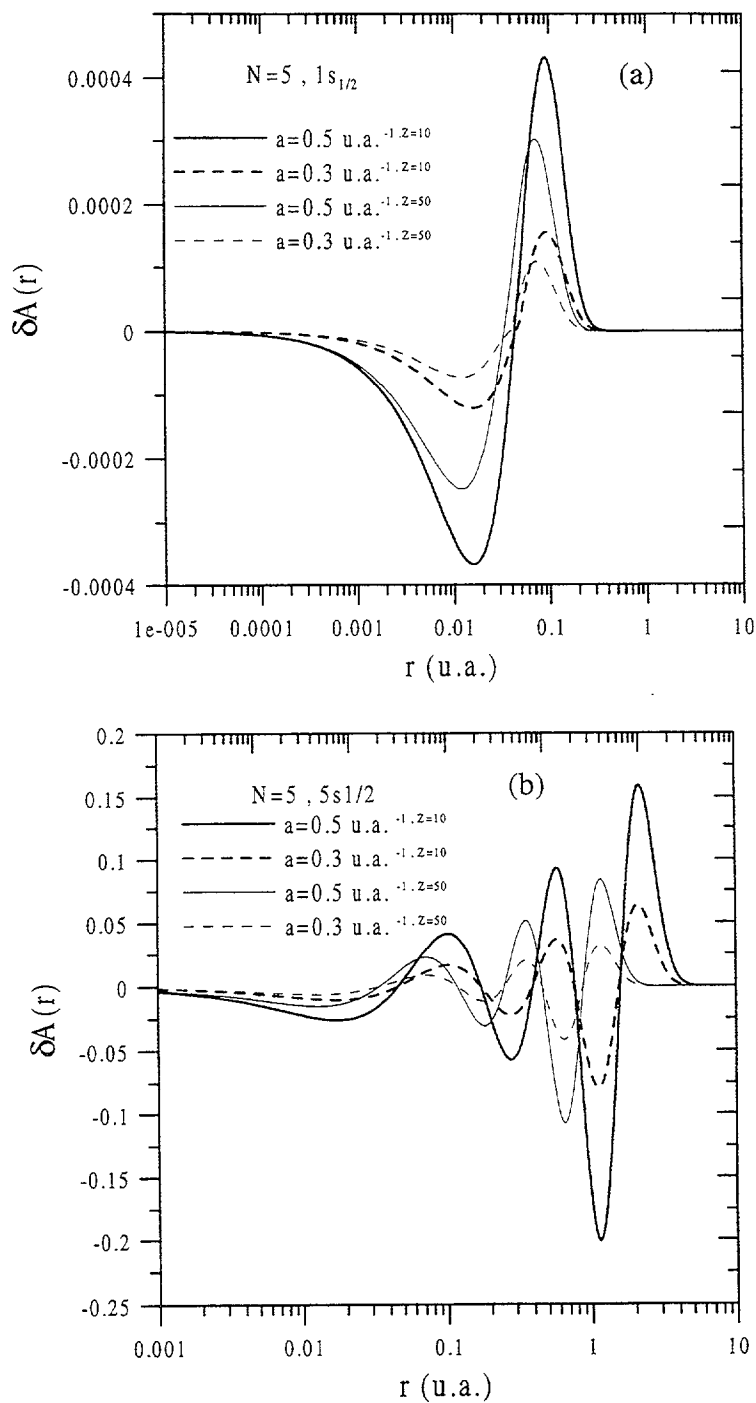


Figura 22. Representación del desplazamiento de la componente mayor de la función de onda de los niveles  $1s_{1/2}$  y  $5s_{1/2}$  para el ion con  $Z=10$  y  $N=5$  y distintos radios inversos de Debye.

En todos los cálculos realizados, los comportamientos comentados para la componente mayor de la función de onda se cumplen también para la componente menor.

Una vez estudiado los efectos del plasma sobre las funciones de onda pasamos a estudiar los efectos sobre la densidad de carga radial, que dependen directamente de los comportamientos estudiados para las funciones de onda.

Para un ion la densidad de carga radial  $n(r)$  viene dada por

$$n(r) = \sum_k v_k (A_k^2(r) + B_k^2(r)) \quad (4.61)$$

donde  $v_k$  es el número de ocupación de un nivel  $k$  y  $A_k(r)$  es la componente mayor de la función de onda radial y  $B_k(r)$  la menor. Con el fin de analizar la influencia del plasma sobre la densidad radial de carga de un ion utilizaremos el desplazamiento de densidad radial definido por

$$\delta n(r) = n(r) - n^0(r) \quad (4.62)$$

donde  $n^0(r)$  es la densidad de carga del ion en situación aislada y  $n(r)$  es la correspondiente en situación no aislada. También utilizamos el desplazamiento radial medio dado por

$$\delta n_m = \frac{1}{Nr} \sum_{i=1}^{Nr} \delta n(r_i) \quad (4.63)$$

La influencia del plasma sobre la densidad radial está condicionada por el hecho de que ésta depende de las funciones de onda de los niveles ocupados, que para el caso de una configuración en estado fundamental corresponden a los niveles más internos. Se acaba de ver en el análisis de las funciones de ondas, que las funciones correspondientes a niveles internos (para iones muy ionizados) se ven



menos perturbadas que las correspondientes a niveles más externos. Por tanto cabe esperar que la densidad radial de iones con pocos electrones, en los que intervienen niveles muy internos, se vea poco afectada por el plasma. Por el contrario para iones con muchos electrones, en los que hay niveles externos ocupados, se puede esperar una mayor perturbación de la densidad. Además, recordando el efecto del plasma sobre las funciones de onda, la influencia del plasma sobre la densidad radial se traducirá en una disminución de los máximos y mínimos relativos que conllevará a un desplazamiento de los electrones hacia el exterior, que no es más que la consecuencia de la repulsión electrostática o apantallamiento que produce el plasma. Y por supuesto, el desplazamiento de la densidad aumentará con el radio inverso de Debye.

En las figuras 23 y 24 se representa la densidad radial y el desplazamiento en la densidad para diferentes iones y para distintos radios inversos de Debye.

Si se consideran los iones con  $Z=10$  y  $N=5$  (figura 23 a), y con  $Z=50$  y  $N=5$  (figura 23 b) (en los que intervienen los mismos niveles) se observa que la densidad radial del ion de menor carga nuclear sufre una mayor perturbación, como consecuencia de que sus funciones de onda son más sensibles al plasma. En ambos iones intervienen los mismos niveles y la justificación a este hecho se encuentra en el comportamiento de las funciones de onda con la carga nuclear. Como vimos, a un número de electrones fijo la función de onda de un nivel sufre un mayor desplazamiento cuanto menor es la carga nuclear, lo que justifica que la densidad radial del ion con  $Z=10$  de este ejemplo sufra un desplazamiento mayor. En las figuras 23 c y d se representan los desplazamientos de las densidades para estos iones con el objeto de conocer en que puntos de la malla radial se producen las principales diferencias y de que orden son éstas. En estas figuras se aprecia mejor que los desplazamientos del ion con  $Z=10$  son mayores que los del ion con  $Z=50$ , ya que los desplazamientos del primero están acotados entre  $-0.2$  y  $0.12$  u.a. y para el segundo entre  $-0.045$  y  $0.03$  u.a.. Teniendo en cuenta la definición del desplazamiento dado en

(4.62), los valores negativos de  $\delta n(r)$  se corresponden con un valor mayor de la densidad aislada  $n^0(r)$  frente a la no aislada  $n(r)$ . Por tanto de la figura se deduce que  $n^0(r)$  es mayor que  $n(r)$  para valores de  $r$  menores que  $r_{max}$ , siendo  $r_{max}$  una distancia del orden de la distancia a la que la densidad radial aislada alcanza el último máximo (o la distancia a la que el desplazamiento de la densidad tiene el primer nodo), y para valores de  $r$  mayores que este radio es la densidad de carga no aislada o perturbada por el plasma la que es mayor.

En definitiva, el efecto del plasma es trasladar carga (electrones) desde los valores de  $r$  menores que  $r_{max}$ . Además los mínimos relativos del desplazamiento de la densidad coinciden con los máximos relativos de la densidad aislada, lo que indica que las mayores diferencias entre la densidad aislada y la no aislada tienen lugar a las distancias en las que la densidad aislada alcanza los valores máximos.

Algo similar a lo comentado se puede ver para los iones con  $Z=50$  y  $N=45$ ,  $Z=70$  y  $N=45$  en la figura 24 y 24 bis, si bien en este caso para valores de  $r$  menores que  $r_{max}$  existen algunas diferencias respecto de lo comentado en el párrafo anterior.

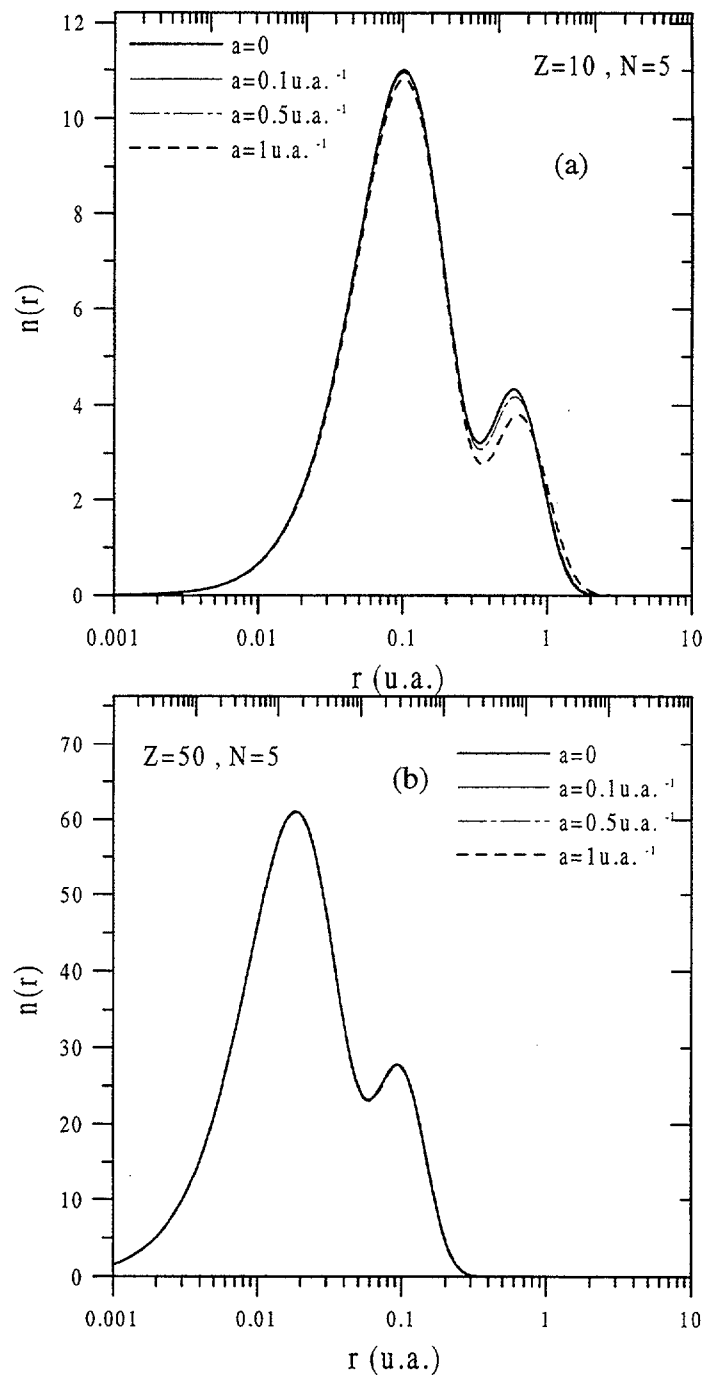
En general, como consecuencia del comportamiento de las funciones de onda, se tiene que para un número de electrones fijo el desplazamiento de la densidad radial disminuye cuando aumenta la carga nuclear del ion.

Considerando los dos iones con carga nuclear igual a cincuenta ( $Z=50$  y  $N=5$  figuras 23 b y d,  $Z=50$ , y  $N=45$  figuras 24 a y c) se observa que el ion con menos electrones y por tanto el más ionizado, en este caso el de cinco electrones, sufre un desplazamiento más débil por parte del plasma que el ion menos ionizado con cuarenta y cinco electrones. El desplazamiento medio sufrido por la densidad del ion con  $N=5$  en cada punto de la malla radial para un valor de  $a=0.1$  u.a.<sup>-1</sup>, respecto de la densidad en situación aislada, es de 0.00015 u.a. y para  $a=1$  u.a. es de 0.016 u.a. Para el ion con  $N=45$  se tiene para un radio inverso  $a=0.1$  u.a.<sup>-1</sup> un desplazamiento medio

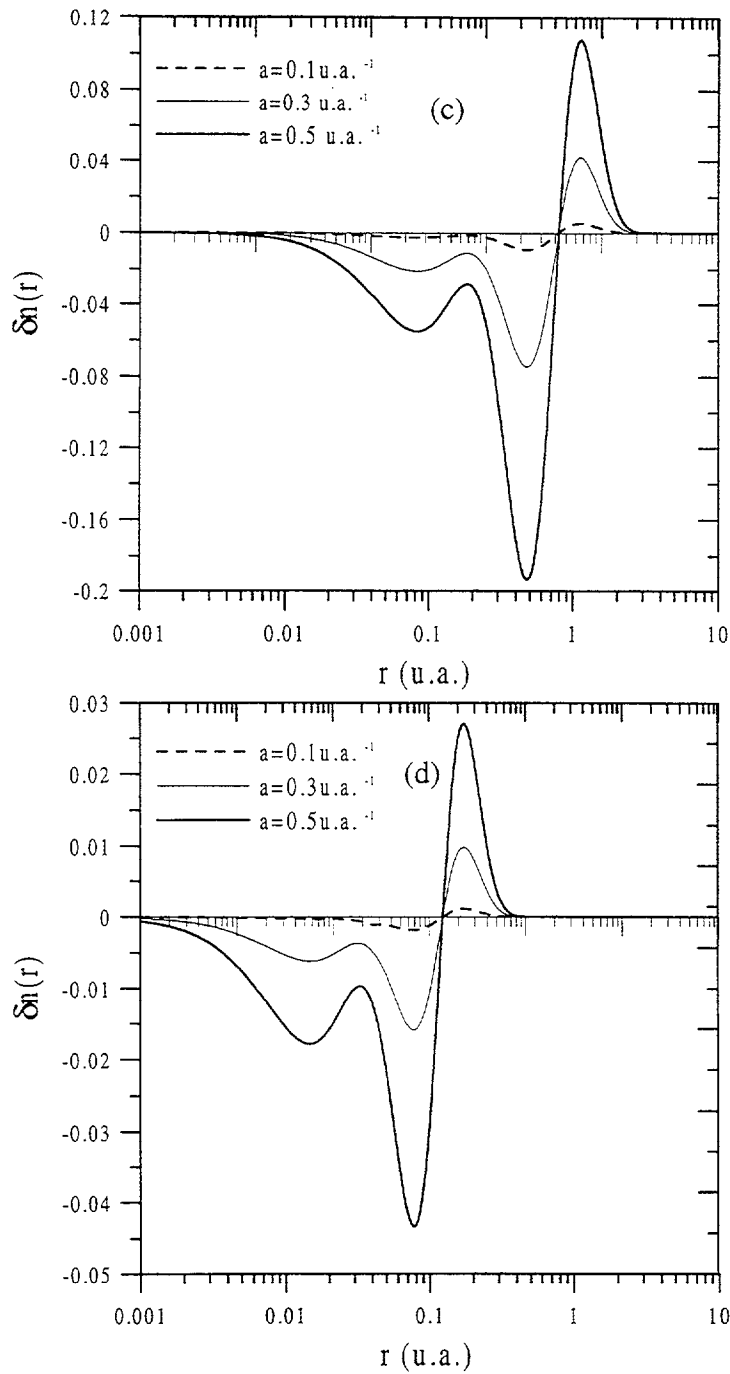
para la densidad de  $0.01$  u.a. y para  $a=1$  u.a.<sup>-1</sup> de  $0.99$  u.a., desplazamientos mayores que los del ion más ionizado. Como se explicó en el párrafo anterior esto se debe a que en la configuración asociada al ion menos perturbado intervienen niveles que sufren una pequeña perturbación, como son los niveles  $1s_{1/2}$ ,  $2s_{1/2}$  y  $2p_{1/2}$ , mientras que el ion más perturbado está constituido por los niveles  $1s_{1/2}$ ,  $2s_{1/2}$ ,...,  $5s_{1/2}$ , por lo que contiene niveles externos en esta configuración como el  $5s_{1/2}$  que son más sensibles a las condiciones del plasma.

En general se tiene que para una carga nuclear fija el desplazamiento medio de la densidad aumenta cuando crece el número de electrones, es decir, cuando disminuye la ionicidad.

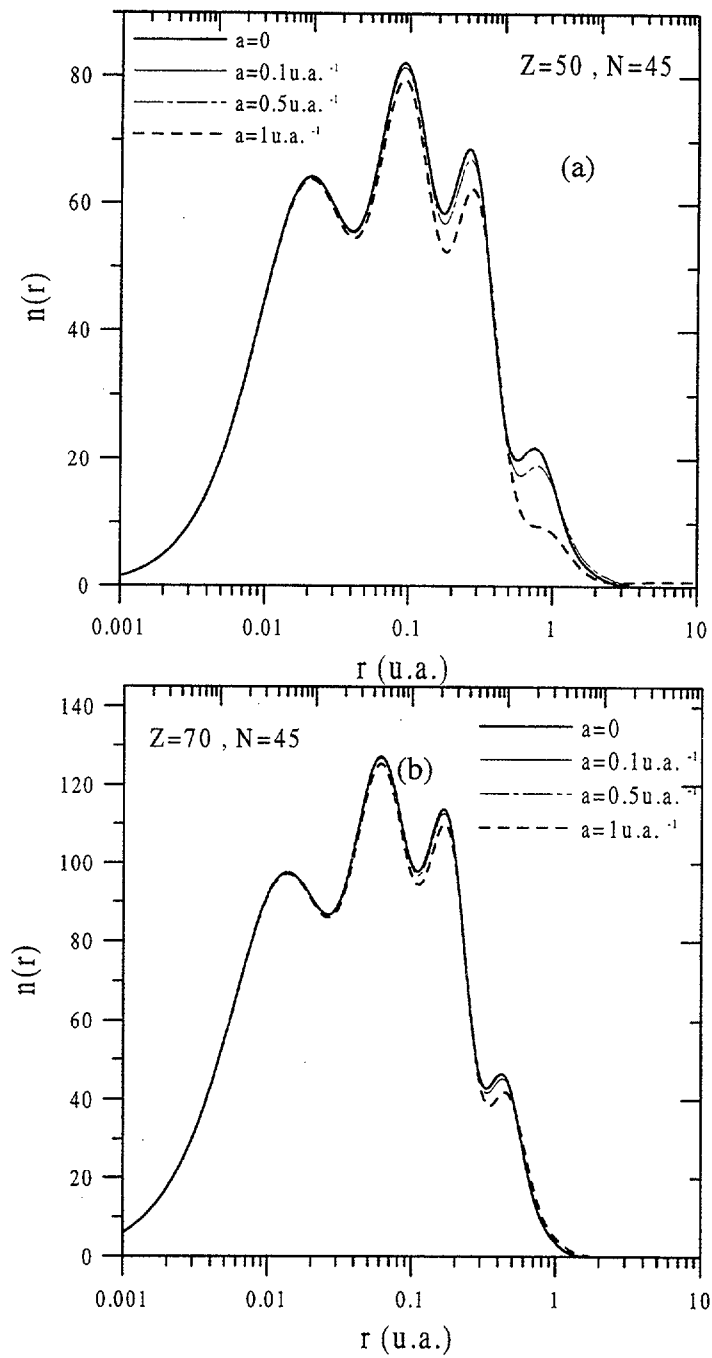
Estos comportamientos se pueden corroborar en la tabla 11, donde se representan los desplazamientos medios de la densidad de carga radial para diferentes iones con 5 y 45 electrones, y para varios radios inversos de Debye. En dicha tabla además aparecen los valores máximos de los desplazamientos de la densidad.



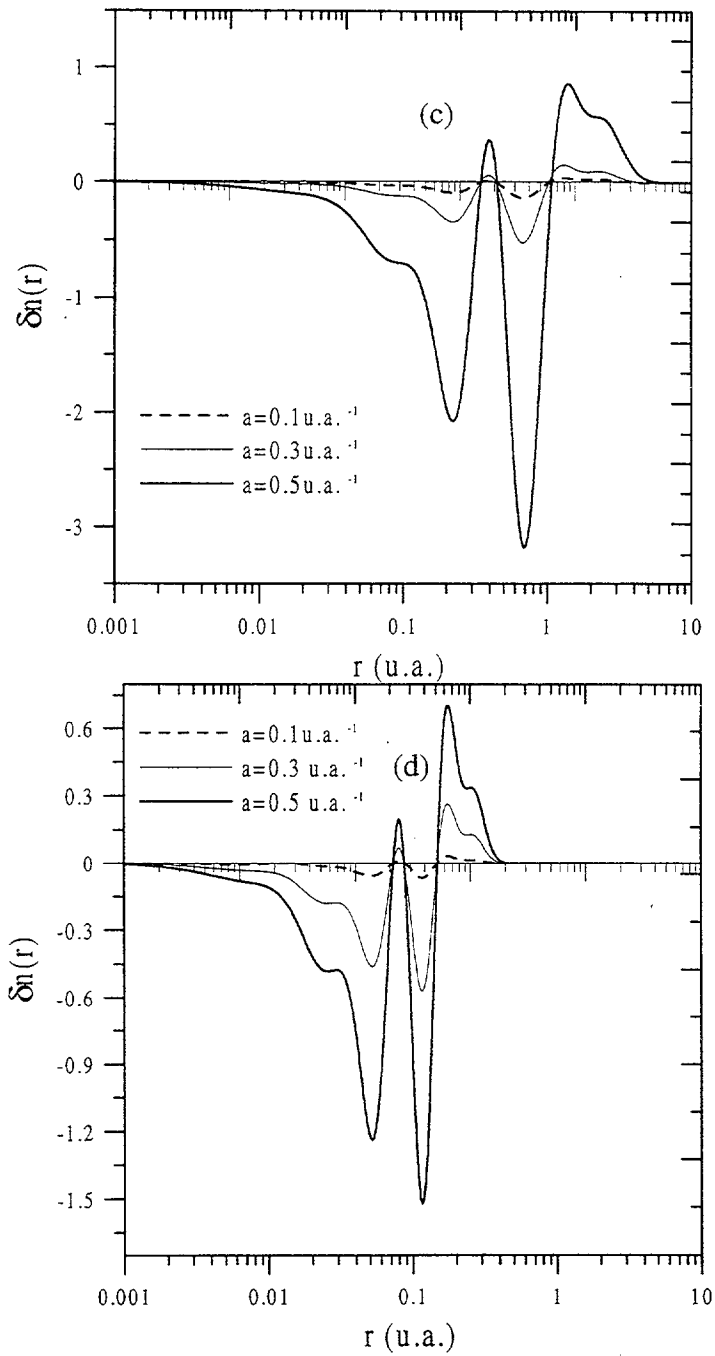
**Figura 23.** Representación de la densidad radial (en u.a.) frente a  $r$  para los iones con  $Z = 10$  y  $N = 5$  (a) y  $Z = 50$  y  $N = 5$  (b).



**Figura 23bis.** Representación de los desplazamientos de la densidad radial (en u.a.) frente a  $r$  para los iones con  $Z = 10$  y  $N = 5$  (c) y  $Z = 50$  y  $N = 5$  (d).



**Figura 24.** Representación de la densidad radial (en u.a.) frente a  $r$  para los iones con  $Z = 50$  y  $N = 45$  (a) y  $Z = 70$  y  $N = 45$  (b).



**Figura 24bis.** Representación de los desplazamientos (en u.a.) frente a  $r$  para los iones con  $Z = 50$  y  $N = 45$  (c) y  $Z = 70$  y  $N = 45$  (d).

N=5	$\delta n$		
	a=0.1	a=0.3	a=0.5
Z			
10	0.078	0.64	1.67
20	0.036	0.36	0.97
30	0.022	0.24	0.67
40	0.034	0.24	0.54
50	0.015	0.15	0.42
60	0.029	0.15	0.38
70	0.044	0.14	0.36
80	0.070	0.16	0.34
90	0.029	0.11	0.27

N=45	$\delta n$		
	a=0.1	a=0.3	a=0.5
Z			
50	1.03	8.99	24.92
60	0.73	6.21	16.69
70	0.61	4.97	13.26
80	0.45	4.08	11.05
90	0.47	3.58	9.59

**Tabla 11.** Desplazamientos medios en u.a. de la densidad de carga radial.



## 4.8- Efectos del plasma sobre las energías de transición y las fuerzas de oscilador.

En este apartado estudiaremos el comportamiento de las energías de transición, las cuales determinan la energía a la que tiene lugar una transición atómica como consecuencia de una fotoabsorción o fotoexcitación. En este proceso el sistema pasa de un nivel de menor energía a otro de mayor energía, es decir, de un nivel más ligado a otro menos ligado. Debido a que el potencial aislado del que se partió para construir el potencial efectivo con efectos de densidad y temperatura es válido para un core en el estado fundamental, nos limitaremos a estudiar las transiciones asociadas a dicho core. Por tanto si el core viene dado en estado fundamental por la configuración  $\{1s_{1/2}^2, 2s_{1/2}^2, \dots, nl_j^v\}$ , donde  $v$  es el número de ocupación del orbital  $nl_j$ ; entonces estudiaremos las transiciones del tipo  $n'l'j' \rightarrow n''l''j''$  con  $n'' \geq n' \geq n$ .

Recordamos que para una transición entre el nivel  $k(nlj)$  con energía  $E_k$  y el nivel  $k'(n'l'j')$  con energía  $E_{k'}$  la energía de transición viene dada por

$$E_{kk'} = E_{k'} - E_k \quad (4.64)$$

Nos será muy útil analizar los desplazamientos de las energías de transición, o desplazamientos de línea, para la transición entre los niveles  $k$  y  $k'$ , definido por

$$\Delta E_{k,k'} = E_{kk'} - E_{kk'}^0 \quad (4.65)$$

donde  $E_{kk'}^0$  es la energía de transición en ausencia de plasma y  $E_{kk'}$  es la correspondiente energía para la situación no aislada.

Si se tiene en cuenta que las energías de los niveles que intervienen en la transición sufren un desplazamiento de nivel y sustituimos en las dos ecuaciones

anteriores las energías por las correspondientes energías aisladas más el desplazamiento de nivel, estas ecuaciones se pueden escribir respectivamente como

$$E_{kk'} = E_{kk'}^0 + \delta E_{k'} - \delta E_k \quad (4.66)$$

$$\Delta E_{k,k'} = \delta E_{k'} - \delta E_k \quad (4.67)$$

relaciones que nos permiten analizar la influencia del plasma sobre las energías de transición en función de los desplazamientos de nivel.

A partir de las dos relaciones anteriores y de las regularidades observadas previamente para los desplazamientos de nivel, podemos establecer algunas regularidades en los desplazamientos de línea y en las energías de transición.

Como comportamiento general podemos decir que para pequeños radios inversos de Debye los desplazamientos de línea tienden a cero y la energía de transición tiende a la energía de transición aislada, como era de esperar. En efecto, basta con tener en cuenta en las dos ecuaciones anteriores que para radios pequeños los desplazamientos de nivel son pequeños y muy parecidos (ver figura 15), por lo que su diferencia tiende a cero.

Para radios inversos de Debye grandes, los desplazamientos de línea tienden a la diferencia entre las energías de transición calculadas en situación aislada y la calculada para el átomo de hidrógeno, y la energía de transición tiende a la del átomo de hidrógeno. En efecto, basta con recordar que en esta situación las energías de nivel tendían a las correspondientes energías del átomo de hidrógeno, y que los desplazamientos tendían a la diferencia entre la energía del átomo de hidrógeno y la aislada. Entonces para valores de  $a$  muy grandes se tiene

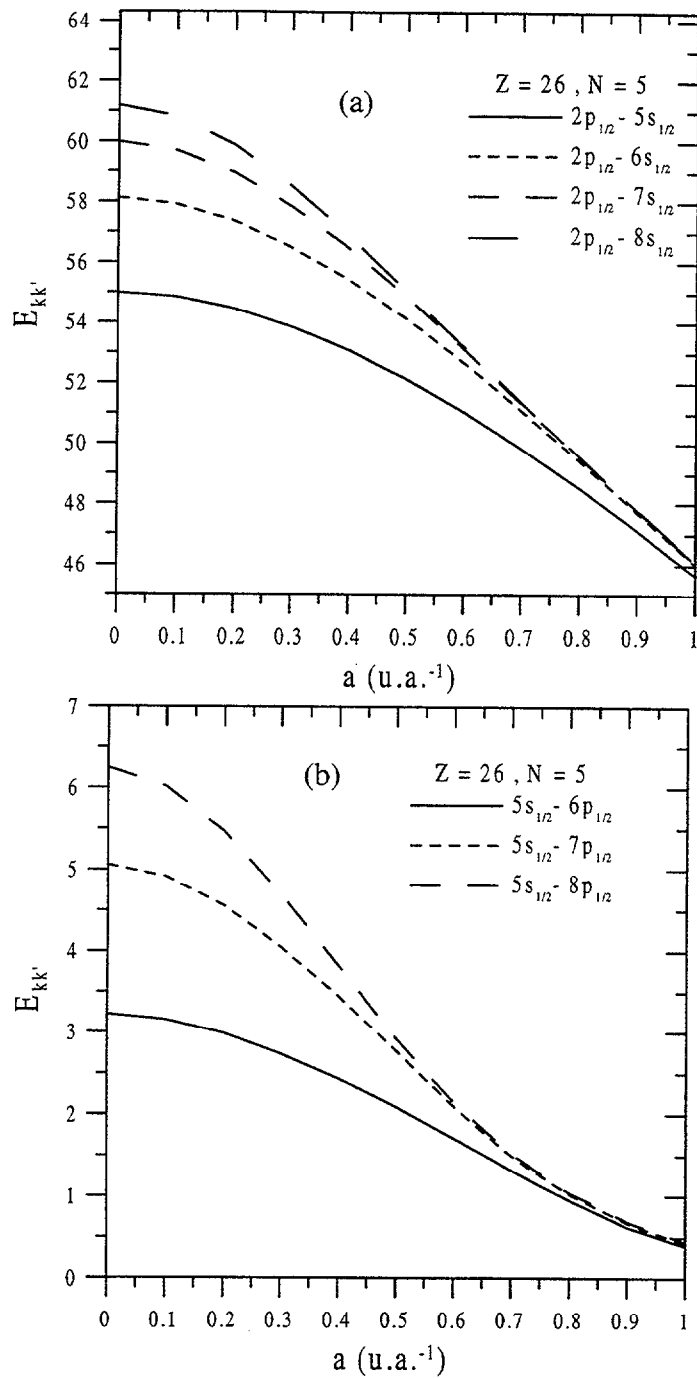
$$\begin{aligned}
 \Delta E_{k,k'} &= \delta E_{k'} - \delta E_k \underset{a \rightarrow \infty}{=} E_{k'}^H - E_{k'}^O - (E_k^H - E_k^O) = (E_{k'}^H - E_k^H) - (E_{k'}^O - E_k^O) = \\
 &= \Delta E_{k,k'}^H - \Delta E_{k,k'}^O \\
 E_{k,k'} &= E_{k',k}^O + \delta E_{k'} - \delta E_k \underset{a \rightarrow \infty}{=} (E_{k'}^O - E_k^O) + (E_{k'}^H - E_{k'}^O) - (E_k^H - E_k^O) = E_{k'}^H - E_k^H = \\
 &= \Delta E_{k,k'}^H
 \end{aligned}
 \tag{4.68}$$

Esta tendencia de las energías de transición se alcanza antes, en el intervalo de radios inversos de Debye representado, para las transiciones entre estados muy externos debido a que como se vio en el apartado 4.4, también para pequeños valores de  $a$  las energías de los niveles muy externos tienden a las energías del átomo de hidrógeno.

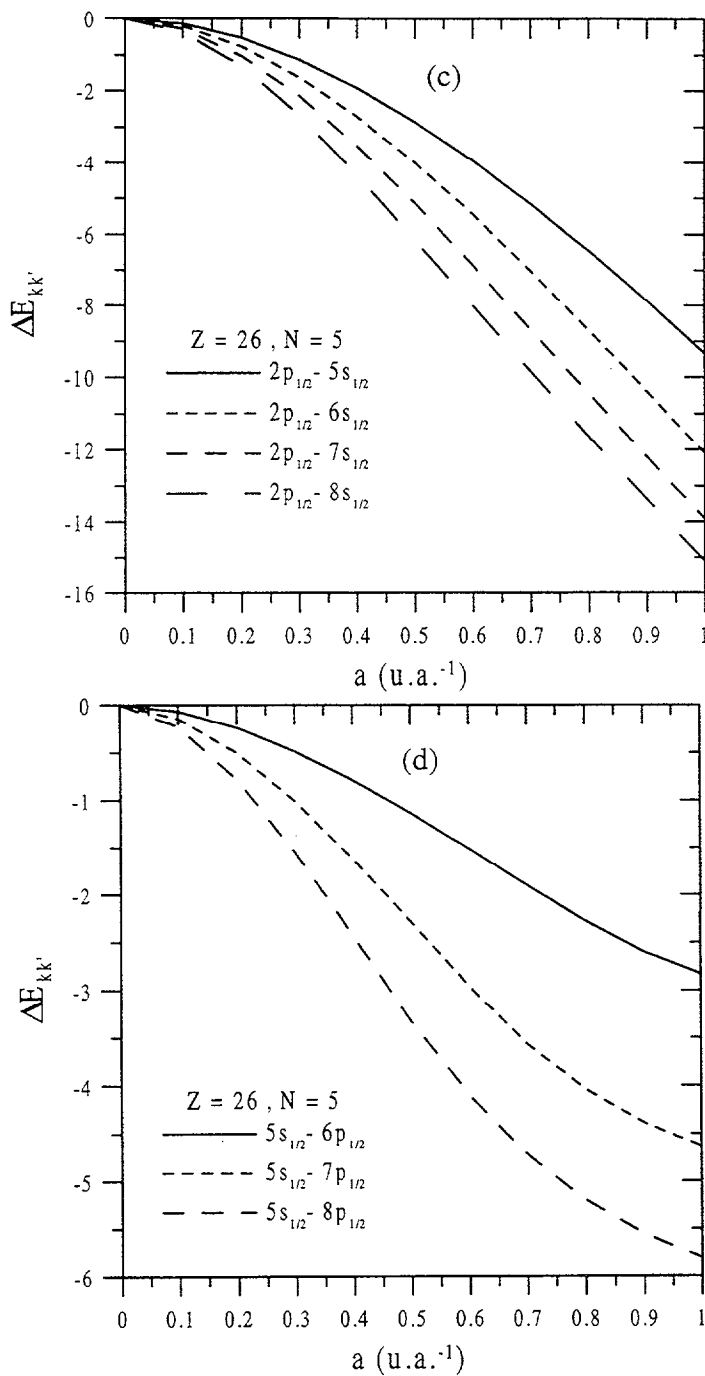
En las figuras 25 y 26 se representan las energías de transición (a y b) y los correspondientes desplazamientos de línea (c y d) frente al radio inverso de Debye para transiciones  $2p_{1/2} \rightarrow ns_{1/2}$  y  $5s_{1/2} \rightarrow np_{1/2}$  del ion Fe XXII (figura 25), y  $4s_{1/2} \rightarrow np_{1/2}$  y  $5s_{1/2} \rightarrow np_{1/2}$  del ion Fe VII (figura 26). En ellos podemos apreciar los comportamientos mencionados. Además de apreciar que las energías de transición entre niveles externos se acercan antes al valor límite impuesto por el valor correspondiente al átomo de hidrógeno (comparar para cada ion las gráficas a y b), se observa también para una transición dada que al disminuir la ionicidad se alcanza antes el valor límite.

A continuación se analizarán las posibles regularidades de los desplazamientos de línea con los números cuánticos, que cabe esperarlas debido a las regularidades que presentan los desplazamientos de nivel con los mismos.

Como consecuencia de la compresión o acercamiento que produce el plasma entre las energías de dos niveles  $k$  y  $k'$  de distinta capa, efecto visto en el apartado dedicado a las energías de nivel, se encuentra para las transiciones (excitaciones)  $k \rightarrow k'$  que las energías de transición disminuyen respecto de las correspondientes



**Figura 25.** Representación de la energía de transición (en u.a.) frente al radio inverso de Debye para diferentes transiciones del ion Fe XXII.



**Figura 25bis.** Representación de los desplazamientos de línea (en u.a.) frente al radio inverso de Debye para diferentes transiciones del ion Fe XXII.

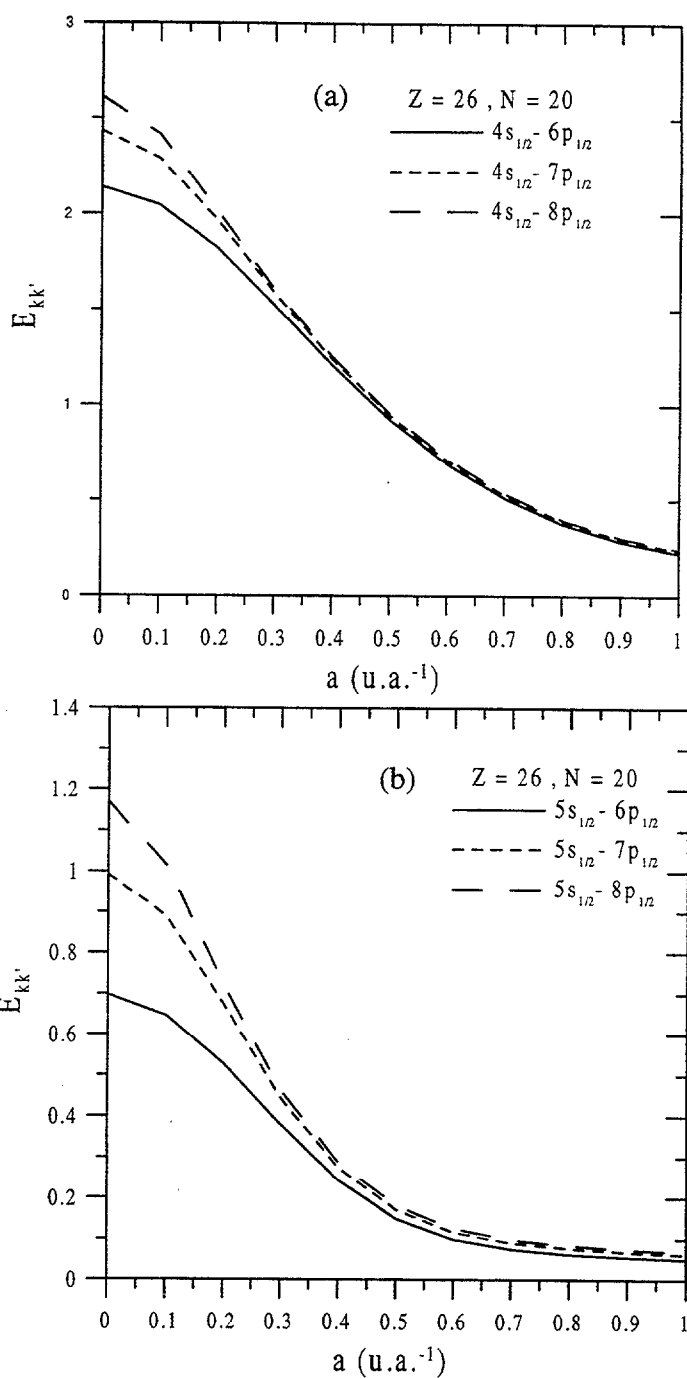


Figura 26. Representación de la energía de transición (en u.a.) frente al radio inverso de Debye para diferentes transiciones del ion Fe VII.

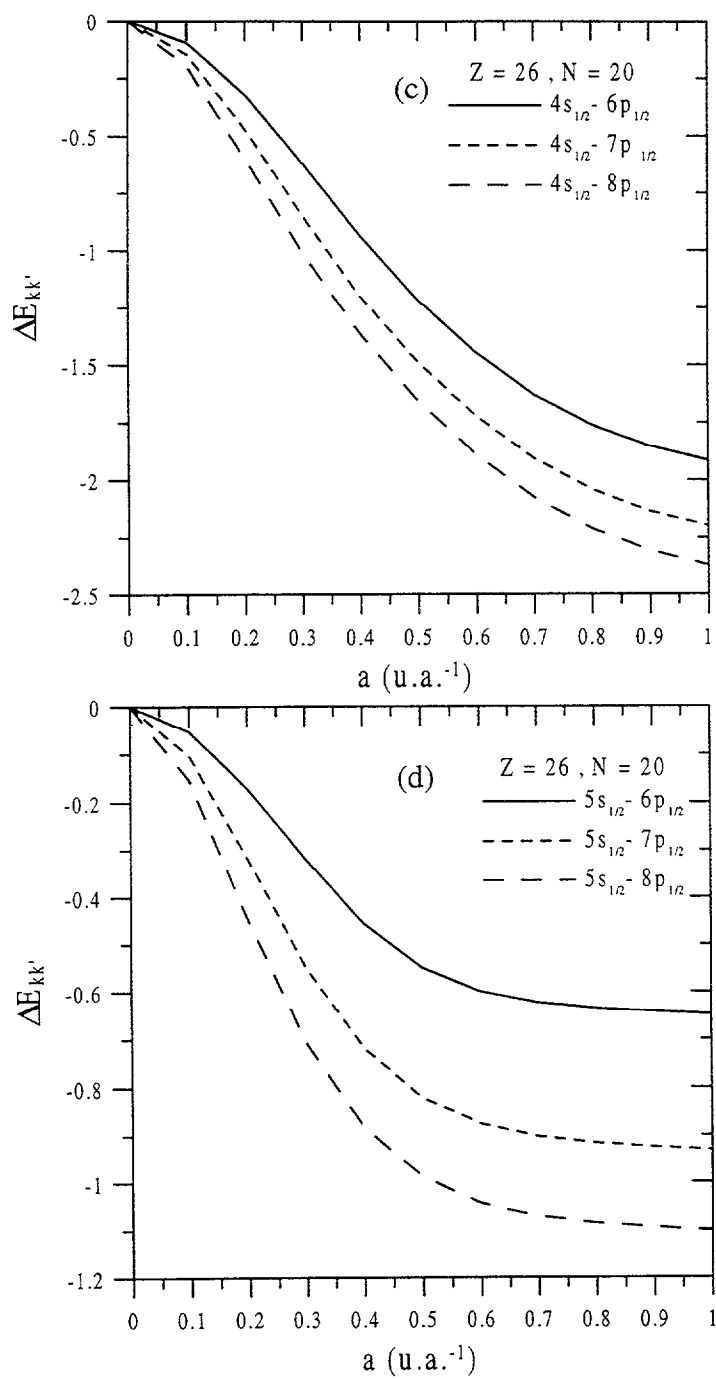


Figura 26bis. Representación de los desplazamientos de línea (en u.a.) frente al radio inverso de Debye para diferentes transiciones del ion Fe VII.

energías de transición aisladas, y por tanto, los desplazamientos de línea son negativos. En efecto, por tratarse de una excitación se cumple que  $n < n'$  y entonces los desplazamientos de dichos niveles cumplen que  $\delta E_k > \delta E_{k'}$ , relación que introducida en (4.66) y (4.67) da los comportamientos comentados. Por tanto, la excitación entre estados de distintas capas en situación no aislada se produce con la absorción de fotones menos energéticos, consecuencia directa de la compresión de niveles que produce el plasma. Este comportamiento se ilustra en las figuras 25 y 26 (a y b) para distintos iones de hierro.

Además, como consecuencia de que al aumentar el número cuántico principal de un nivel disminuye el correspondiente desplazamiento del nivel, se tiene para una transición  $k \rightarrow k'$ , que el desplazamiento de línea aumenta (en valor absoluto) al aumentar  $n'$ . Este comportamiento se ilustra en las figuras 25 y 26 (c y d).

Otra consecuencia directa de la compresión entre niveles de distintas capas es que cuando consideramos transiciones entre un nivel  $k$  y otros dos niveles más externos  $k'$  y  $k''$ , con la condición  $n < n' < n''$ , se cumple que las energías de transición de las transiciones  $k \rightarrow k'$  y  $k \rightarrow k''$  se acercan conforme aumenta el radio inverso, y por tanto las líneas de las dos transiciones se juntan debido a los efectos del plasma; este acercamiento de las dos líneas tiene un límite que viene determinado por las correspondientes energías de transición del átomo de hidrógeno. Es decir, las diferencias entre las energías de transición de ambas transiciones cumple

$$E_{k,k''} - E_{k,k'} < E_{k,k''}^0 - E_{k,k'}^0 \quad (4.69)$$

La desigualdad anterior se puede justificar expresando la diferencia entre las energías de transición no aisladas de las mencionadas transiciones en función de los desplazamientos de nivel, es decir



$$\begin{aligned}
 E_{k,k'} - E_{k,k'} &= E_{k,k'}^0 + \Delta E_{k,k'} - (E_{k,k'}^0 + \Delta E_{k,k'}) = \\
 &= E_{k,k'}^0 + \delta E_{k'} - \delta E_k - E_{k,k'}^0 - \delta E_{k'} + \delta E_k = \\
 &= E_{k,k'}^0 - E_{k,k'}^0 + \delta E_{k'} - \delta E_k
 \end{aligned} \tag{4.70}$$

con lo que podemos escribir

$$E_{k,k'} - E_{k,k'} - (E_{k,k'}^0 - E_{k,k'}^0) = \delta E_{k'} - \delta E_k \tag{4.71}$$

y ahora basta con tener en cuenta que el miembro de la derecha es negativo, ya que  $\delta E_{k'} < \delta E_k$ , para obtener la desigualdad dada por (4.69).

Este comportamiento se ilustra en las figuras 25 (a y b) y 26 (a y b). Por ejemplo para el ion Fe VII, se puede observar que las energías de transición de las transiciones  $5s_{1/2} \rightarrow 6p_{1/2}$ ,  $5s_{1/2} \rightarrow 7p_{1/2}$  y  $5s_{1/2} \rightarrow 8p_{1/2}$  se acercan al aumentar el radio inverso de Debye.

Además cuando estas transiciones ocurren entre un nivel interno ( $k$ ) y otros muy externos ( $k'$  y  $k''$ ), se tiene que los desplazamientos de ambas transiciones tienden al desplazamiento del nivel interno cuando aumenta el radio inverso de Debye o cuánto más externos son los niveles  $k$  y  $k'$ . Es decir,

$$\begin{aligned}
 \Delta E_{k,k'} &= \delta E_{k'} - \delta E_k \rightarrow -\delta E_k \\
 \Delta E_{k,k''} &= \delta E_{k''} - \delta E_k \rightarrow -\delta E_k
 \end{aligned} \tag{4.72}$$

En efecto, para justificar este comportamiento basta tener en cuenta que los niveles muy externos sufren desplazamientos mucho menores que los niveles internos, por lo que se cumple para radios inversos de Debye grandes que  $\delta E_k \gg \delta E_{k'}, \delta E_{k''}$ , lo que da lugar a la ecuación (4.72). Para ilustrar este comportamiento consideremos el ion con  $Z=20$  y  $N=10$  y  $a=0.1$  u.a.<sup>-1</sup>, y las transiciones entre el nivel (interno)  $2p_{1/2}$  y los niveles (externos)  $8s_{1/2}$  y  $10s_{1/2}$ . Las transiciones  $2p_{1/2} \rightarrow 8s_{1/2}$  y  $2p_{1/2} \rightarrow 10s_{1/2}$  tienen asociadas respectivamente un desplazamiento de línea igual a  $-0.2985$  y  $-0.4337$  u.a.,

frente a un valor del desplazamiento del nivel  $2p_{1/2}$  igual a 0.9838 u.a.; si fijamos el valor de  $a$  igual a 1 u.a.<sup>-1</sup> los desplazamientos de línea son respectivamente -7.5040 u.a. y -7.8826 u.a., valores más cercanos al desplazamiento del nivel  $2p_{1/2}$  que para este radio inverso es de 8.5260 u.a.. Por tanto, se pone de manifiesto que un aumento del radio inverso o del número cuántico principal del nivel externo hace que el desplazamiento de línea tienda al desplazamiento (cambiado de signo) del nivel interno involucrado en la transición.

Además estas transiciones son las que presentan un desplazamiento de línea mayor ya que intervienen los estados que sufren los mayores desplazamientos de nivel, los estados internos, y los que muestran los menores desplazamientos de nivel, los estados externos, con lo que se hace máximo el desplazamiento de línea.

Para las transiciones que tienen lugar entre estados de una misma capa, se puede producir un desplazamiento de línea positivo o negativo dependiendo de cual sea el radio inverso de Debye, el nivel o el estado de ionización, debido al comportamiento estudiado para los desplazamientos de los niveles de una misma capa. En cualquier caso se tiene que las energías de transición correspondientes a este tipo de transiciones sufren en general desplazamientos de línea mucho menores que los correspondientes a las transiciones entre niveles de diferentes capas, ya que son cercanos a cero como consecuencia de que los desplazamientos de los niveles de una misma capa son muy parecidos. En la tabla 12 podemos ver este comportamiento, y verificar que efectivamente los desplazamientos de línea son mucho más pequeños que los que se producen, en general, en el otro tipo de transiciones. Por ejemplo para un ion con  $N=10$ , y en el rango de  $Z=20, 30$  y  $40$ , el máximo desplazamiento de línea es del orden de 0.5 u.a. para las transiciones  $3lj \rightarrow 3l'j'$  o de 0.16 u.a. para las transiciones  $5lj \rightarrow 5l'j'$ , frente a un desplazamiento máximo del orden de 7 u.a. para las transiciones  $3s_{1/2} \rightarrow 5p_{1/2}$  o de 17 u.a. para las transiciones  $3s_{1/2} \rightarrow 8p_{1/2}$ .

Hay que tener en cuenta que los comportamientos descritos anteriormente son válidos para transiciones entre estados en los que no se ha producido una inversión como consecuencia de los efectos del plasma. En el caso de una transición (excitación) entre estados que han sufrido una inversión, se tendrá un comportamiento opuesto al especificado anteriormente.

El comportamiento de las energías de transición y desplazamientos de línea con la carga nuclear, el número de electrones y la ionicidad se puede deducir también cualitativamente a partir del comportamiento de los desplazamientos de nivel, para el caso de radios inversos de Debye muy pequeños y para transiciones entre niveles de capas distintas. Para estos radios inversos pequeños vimos que los desplazamientos de nivel tenían una fuerte dependencia con la ionicidad, como se ilustró en la figura 18, de modo que los desplazamientos de un nivel dado de iones con igual ionicidad, eran muy similares. Esto lleva a que los desplazamientos de línea de iones con igual ionicidad sean también similares para radios de Debye pequeños. En efecto, en la tabla 12 se observa para  $a=0.05 \text{ ua.}^{-1}$  y la transición  $5s_{1/2} \rightarrow 7p_{1/2}$  que los desplazamientos de línea correspondientes a los iones con  $N=10$  y  $Z=20$  ( $\chi=10$ ), y  $N=20$  y  $Z=30$  ( $\chi=10$ ), son respectivamente  $-0.0167$  y  $-0.0162$  u.a.; para el mismo radio inverso y transición, los desplazamientos de línea correspondientes a los iones  $N=10$  y  $Z=30$  ( $\chi=20$ ), y  $N=20$  y  $Z=40$  ( $\chi=20$ ), son respectivamente  $-0.0179$  y  $-0.0176$  u.a. En esta misma tabla podemos ver tendencias similares para las transiciones  $5s_{1/2} \rightarrow 6p_{1/2}$  y  $5s_{1/2} \rightarrow 8p_{1/2}$ .

Para radios de Debye pequeños también es sencillo el comportamiento de los desplazamientos de línea con la carga nuclear o el número de electrones debido a que las diferencias entre los desplazamientos de nivel se mantiene constante al variar el número de electrones o la carga nuclear, como se ilustra en las figuras 17 y 17 bis respectivamente (en dichas figuras aparecen los desplazamientos de los niveles con  $Z$  o  $N$  como rectas paralelas).

N=10 a	$\Delta E_{3s1/2-5p1/2}$			$\Delta E_{3s1/2-7p1/2}$			$\Delta E_{3s1/2-8p1/2}$		
	Z=20	Z=30	Z=40	Z=20	Z=30	Z=40	Z=20	Z=30	Z=40
0.01	-0.0010	-0.0011	-0.0011	-0.0025	-0.0027	-0.0028	-0.0035	-0.0037	-0.0038
0.05	-0.0240	-0.0260	-0.0267	-0.0577	-0.0643	-0.0668	-0.0775	-0.0874	-0.0912
0.1	-0.0903	-0.1002	-0.1040	-0.2090	-0.2423	-0.2560	-0.2750	-0.2021	-0.3462
0.5	-1.5419	-1.9774	-2.1808	-2.6932	-4.2258	-4.8945	-3.0001	-5.2222	-6.2931
1	-3.7850	-6.7900	-7.3448	-5.0944	-10.7123	-14.8093	-5.4073	-11.8222	-17.1981
	$\Delta E_{3s1/2-3p1/2}$			$\Delta E_{3s1/2-3p3/2}$			$\Delta E_{3p3/2-3d3/2}$		
0.01	-0.0000	0.0000	0.0000	-0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001
0.05	-0.0000	0.0004	0.0006	-0.0001	0.0003	0.0004	0.0006	0.0014	0.0017
0.1	-0.0001	0.0017	0.0025	-0.0003	0.0012	0.0017	0.0024	0.0055	0.0068
0.5	-0.0050	0.0355	0.0570	-0.0085	0.0256	0.0373	0.0367	0.1166	0.1527
1	-0.0492	0.1082	0.1970	-0.0603	0.0737	0.1261	0.0026	0.38945	0.5317
	$\Delta E_{5s1/2-6p1/2}$			$\Delta E_{5s1/2-7p1/2}$			$\Delta E_{5s1/2-8p1/2}$		
0.01	-0.0007	-0.0007	-0.0008	-0.0016	-0.0016	-0.0017	-0.0025	-0.0027	-0.0027
0.05	-0.0167	-0.0179	-0.0183	-0.0346	-0.0384	-0.0399	-0.0543	-0.0615	-0.0643
0.1	-0.0598	-0.0672	-0.0701	-0.1220	-0.1426	-0.1512	-0.1880	-0.1024	-0.2414
0.5	-0.7473	-1.1456	-1.3127	-1.2176	-2.2652	-2.7010	-1.5241	-3.2616	-4.0994
1	-0.9468	-2.8383	-3.9954	-1.4348	-4.5531	-7.4754	-1.7478	-5.6635	-9.8642
	$\Delta E_{5s1/2-5p1/2}$			$\Delta E_{5s1/2-5p3/2}$			$\Delta E_{5p3/2-5d3/2}$		
0.01	-0.0000	-0.0000	0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0000	0.0000	0.0000
0.05	-0.0008	-0.0001	0.0002	-0.0009	-0.0003	-0.0001	-0.0004	0.0007	0.0012
0.1	-0.0030	-0.0005	0.0008	-0.0033	-0.0011	-0.0059	-0.0017	0.0027	0.0047
0.5	-0.0622	-0.0168	0.0128	-0.0658	-0.0294	-0.0138	-0.0766	0.0272	0.0811
1	-0.1255	-0.1309	0.1412	-0.1307	-0.1664	-0.1899	-0.1587	-0.1569	0.1362

Tabla 12. Desplazamientos de línea  $\Delta E$  (en u.a.) para algunas transiciones de diferentes iones con 10 y 20 electrones.

N=20 <i>a</i>	$\Delta E_{4s1/2-5p1/2}$			$\Delta E_{4s1/2-7p1/2}$			$\Delta E_{4s1/2-8p1/2}$		
	Z=30	Z=40	Z=50	Z=30	Z=40	Z=50	Z=30	Z=40	Z=50
0.01	-0.0006	-0.0006	-0.0006	-0.0020	-0.0022	-0.0022	-0.0029	-0.0032	-0.0033
0.05	-0.0137	-0.0145	-0.0148	-0.0461	-0.0516	-0.0538	-0.0653	-0.0740	-0.0777
0.1	-0.0518	-0.0560	-0.0576	-0.1684	-0.1946	-0.2062	-0.2335	-0.2757	-0.2945
0.5	-0.9215	-1.1106	-1.2021	-2.2962	-3.4095	-3.9233	-2.6748	-4.4740	-5.3334
1	-2.3565	-3.5509	-4.0346	-4.1104	-8.6451	-11.8660	-4.4989	-9.9257	-14.5267
	$\Delta E_{4s1/2-4p1/2}$			$\Delta E_{4s1/2-4p3/2}$			$\Delta E_{4p3/2-4d3/2}$		
0.01	-0.0000	-0.0000	0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0000	0.0001	0.0001
0.05	-0.0005	-0.0000	0.0003	-0.0006	-0.0003	-0.0002	-0.0010	0.0018	0.0029
0.1	-0.0020	-0.0001	0.0010	-0.0025	-0.0011	-0.0008	-0.0039	0.0069	0.0115
0.5	-0.0456	-0.0044	0.0205	-0.0556	-0.0264	-0.0182	-0.1657	0.1160	0.2367
1	-0.2080	-0.0486	0.0512	-0.2378	-0.1222	-0.0829	-1.3304	0.0747	0.6796
	$\Delta E_{5s1/2-6p1/2}$			$\Delta E_{5s1/2-7p1/2}$			$\Delta E_{5s1/2-8p1/2}$		
0.01	-0.0007	-0.0007	-0.0007	-0.0015	-0.0016	-0.0016	-0.0024	-0.0026	-0.0026
0.05	-0.0162	-0.0176	-0.0181	-0.0334	-0.0375	-0.0391	-0.0526	-0.0599	-0.0629
0.1	-0.0594	-0.0666	-0.0694	-0.1204	-0.1401	-0.1855	-0.1855	-0.2212	-0.2371
0.5	-0.8618	-1.1859	-1.3362	-1.4495	-2.3343	-1.8282	-1.8282	-3.3987	-4.1388
1	-1.3270	-3.2429	-4.1642	-1.9571	-5.2691	-2.3456	-2.3456	-6.5500	-10.5589
	$\Delta E_{5s1/2-5p1/2}$			$\Delta E_{5s1/2-5p3/2}$			$\Delta E_{5p3/2-5d3/2}$		
0.01	-0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0000	-0.0001	-0.0000	0.0000
0.05	-0.0010	-0.0004	-0.0000	-0.0012	-0.0007	-0.0006	-0.0017	-0.0003	0.0004
0.1	-0.0037	-0.0015	-0.0002	-0.0043	-0.0028	-0.0023	-0.0062	-0.0011	0.0015
0.5	-0.0748	-0.0353	-0.0074	-0.0841	-0.0586	-0.0501	-0.1442	-0.0395	0.0214
1	-0.2032	-0.1745	-0.0668	-0.2200	-0.2439	-0.2040	-0.3464	-0.3273	-0.0415

(Continuación tabla 12)

Cuando consideramos radios inversos de Debye grandes, los desplazamientos de línea aumentan en valor absoluto al crecer la ionicidad, ya que aumenta con la ionicidad la diferencia entre los desplazamientos de nivel, como se ilustra en la figura 18 c.

Cuando consideramos radios inversos de Debye grandes, los desplazamientos de línea aumentan en valor absoluto cuando crece la carga nuclear, debido a que la diferencia entre los desplazamientos de nivel crece (ver figura 17 d), y cuando disminuye el número de electrones, debido a que las diferencias entre los desplazamientos de nivel aumentan (ver figura 17 b).

Por tanto para las transiciones entre niveles de distintas capas, los desplazamientos de línea originados por el plasma serán tanto más importantes conforme menor sea el número cuántico principal del nivel interno y mayor sea el del nivel externo (de los niveles que participan en la transición); conforme más ionizado esté el ion, y para una ionicidad dada, conforme mayor sea la carga nuclear y menor el número de electrones.

En la tabla anterior se muestran los desplazamientos de línea de algunas transiciones para diferentes iones, con el objeto de ilustrar los comportamientos comentados.

Más complicado es el comportamiento de los desplazamientos de línea de las transiciones entre niveles de una misma capa. En general estos desplazamientos son mucho más pequeños que los correspondientes a los desplazamientos de línea de transiciones entre distintas capas (ver tabla 12).

Una vez estudiados los efectos del plasma sobre las energías de transición pasamos al análisis de las fuerzas de oscilador. Para este propósito utilizaremos el

desplazamiento causado por el plasma sobre la fuerza de oscilador de la transición  $k \rightarrow k'$ ,  $f_{k,k'}$ , respecto de la correspondiente fuerza de oscilador en situación aislada,  $f_{k,k'}^0$ , dado por

$$\delta f_{k,k'} = f_{k,k'} - f_{k,k'}^0 \quad (4.73)$$

así como el desplazamiento relativo dado por

$$(\delta f_{k,k'})_{rel} = \frac{\delta f_{k,k'}}{f_{k,k'}^0} \quad (4.74)$$

Para un ion dado las fuerzas de oscilador de transiciones entre niveles de distintas capas disminuyen cuando crece el radio inverso de Debye, respecto de las correspondientes fuerzas de oscilador en situación aislada, mientras que en las transiciones entre niveles de una misma capa aumentan. Para comprender este comportamiento es necesario recordar que la fuerza de oscilador es proporcional al desplazamiento de línea y al cuadrado del elemento de matriz radial de los niveles que intervienen en la transición.

Para las transiciones entre niveles de distintas capas se tenía que las energías de transición disminuían respecto de la aislada, lo que hace que la fuerza de oscilador tienda a disminuir. Por otro lado, vimos que las funciones de onda se veían más desplazadas (la densidad de probabilidad se desplazaba hacia valores mayores de la distancia al núcleo) por el plasma conforme mayor era el número cuántico principal del nivel, por lo que para este tipo de transiciones el solapamiento entre funciones de ondas disminuye, y por tanto, disminuye el elemento de matriz radial. Con estos comportamientos queda justificada la disminución de la fuerza de oscilador, y por consiguiente, la disminución de la probabilidad de transición para las transiciones entre niveles de diferentes capas.

Para las transiciones entre niveles de una misma capa el comportamiento no es tan evidente como en el caso anterior ya que los desplazamientos de nivel podían

ser positivos o negativos, aunque en general pequeños. Se observa que las fuerzas de oscilador para estas transiciones aumentan cuando crece el radio inverso de Debye, y este comportamiento puede ser debido al solapamiento que produce el plasma entre las funciones de onda de una misma capa.

Estos efectos tendrán una implicación directa en una propiedad esencial en los experimentos de fusión por confinamiento inercial cual es la opacidad, a través de la sección eficaz ligado-ligado.

En la tabla 13 ilustramos los comportamientos descritos tanto para transiciones entre capas diferentes como para aquellas que tienen lugar dentro de una misma capa. Además se ilustra en dicha tabla que para una transición  $k \rightarrow k'$  el desplazamiento de la fuerza de oscilador disminuye al aumentar el número cuántico principal del nivel externo, es decir, al aumentar  $n'$ . Por ejemplo para la transición  $3s_{1/2} \rightarrow 5p_{1/2}$  del ion con  $Z=20$  y  $N=10$  y un valor  $a=0.01$  u.a.<sup>-1</sup> se encuentra un desplazamiento para la fuerza de oscilador de  $0.000015$  u.a. y un desplazamiento relativo del  $0.076\%$ . Para la transición  $3s_{1/2} \rightarrow 8p_{1/2}$  del mismo ion e igual valor de  $a$ , se tiene un desplazamiento de  $0.000007$  u.a. y un desplazamiento relativo del  $0.22\%$ . Si consideramos un radio inverso de  $a=0.1$  u.a.<sup>-1</sup> se tiene para el mismo ion y la transición  $3s_{1/2} \rightarrow 5p_{1/2}$  un desplazamiento de  $0.00068$  u.a. y un desplazamiento relativo del  $3.4\%$ ; para la transición  $3s_{1/2} \rightarrow 8p_{1/2}$  se tiene  $0.00069$  u.a. y  $22.1\%$ . Como se observa, para radios de Debye de  $0.1$  u.a.<sup>-1</sup> se tienen para las fuerzas de oscilador desplazamientos relativos importantes, sobre todo para las transiciones donde participan niveles externos (como el nivel  $8p_{1/2}$  en el ejemplo comentado).

Finalmente, comparamos las energías de transición y las fuerzas de oscilador obtenidas con el potencial  $U_{ef}^{A0}$  con las correspondientes cantidades calculadas con los potenciales  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ . En las tablas 14 y 15 aparecen tres valores del desplazamiento de línea o de la fuerza de oscilador para un ion y un radio inverso de



Debye particular. El primero corresponde al valor calculado con  $U_{ef}^{A0}$ , el segundo al calculado con  $U_{ef}^R$ , y el tercero, corresponde al calculado con  $U_{ef}^C$ . Los casilleros que aparecen con una línea discontinua, significa que alguno de los niveles que intervienen en la transición, o ambos, no liga para el radio inverso de Debye considerado.

En la tabla 14 se muestra para las transiciones entre niveles de distintas capas, que si bien los desplazamientos de línea proporcionados por los tres potenciales son del mismo orden, sistemáticamente el potencial  $U_{ef}^{A0}$  da lugar a los desplazamientos menores y  $U_{ef}^C$  a los mayores. Para las transiciones entre niveles de una misma capa se observan mayores diferencias entre los desplazamientos de línea proporcionados por los tres potenciales, encontrándose además, que en algunos casos  $U_{ef}^{A0}$  proporciona mayores desplazamientos que  $U_{ef}^R$  o  $U_{ef}^C$ .

En la tabla 15 se puede ver que para todas las transiciones entre niveles de distintas capas el potencial  $U_{ef}^C$  proporciona los mayores desplazamientos de las fuerzas de oscilador mientras que  $U_{ef}^{A0}$  los menores.

N=10	FO(3s1/2-5p1/2)			FO(3s1/2-7p1/2)			FO(3s1/2-8p1/2)		
	Z=20	Z=30	Z=40	Z=20	Z=30	Z=40	Z=20	Z=30	Z=40
0	0.019814	0.027713	0.031201	0.005079	0.006750	0.007435	0.003140	0.004135	0.004537
0.01	0.019799	0.027707	0.031239	0.005077	0.006747	0.007425	0.003133	0.004131	0.004533
0.05	0.019635	0.027639	0.031165	0.004887	0.006667	0.007384	0.002937	0.004047	0.004485
0.1	0.019133	0.027431	0.031090	0.004410	0.006457	0.007277	0.002445	0.003178	0.004367
0.5	0.008005	0.022136	0.028185	0.000370	0.001866	0.004575	0.000179	0.000258	0.001656
1	0.001019	0.007729	0.020099	0.000199	0.000195	0.000223	0.000113	0.000093	0.00008
	FO(3s1/2-3p1/2)			FO(3s1/2-3p3/2)			FO(3p3/2-3d3/2)		
0	0.152941	0.094400	0.068211	0.318538	0.219379	0.192684	0.035761	0.019343	0.013134
0.01	0.152964	0.094405	0.068214	0.318588	0.219384	0.192640	0.035765	0.019345	0.013134
0.05	0.153138	0.094470	0.068245	0.318931	0.219514	0.192708	0.035850	0.019370	0.013145
0.1	0.153654	0.094668	0.068353	0.319957	0.219907	0.192954	0.036101	0.019445	0.013181
0.5	0.167746	0.100363	0.071347	0.347928	0.231209	0.198892	0.043319	0.021636	0.014209
1	0.206120	0.116236	0.079831	0.423847	0.262651	0.215684	0.066329	0.028193	0.017226
	FO(5s1/2-6p1/2)			FO(5s1/2-7p1/2)			FO(5s1/2-8p1/2)		
0	0.067273	0.112346	0.134947	0.022647	0.033211	0.038085	0.010930	0.015355	0.017318
0.01	0.067255	0.112093	0.134870	0.022631	0.033127	0.038060	0.010904	0.015320	0.017317
0.05	0.065589	0.111410	0.134485	0.021952	0.032860	0.037924	0.010400	0.015112	0.017195
0.1	0.061222	0.109159	0.132977	0.020188	0.032431	0.037819	0.009062	0.019299	0.019998
0.5	0.002115	0.061084	0.104131	0.000873	0.011625	0.026838	0.000446	0.001521	0.008208
1	0.004701	0.000635	0.032026	0.000674	0.000322	0.001796	0.000198	0.000171	0.000639
	FO(5s1/2-5p1/2)			FO(5s1/2-5p3/2)			FO(5p3/2-5d3/2)		
0	0.287559	0.177146	0.128285	0.596746	0.407678	0.355702	0.075041	0.041980	0.028955
0.01	0.287619	0.177199	0.128290	0.596876	0.407600	0.355701	0.075094	0.041984	0.028963
0.05	0.288813	0.177611	0.128555	0.599201	0.408581	0.356197	0.075774	0.042212	0.029008
0.1	0.292212	0.179073	0.129308	0.605805	0.411433	0.357597	0.077702	0.042912	0.029425
0.5	0.365228	0.216830	0.150432	0.745758	0.483466	0.397012	0.115559	0.061372	0.038816
1	0.449885	0.316453	0.207970	0.904944	0.666100	0.502489	0.058488	0.093781	0.066687

**Tabla 13.** Fuerzas de oscilador (en u.a.) para algunas transiciones de diferentes iones con 10 y 20 electrones.

N=20 a	FO(4s1/2-5p1/2)			FO(4s1/2-7p1/2)			FO(4s1/2-8p1/2)		
	Z=30	Z=40	Z=50	Z=30	Z=40	Z=50	Z=30	Z=40	Z=50
0	0.047774	0.081765	0.101973	0.007821	0.011652	0.013625	0.004447	0.006518	0.007558
0.01	0.047770	0.081768	0.101972	0.007817	0.011647	0.013619	0.004440	0.006512	0.007558
0.05	0.047412	0.081557	0.101845	0.007618	0.011551	0.013564	0.004232	0.006412	0.074990
0.1	0.046274	0.080895	0.101471	0.007080	0.011280	0.013408	0.003705	0.006138	0.000734
0.5	0.021832	0.065362	0.091457	0.000680	0.004753	0.009502	0.000298	0.000712	0.003526
1	0.000006	0.027718	0.065684	0.000014	0.000043	0.000662	0.000009	0.000191	0.000197
	FO(4s1/2-4p1/2)			FO(4s1/2-4p3/2)			FO(4p3/2-4d3/2)		
0	0.218259	0.154580	0.119966	0.471907	0.380563	0.358570	0.075206	0.048763	0.035822
0.01	0.218285	0.154592	0.119969	0.471961	0.380373	0.358575	0.075214	0.048766	0.035823
0.05	0.218577	0.154730	0.120048	0.472522	0.380832	0.358721	0.075375	0.048835	0.035859
0.1	0.219456	0.155130	0.120282	0.474202	0.381605	0.359152	0.075855	0.049041	0.035966
0.5	0.243079	0.166815	0.127139	0.519212	0.403620	0.371812	0.088505	0.054861	0.039121
1	0.305274	0.199410	0.146280	0.632854	0.464500	0.406909	0.039114	0.071962	0.048269
	FO(5s1/2-6p1/2)			FO(5s1/2-7p1/2)			FO(5s1/2-8p1/2)		
0	0.048706	0.087078	0.110101	0.017058	0.027136	0.032605	0.008336	0.012722	0.015007
0.01	0.048600	0.087022	0.110127	0.017006	0.027117	0.032590	0.008304	0.012709	0.015005
0.05	0.047735	0.086551	0.109825	0.016619	0.026924	0.032479	0.007977	0.012551	0.014912
0.1	0.045349	0.085198	0.108800	0.015535	0.026394	0.032113	0.007115	0.012118	0.014641
0.5	0.004570	0.052784	0.087721	0.001028	0.001181	0.023669	0.000457	0.001683	0.007811
1	0.004546	0.001602	0.034974	0.000706	0.000518	0.001812	0.000222	0.000236	0.000536
	FO(5s1/2-5p1/2)			FO(5s1/2-5p3/2)			FO(5p3/2-5d3/2)		
0	0.298545	0.210395	0.163068	0.640929	0.510473	0.475996	0.103806	0.068244	0.055383
0.01	0.298548	0.210339	0.163073	0.640914	0.510487	0.476001	0.103822	0.068250	0.050387
0.05	0.299200	0.210731	0.163267	0.642132	0.511103	0.476343	0.104142	0.068420	0.050479
0.1	0.301242	0.211743	0.163823	0.645928	0.512907	0.477306	0.105179	0.068912	0.050756
0.5	0.348172	0.237995	0.179761	0.731127	0.560427	0.505143	0.121914	0.082177	0.058363
1	0.392641	0.308415	0.223092	0.795045	0.681095	0.578909	0.025962	0.107133	0.079951

(Continuación tabla 13)

N=10									
A	$\Delta E$ 3s1/2-5p1/2			$\Delta E$ 3s1/2-8p1/2			$\Delta E$ 5s1/2-8p1/2		
	Z=30	50	70	Z=30	50	70	Z=30	50	70
0.1	-0.1002	-0.1056	-0.1062	-0.2021	-0.3573	-0.3667	-0.1024	-0.2500	-0.2580
	-0.1052	-0.1083	-0.1080	0.3416	-0.3663	-0.3720	-0.2369	-0.2563	-0.2623
	-0.1237	-0.1287	-0.1302	0.3641	-0.3915	-0.4004	-0.2400	-0.2598	-0.2662
0.5	-1.9774	-2.2968	-2.4077	-5.2222	-6.9046	-7.0003	-3.2616	-4.5756	-5.1371
	-2.0861	-2.3563	-2.4487	-5.6058	-7.0988	-7.7346	-3.5384	-4.7095	-5.2295
	-2.1786	-2.4580	-2.5592	-5.7182	-7.2243	-7.8713	-3.5553	-4.7283	-5.2498
N=10									
0.1	$\Delta E$ 3s1/2-3p1/2			$\Delta E$ 5s1/2-5p3/2			$\Delta E$ 5p3/2-5d3/2		
	Z=30	50	70	Z=30	50	70	Z=30	50	70
0.1	-0.0004	0.0030	0.0036	-0.0005	-0.0006	-0.0019	0.0027	0.0059	0.0066
	0.0018	0.0031	0.0036	-0.0012	-0.0006	-0.0019	0.0028	0.0060	0.0068
	0.0068	0.0095	0.0111	-0.0004	0.0002	-0.0014	0.0010	0.0042	0.0050
0.5	-0.0355	0.0702	0.0854	-0.0168	-0.0143	-0.0512	0.0272	0.1136	0.1511
	0.0373	0.0720	0.0868	-0.0320	-0.0148	-0.0525	0.0267	0.1163	0.1536
	0.0605	0.1030	0.1236	-0.0294	-0.0114	-0.0497	0.0195	0.1078	0.1448
N=20									
0.1	$\Delta E$ 4s1/2-7p1/2			$\Delta E$ 4s1/2-8p1/2			$\Delta E$ 5s1/2-8p1/2		
	Z=30	50	70	Z=30	50	70	Z=30	50	70
0.1	-0.1684	-0.2062	-0.2155	-0.2335	-0.2945	-0.3109	-0.1855	-0.2371	-0.2512
	-0.1775	-0.2093	-0.2173	-0.2489	-0.3001	-0.3143	-0.2006	-0.2428	-0.2548
	-0.2323	-0.2735	-0.2859	-0.3064	-0.3685	-0.3874	-0.2196	-0.2677	-0.2820
0.5	-2.2962	-3.9233	-4.4570	-2.6748	-5.3334	-6.2073	-1.8282	-4.1388	-4.8923
	-2.4712	-3.9770	-4.4892	-2.8681	-5.4447	-6.2724	-2.0241	-4.2584	-4.9628
	-2.6934	-4.2885	-4.8247	-3.0902	-5.7753	-6.6304	-2.0780	-4.3819	-5.0984
N=20									
0.1	$\Delta E$ 4s1/2-4p1/2			$\Delta E$ 5s1/2-5p3/2			$\Delta E$ 5p3/2-5d3/2		
	Z=30	50	70	Z=30	50	70	Z=30	50	70
0.1	-0.0020	0.0010	0.0022	-0.0043	-0.0002	0.0013	-0.0062	0.0016	0.0043
	-0.0020	0.0009	0.0021	-0.0040	-0.0002	0.0013	-0.0066	0.0015	0.0043
	-0.0016	0.0078	0.0115	-0.0033	-0.0029	0.0054	-0.0065	0.0034	0.0066
0.5	-0.0456	0.0205	0.0489	-0.0841	-0.0074	0.0263	-0.1442	0.0214	0.0881
	-0.0438	0.1880	0.0472	-0.0815	-0.0084	0.0257	-0.1657	0.0203	0.0877
	-0.0516	0.0493	0.0921	-0.0875	0.0040	0.0449	-0.1867	0.0256	0.0975
N=45									
0.1	$\Delta E$ 5s1/2-5p3/2			$\Delta E$ 5s1/2-7p1/2			$\Delta E$ 5s1/2-8p1/2		
	Z=30	50	70	Z=30	50	70	Z=30	50	70
0.1		-0.0061	-0.0021		-0.0996	-0.1406		-0.1468	-0.2221
		-0.0049	-0.0020		-0.0998	-0.1375		-0.1547	-0.2203
		-0.0192	-0.0008		-0.1785	-0.2455		-0.2390	-0.3421
0.5		-0.1284	-0.0484		-1.1793	-2.6603		-1.3860	-3.9723
		-0.0924	-0.0448		-1.2034	-2.5709		-1.4273	-3.9155
		-0.1703	-0.0454		-1.4413	-3.0776		-1.6653	-4.4868

**Tabla 14.** Energías de transición (en u.a.) para algunas transiciones de diferentes iones con 10 y 20 electrones, calculadas con los potenciales  $U_{ef}^{A0}$ ,  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ .

N=10	FO(3s1/2-5p1/2)			FO(3s1/2-8p1/2)			FO(5s1/2-8p1/2)		
	Z=30	50	70	Z=30	50	70	Z=30	50	70
0	0.027707	0.033182	0.035277	0.004135	0.004736	0.004908	0.015355	0.018431	0.019512
0.1	0.027431	0.033094	0.035221	0.003825	0.004633	0.004854	0.014655	0.018170	0.019357
	0.027408	0.033090	0.035220	0.003807	0.004627	0.004854	0.014621	0.018153	0.019382
	0.027370	0.033078	0.035215	0.003804	0.004626	0.004854	0.014599	0.018146	0.019379
0.5	0.022136	0.031285	0.034351	0.000258	0.002852	0.003942	0.001521	0.013036	0.016988
	0.021752	0.031230	0.034335	-----	0.002776	0.003922	-----	0.012768	0.016926
	0.021559	0.031174	0.034307	-----	0.002772	0.003921	-----	0.012737	0.016917
N=10	FO(3s1/2-3p1/2)			FO(5s1/2-5p3/2)			FO(5p3/2-5d3/2)		
0	0.094400	0.053397	0.037264	0.407678	0.361944	0.478581	0.041980	0.022069	0.014890
0.1	0.099467	0.053470	0.037298	0.411431	0.363139	0.479042	0.042912	0.022344	0.015011
	0.094682	0.053471	0.037299	0.411610	0.363184	0.479156	0.042958	0.022351	0.015013
	0.095118	0.053615	0.037366	0.413014	0.363551	0.479299	0.042782	0.022301	0.014991
0.5	0.100363	0.005528	0.038123	0.483466	0.387159	0.489380	0.061372	0.028012	0.017707
	0.100692	0.055335	0.038138	0.488199	0.387839	0.489557	0.062655	0.028174	0.017756
	0.010320	0.056052	0.038475	0.495130	0.389671	0.490281	0.061862	0.027927	0.017642
N=20	FO(4s1/2-7p1/2)			FO(4s1/2-8p1/2)			FO(5s1/2-8p1/2)		
0	0.007821	0.013625	0.015564	0.004447	0.007558	0.008554	0.008336	0.015007	0.017281
0.1	0.007080	0.013408	0.015467	0.003705	0.007339	0.008456	0.007115	0.014641	0.017128
	0.007008	0.013397	0.015466	0.003623	0.007332	0.008454	0.006986	0.014651	0.017124
	0.006901	0.013372	0.015452	0.003567	0.007316	0.008447	0.006876	0.014621	0.017111
0.5	0.000680	0.009502	0.013699	0.000298	0.003526	0.006685	0.000457	0.007811	0.014148
	-----	0.009314	0.013649	-----	0.003249	0.006638	-----	0.007250	0.014064
	-----	0.009172	0.013587	-----	0.003182	0.006606	-----	0.007097	0.013997
N=20	FO(4s1/2-4p1/2)			FO(5s1/2-5p3/2)			FO(5p3/2-5d3/2)		
0	0.218259	0.119966	0.083645	0.298545	0.163068	0.113917	0.103806	0.050383	0.032981
0.1	0.219456	0.120282	0.083785	0.301242	0.163823	0.114270	0.105179	0.050756	0.033139
	0.219366	0.120269	0.083782	0.301221	0.163826	0.114270	0.105191	0.050756	0.033139
	0.223419	0.121270	0.084218	0.305908	0.164971	0.114769	0.106668	0.051005	0.033226
0.5	0.243079	0.127139	0.086866	0.348172	0.179761	0.121660	0.121914	0.058363	0.036478
	0.240495	0.126827	0.086781	0.347826	0.179589	0.121610	0.115665	0.058345	0.036484
	0.261087	0.131837	0.088595	0.369060	0.185335	0.124112	0.110111	0.059648	0.039927
N=45	FO(5s1/2-5p3/2)			FO(5s1/2-7p1/2)			FO(5s1/2-8p1/2)		
	Z=30	50	70	Z=30	50	70	Z=30	50	70
0		0.327870	0.219282		0.004576	0.021384		0.002407	0.010161
0.1		0.329127	0.219771		0.003852	0.021057		0.001774	0.009880
		0.328792	0.219714		0.003766	0.02105		0.001653	0.009876
		0.336577	0.222325		0.003497	0.020893		0.001540	0.009805
0.5		0.348833	0.229950		0.000008	0.015015		0.000007	0.004873
		0.342204	0.228420		-----	0.014937		-----	0.004558
		0.373453	0.241493		-----	0.014153		-----	0.004245

Tabla 15. Fuerzas de oscilador FO (en u.a.) para algunas transiciones de diferentes iones con 10, 20 y 45 electrones, calculadas con los potenciales  $U_{ef}^{A0}$ ,  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ .

# Capítulo 5

## Conclusiones y líneas futuras.

---

### 5.1.- Conclusiones.

Las principales conclusiones que se derivan del trabajo realizado en la Tesis Doctoral, suficientemente explicadas en los distintos apartados, se pueden resumir en:

1. Hemos desarrollado un método para incorporar los efectos del plasma en el potencial atómico, dando lugar a un potencial efectivo analítico no aislado cuando se aplica a una gran variedad de potenciales analíticos de átomo aislado. Dicho método es válido para plasmas en equilibrio local termodinámico, y para condiciones de alta temperatura y densidades bajas e intermedias (parámetro de acoplamiento  $\Gamma < 1$ ).
2. El método de construcción del potencial efectivo considera las distribuciones de carga de Boltzmann para las partículas del plasma (iones y electrones libres), y corrige la autointeracción del electrón óptico (o reacción del electrón óptico con el plasma) siguiendo las ideas de diferentes autores (Theimer y Kepple, 1966 y Schlüter, 1990), lo que da lugar a un potencial efectivo con un comportamiento coulombiano a grandes distancias del origen.
3. Como consecuencia del comportamiento coulombiano y de que se trata de un modelo de potencial no acotado o extendido, el número de niveles ligados es infinito.

4. El comportamiento anterior permite que la convergencia de la función de partición interna del plasma se pueda obtener aplicando algún modelo de números de ocupación, y conseguir la convergencia sin producir discontinuidades en las magnitudes termodinámicas. Por tanto, los potenciales construidos por el método desarrollado en esta Tesis son válidos para determinar satisfactoriamente tanto las propiedades atómicas como termodinámicas de un plasma.
5. Hemos propuesto y estudiado un potencial analítico efectivo para átomos inmersos en plasmas construido a partir del potencial analítico aislado para el estado fundamental propuesto por Martel *et al.*(1995).
6. Para un radio inverso de Debye dado, la máxima diferencia entre el potencial no aislado y el aislado se encuentra una vez alcanzado el comportamiento asintótico y es igual a la ionicidad del ion, valor que es independiente del radio inverso de Debye.
7. Para un radio de Debye dado, la diferencia entre el potencial no aislado y el aislado a cortas distancias del origen es mayor cuanto mayor sea el radio inverso de Debye, la ionicidad del ion o la distancia al origen.
8. El desplazamiento relativo medio del potencial efectivo no aislado respecto del aislado aumenta con el radio inverso de Debye y la carga nuclear, y disminuye cuando aumenta el número de electrones ligados del ion. Además depende del estado de ionización, de manera que dos iones con igual ionicidad tienen aproximadamente el mismo desplazamiento relativo medio del potencial.

9. Las energías de los niveles monoeléctricos,  $E_{nj}$ , disminuyen en valor absoluto cuando aumenta el radio inverso de Debye, es decir, las energías se acercan hacia el continuo (energía cero).
10. El desplazamiento de un nivel,  $\delta E_{nj}$ , es una cantidad siempre positiva y aumenta al aumentar el radio inverso de Debye.
11. Se observa que para átomos muy ionizados el desplazamiento del nivel  $1s_{1/2}$  tiene un comportamiento lineal con  $a$  en el rango de radios inversos de Debye estudiado, mientras que éste desaparece al disminuir la ionización.
12. Teniendo en cuenta que el radio inverso de Debye es proporcional a  $\sqrt{\rho/kT}$ , podemos establecer el siguiente comportamiento de las energías de nivel: Para una densidad fija, al aumentar la temperatura disminuye el radio inverso de Debye, y entonces, se produce una disminución del desplazamiento de nivel. Para una temperatura dada, al aumentar la densidad aumenta el radio inverso de Debye, y entonces, se produce un aumento del desplazamiento de nivel.
13. Para un ion dado inmerso en un plasma concreto ( $Z$ ,  $N$  y  $a$  fijos), cuando el número cuántico principal aumenta el desplazamiento de nivel disminuye, si bien, el desplazamiento de nivel relativo aumenta.
14. Para un ion dado inmerso en un plasma concreto, y un nivel con número cuántico principal  $n$  y angular orbital  $l$ , el desplazamiento de nivel disminuye al aumentar el número cuántico de momento angular total  $j$ .



15. Para un ion dado inmerso en un plasma concreto, el desplazamiento de nivel puede aumentar o disminuir cuando aumenta el número cuántico angular orbital. El comportamiento general es que los desplazamientos aumentan con  $l$  cuando se trata de niveles poco excitados (número cuántico principal bajo), y se observa una inversión de este comportamiento cuando aumenta el número cuántico principal, o cuando aumenta el número de electrones (es decir, disminuye la ionicidad), o cuando aumenta el radio inverso de Debye. Además, este comportamiento puede llevar consigo una inversión en las energías de los niveles como consecuencia de la influencia del plasma.
16. Para iones pertenecientes a una misma especie iónica inmersos en un plasma concreto, el desplazamiento de un nivel disminuye al aumentar el número de electrones  $N$ .
17. Para iones pertenecientes a una misma secuencia isoelectrónica inmersos en un plasma, el desplazamiento de un nivel aumenta al aumentar la carga nuclear  $Z$ .
18. Como consecuencia de los dos resultados anteriores, en un plasma concreto aumenta el desplazamiento de nivel cuando aumenta la ionicidad del ion.
19. Las energías totales sufren una débil modificación como consecuencia del plasma en el rango de radios inversos de Debye estudiados, produciéndose una disminución de la energía en valor absoluto cuando aumenta el radio inverso de Debye. Los iones más afectados son los poco ionizados.
20. Las funciones de onda de un nivel sufren en cada punto del espacio un desplazamiento respecto de la correspondiente función de onda aislada, que da lugar

a un desplazamiento de los nodos hacia puntos más alejados del origen y una disminución en valor absoluto de los máximos y mínimos relativos.

21. El desplazamiento medio de las funciones de onda aumenta cuando aumenta el radio inverso de Debye y el número de electrones ligados del ion, y disminuye cuando aumenta la carga nuclear.
22. Para radios inversos de Debye grandes los desplazamientos de línea tienden a la diferencia entre los desplazamientos de línea hidrogenoides y los aislados, y las energías de transición tienden a la energía de transición hidrogenoide.
23. Los desplazamientos de línea de transiciones que tienen lugar entre dos estados  $k$  y  $k'$  (con  $n < n'$ , en una absorción) de distintas capas son negativos, y por tanto, las energías de transición disminuyen respecto de las aisladas. Entonces, la excitación entre estados de distintas capas en situación no aislada se produce con la absorción de fotones menos energéticos.
24. Dados tres niveles  $k$ ,  $k'$  y  $k''$  de distintas capas tal que  $n < n' < n''$ , se cumple que  $E_{k,k''} - E_{k,k'} < E_{k,k''}^0 - E_{k,k'}^0$ . Por tanto, la diferencia entre las energías de transición de las transiciones  $k \rightarrow k'$  y  $k \rightarrow k''$  disminuye conforme aumenta el radio inverso, es decir, las líneas de las transiciones se juntan debido a los efectos del plasma. Esto ocurre hasta un límite que viene dado para cada transición por la correspondiente energía de transición del átomo de hidrógeno.
25. Cuando estas transiciones tienen lugar entre un nivel interno ( $k$ ) y otros muy externos ( $k'$  y  $k''$ ) se cumple que los desplazamientos de línea de ambas transiciones

para radios de Debye grandes son aproximadamente iguales, y el valor es similar al del nivel más interno ( $k$ ).

26. Para transiciones que tienen lugar entre estados de una misma capa, se puede producir un desplazamiento de línea positivo o negativo dependiendo de cual sea el radio inverso de Debye, el nivel o el estado de ionización. En cualquier caso lo que ocurre es que el posible desplazamiento de la línea es mucho más pequeño que los que sufre las transiciones entre estados de capas distintas.
27. Para las transiciones que tienen lugar entre niveles de una misma capa las fuerzas de oscilador aumentan al aumentar el radio inverso de Debye, mientras que para transiciones entre niveles de distintas capas la fuerza de oscilador disminuye.
28. El potencial efectivo propuesto ( $U_{ef}^{A0}$ ) ha sido comparado con otros dos ( $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ ), contruidos a partir del mismo potencial aislado pero siguiendo métodos diferentes para incorporar los efectos de densidad y temperatura (Roger, 1981; Rouse, 1969). En general podemos decir que los cambios observados en las distintas magnitudes estudiadas, debido a los efectos del plasma, son similares en los tres potenciales si bien podemos destacar importantes diferencias.
- 28.1. Como consecuencia de las consideraciones sobre el electrón óptico, el potencial  $U_{ef}^{A0}$  tiene un comportamiento coulombiano a largas distancias del núcleo, mientras que los potenciales  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$  tienden a cero más rápido que  $1/r$ . Por tanto, el primero tiene un número infinito de autovalores, mientras que los otros dos tienen un número finito, dependiendo del valor de  $a$ .
- 28.2. Esto hace que en general los efectos del plasma sean más acusados para los potenciales  $U_{ef}^R$  y  $U_{ef}^C$ .

## 5.2.- Líneas futuras.

En cuanto a las líneas de investigación que se abren con esta Tesis se pueden distinguir:

En primer lugar, la implementación del potencial efectivo propuesto en programas de cálculo de abundancias de especies iónicas y de propiedades ópticas de plasmas en equilibrio local termodinámico. Esto dotaría a los programas de cálculo de una gran rapidez, y permitiría tratar un mayor número de configuraciones excitadas para el cálculo de propiedades ópticas como la opacidad multifrecuencial o las opacidades medias de Rosseland y Planck. En lo que respecta al cálculo de las abundancias ya se ha implementado el potencial efectivo en un código de cálculo (Rubiano *et al.*, 1999) basado en la ecuación de Saha, utilizando como criterios de corte de la función de partición el criterio de la energía o el criterio del radio. La principal influencia que introduce el potencial con efectos de densidad y temperatura respecto del aislado, es que da lugar a una abundancia menor para las configuraciones excitadas, y por tanto, a la desaparición de las transiciones en los que intervienen niveles muy externos.

En segundo lugar, el potencial aislado del que se partió para la construcción del potencial efectivo propuesto en esta Tesis es válido para configuraciones en el estado fundamental y simplemente excitadas. Sería conveniente introducir correcciones en el potencial aislado para contemplar configuraciones doblemente excitadas, y analizar la influencia del plasma sobre las propiedades atómicas de iones en estas configuraciones.

En tercer lugar, estudiar con el potencial efectivo propuesto las secciones eficaces de los procesos radiativos ligado-libre y libre-libre, y analizar la influencia del plasma sobre dichos procesos. Esto es especialmente importante después de que en recientes reuniones de trabajo (WorkOp IV, experimento propuesto por el laboratorio

LULI) se haya destacado la conveniencia de calcular estos procesos mediante las correspondientes ecuaciones mecanocuánticas y no mediante aproximaciones semiclásicas, como hacen numerosos códigos de cálculo en la actualidad.

En cuarto lugar, estudiar la posibilidad de construir unos números de ocupación a través del potencial efectivo, y en concreto, por medio de consideraciones realizadas sobre el electrón óptico. Se trata de considerar un término perturbativo en el potencial efectivo, asociado al electrón óptico. Si  $U_{ef}^{A0}$  es el potencial efectivo propuesto en esta tesis, y  $\delta U_{eo}$  es la perturbación asociada al electrón óptico, entonces la función de partición se puede escribir como

$$Z = \sum_{\alpha} g_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}} = \sum_{\alpha} g_{\alpha} e^{-\beta(E_{\alpha}^{A0} + \delta E_{eo,\alpha})} = \sum_{\alpha} g_{\alpha} e^{-\beta \delta E_{eo,\alpha}} e^{-\beta E_{\alpha}^{A0}}$$

donde  $E_{\alpha}^{A0}$  es la energía asociada al potencial sin perturbar  $U_{ef}^{A0}$  y  $\delta E_{eo,\alpha}$  es la contribución de la perturbación  $\delta U_{eo}$ . Si la perturbación se elige adecuadamente, el término  $e^{-\beta \delta E_{eo,\alpha}}$  puede ser interpretado como un número de ocupación.

Los puntos de partida que se podrían tener en cuenta serían considerar al electrón óptico dentro del contexto del átomo medio (con número de ocupación fraccionario) o considerar que el electrón óptico está sometido a una perturbación dependiente del tiempo, y por tanto, produce un potencial dependiente del tiempo.

En quinto y último lugar, extender el modelo de potencial propuesto a condiciones extremas de densidad (parámetros de acoplamiento  $\Gamma > 1$ ).

# Apéndice 1

## Determinación del potencial efectivo en la aproximación de electrón óptico asintótico.

En este apéndice realizamos los cálculos conducentes al potencial efectivo en la aproximación de orden cero con electrón óptico asintótico para el caso en el que la función de carga del core en situación aislada venga dada por la expresión general

$$Z_{N-1}^0(r) = Z - N + 1 + \sum_{n=1}^{n^*} N_n P_n^m(r) e^{-a_n r} \quad (\text{A1.1})$$

donde  $Z$  es el número atómico,  $N$  es el número de electrones del ion,  $N_n$  es el número de ocupación de la capa con número cuántico principal  $n$ ,  $n^*$  es el número cuántico principal de la última capa ocupada,  $a_n$  es el parámetro asociado a la capa  $n$ , y por último,  $P_n^m$  es un polinomio de orden  $m$  asociado a la capa  $n$  y viene dado por

$$P_n^m(r) = \sum_{i=0}^m b_{ni} r^i \quad (\text{A1.2})$$

En dicha aproximación la expresión que tenemos que evaluar es

$$Z_{ef}^{AO} = Z_{N-1}^0(r) - Z_e(\infty) + C^{AO} e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} Z_{N-1}^0(s) ds \quad (A1.3)$$

donde

$$C^{AO} = Z_e(\infty) + \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} Z_{N-1}^0(s) ds \quad (A1.4)$$

y como se puede ver, el problema se reduce a evaluar las integrales que aparecen en las dos ecuaciones anteriores con la función de carga dada por la expresión (A1.1). Además la segunda integral se puede ver como un caso particular de la primera haciendo en ésta  $r = 0$ . Tendremos en cuenta que la integral de la ec. (A1.3) se puede expresar como

$$\int_0^\infty e^{-a|s-r|} Z_{N-1}^0(s) ds = e^{-ar} \int_0^r e^{as} Z_{N-1}^0(s) ds + e^{ar} \int_r^\infty e^{-as} Z_{N-1}^0(s) ds \quad (A1.5)$$

con lo que las integrales que tenemos que resolver son de la forma

$$\int_{r_1}^{r_2} e^{\pm as} Z_{N-1}^0(s) ds \quad (A1.6)$$

donde  $r_1$  y  $r_2$  son 0 y  $r$  respectivamente para el signo mas de la exponencial, y  $r$  e  $\infty$  para el signo menos. Introduciendo la expresión (A1.1) en la integral anterior se tiene

$$\begin{aligned} \int_{r_1}^{r_2} e^{\pm as} Z_{N-1}^0(s) ds &= \int_{r_1}^{r_2} \left[ Z - N + I + \sum_{n=1}^{n^*} N_n P_n^m(s) e^{-a_n s} \right] e^{\pm as} ds = \\ &(Z - N - I) \int_{r_1}^{r_2} e^{\pm as} ds + \sum_{n=1}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \int_{r_1}^{r_2} s^i e^{-a_n s} e^{\pm as} ds \end{aligned} \quad (A1.7)$$

donde hemos tenido en cuenta que el polinomio viene dado por la expresión (A1.2). Las integrales de la ecuación anterior vienen dadas por

$$\int_{r_1}^{r_2} e^{\pm as} ds = \frac{e^{\pm as}}{\pm a} \Big|_{r_1}^{r_2} \quad (\text{A1.8})$$

$$\int_{r_1}^{r_2} s^i e^{-a_n s} e^{\pm as} ds = \int_{r_1}^{r_2} s^i e^{-(a_n \mp a)s} ds = \frac{e^{-(a_n \mp a)s}}{(a_n \mp a)} \sum_{j=0}^i \frac{i!}{(a_n \mp a)^j (i-j)!} r^{i-j} \Big|_{r_1}^{r_2} \quad (\text{A1.9})$$

Volviendo ahora a la ecuación (A1.5), se tiene

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty e^{-a|s-r|} Z_{N-1}^0(s) ds = \\ & = e^{-ar} \left[ (Z-N+1) \frac{e^{as}}{a} \Big|_0^r - \sum_{n=1}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \frac{e^{-(a_n-a)s}}{(a_n-a)} \sum_{j=0}^i \frac{i!}{(a_n-a)^j (i-j)!} r^{i-j} \Big|_0^r + \right] \\ & + e^{ar} \left[ (Z-N+1) \frac{e^{-as}}{-a} \Big|_r^\infty - \sum_{n=1}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \frac{e^{-(a_n+a)s}}{(a_n+a)} \sum_{j=0}^i \frac{i!}{(a_n+a)^j (i-j)!} r^{i-j} \Big|_r^\infty \right] = \\ & e^{-ar} \left[ (Z-N+1) \left( \frac{e^{ar}}{a} - \frac{1}{a} \right) - \sum_{n=1}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \left( e^{-(a_n-a)r} \sum_{j=0}^i \frac{i! (r^{i-j} - \delta_{ij})}{(a_n-a)^{j+1} (i-j)!} \right) \right] \\ & + e^{ar} \left[ (Z-N+1) \frac{e^{-ar}}{a} + \sum_{n=1}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} e^{-(a_n+a)r} \sum_{j=0}^i \frac{i!}{(a_n+a)^{j+1} (i-j)!} r^{i-j} \right] = \\ & = \frac{2}{a} (Z-N+1) + \sum_{n=1}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \frac{i!}{(a_n-a)^{i+1}} e^{-ar} - \frac{e^{-ar}}{a} + \\ & + \sum_{n=1}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \left[ \sum_{j=0}^i \frac{i!}{(i-j)!} \left( \frac{1}{(a_n+a)^{j+1}} - \frac{1}{(a_n-a)^{j+1}} \right) r^{i-j} \right] e^{-a_n r} = \\ & = \frac{2}{a} (Z-N+1) + \sum_{n=1}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \frac{i!}{(a_n-a)^{i+1}} e^{-ar} - \frac{e^{-ar}}{a} + \\ & + \sum_{n=1}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \left[ \sum_{j=0}^i \frac{i!}{(i-j)!} \frac{(a_n-a)^{j+1} - (a_n+a)^{j+1}}{(a_n^2 - a^2)^{j+1}} r^{i-j} \right] e^{-a_n r} \end{aligned} \quad (\text{A1.10})$$

y definiendo el siguiente polinomio



$$Q_n^m(r) = \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^i b_{ni} \frac{i!}{(i-j)!} \frac{(a_n - a)^{j+1} - (a_n + a)^{j+1}}{(a_n^2 - a^2)^{j+1}} r^{i-j} \quad (A1.11)$$

podemos expresar finalmente la integral dada por (A1.5) como

$$\int_0^\infty e^{-a|s-r|} Z_{N-l}^0(s) ds = \frac{2}{a} (Z - N + l) + \sum_{n=l}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \frac{i!}{(a_n - a)^{i+1}} e^{-ar} - \frac{e^{-ar}}{a} + \sum_{n=l}^{n^*} N_n Q_n^m(r) e^{-a_n r} \quad (A1.12)$$

y para el caso en el que  $r = 0$  se tiene

$$\int_0^\infty e^{-as} Z_{N-l}^0(s) ds = \frac{2}{a} (Z - N + l) + \sum_{n=l}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \frac{i!}{(a_n - a)^{i+1}} - \frac{1}{a} + \sum_{n=l}^{n^*} N_n Q_n^m(0) \quad (A1.13)$$

Introduciendo el valor de estas integrales en la ec. (A1.3) se obtiene

$$\begin{aligned} Z_{ef}^{A0} &= Z - N + l + \sum_{n=l}^{n^*} N_n P_n^m(r) e^{-a_n r} - Z_e(\infty) + \\ &+ \left[ Z_e(\infty) + \frac{1}{2} a \left( \frac{2}{a} (Z - N + l) + \sum_{n=l}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \frac{i!}{(a_n - a)^{i+1}} - \frac{1}{a} + \sum_{n=l}^{n^*} N_n Q_n^m(0) \right) \right] e^{-ar} - \\ &- \frac{1}{2} a \left( \frac{2}{a} (Z - N + l) + \sum_{n=l}^{n^*} \sum_{i=0}^m N_n b_{ni} \frac{i!}{(a_n - a)^{i+1}} e^{-ar} - \frac{e^{-ar}}{a} + \sum_{n=l}^{n^*} N_n Q_n^m(r) e^{-a_n r} \right) = \\ &= \left[ Z_e(\infty) + (Z - N + l) + \frac{1}{2} a \sum_{n=l}^{n^*} N_n Q_n^m(0) \right] e^{-ar} + \sum_{n=l}^{n^*} N_n \left[ P_n^m(r) - \frac{1}{2} a Q_n^m(r) \right] e^{-a_n r} - Z_e(\infty) \end{aligned} \quad (A1.14)$$

Tomando el límite en el infinito de la función de carga del electrón óptico igual a  $-l$  (ver A3) obtenemos

$$Z_{ef}^{A0}(r) = \left[ Z - N + \frac{1}{2} a \sum_{n=l}^{n^*} N_n Q_n^m(0) \right] e^{-ar} + \sum_{n=l}^{n^*} N_n \left[ P_n^m(r) - \frac{1}{2} a Q_n^m(r) \right] e^{-a_n r} + l \quad (A1.15)$$

## Apéndice 2

### **Determinación del potencial efectivo en la aproximación de electrón óptico hidrogenoide no relativista.**

En este apéndice nos proponemos determinar la función de carga efectiva del electrón óptico en la aproximación hidrogenoide de orden cero, que consiste en construir la función de carga del electrón óptico a partir de las funciones de onda hidrogenoides. También determinaremos la función de carga efectiva en dicha aproximación para una función de carga del core,  $Z_{N-1}^0$ , arbitraria. De esta forma tendremos una idea de cual es la influencia del electrón óptico a distancias cercanas del origen e intermedias. Podemos decir, que aunque puede parecer que el tomar para el electrón óptico de un ion multielectrónico las funciones de onda hidrogenoides carece de sentido, la forma analítica que obtengamos tendrá validez dentro del contexto de los modelos hidrogenoides apantallados para átomos multielectrónicos. Por tanto la expresión que obtengamos para la función de carga del electrón óptico puede ser mejorada

simplemente sustituyendo la carga del ion por una carga efectiva para cada nivel, que es proporcionada por los modelos hidrogenoides apantallados.

Recordemos que la función de carga efectiva viene dada en esta aproximación por (ver (3.67) y (3.68))

$$Z_{ef}^{H0}(r) = Z_{N-1}^0(r) - Z_{eo}(\infty) + C^{H0} e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} (Z_{N-1}^0(s) + \tilde{Z}_{eo}^{H0}(s)) ds \quad (A2.1)$$

donde  $\tilde{Z}_{eo}^{H0}(r) = Z_{eo}^{H0}(r) - Z_{eo}^{H0}(\infty)$  y la constante  $C^{H0}$  está dada por

$$C^{H0} = Z_{eo}(\infty) + \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} (Z_{N-1}^0(s) + \tilde{Z}_{eo}^{H0}(s)) ds \quad (A2.2)$$

En esta aproximación la función de carga del electrón óptico en un nivel monoeléctrico  $nl$ ,  $Z_{ef}^{H0}$ , viene dada por

$$Z_e^{H0}(r) = - \iint \frac{(P_{nl}^{H0}(r))^2}{r} dr + D_1 r + D_2 \quad (A2.3)$$

siendo  $P_{nl}^{H0}$  la función de onda radial hidrogenoide aislada, que en adelante denotaremos por  $P_{nl}$ , y  $D_1$  y  $D_2$  son dos constante arbitrarias que se determinarán a partir de las siguientes condiciones de contorno impuestas sobre la función de carga efectiva del electrón óptico

$$r \rightarrow 0: Z_{eo}^{H0} \rightarrow 0 \quad ; \quad r \rightarrow \infty: Z_{eo}^{H0} \rightarrow -1 \quad (A2.4)$$

La función de onda hidrogenoide puede expresarse como (Schlüter, 1990)

$$P_{nl}(r) = Z^{l/2} e^{-Zr/n} \sum_{k=2l+1}^n a_k(l,n) \left(\frac{Zr}{n}\right)^k \quad (\text{A2.5})$$

donde los coeficientes  $a_k(n,l)$  vienen dados por la siguiente relación de recurrencia

$$a_k = a_{k-1} 2(k-n-1)/[(k+l)(k-l-1)] \quad (\text{A2.6})$$

donde

$$a_{l+1} = \begin{cases} 2n^{-1/2}, & l=0 \\ 2^{l+1} [(n^2-1)\dots(n^2-l^2)/n]^{1/2} / (2l+1)!, & l>0 \end{cases} \quad (\text{A2.7})$$

Con el objeto de evaluar la expresión (A2.1) es conveniente considerar que el integrando de dicha ecuación se puede expresar como

$$\frac{P_{nl}^2(r)}{r} = \frac{Z^2}{n} e^{-2Zr/n} \sum_{k=2l+1}^{2n-1} b_k(l,n) \left(\frac{Zr}{n}\right)^k \quad (\text{A2.8})$$

donde los coeficientes  $b_k(n,l)$  vienen dados por

$$b_k = \sum_{m_a}^{m_b} a_m a_{k+l-m} \quad (\text{A2.9})$$

donde

$$m_a = \max(l+1, k+l-n), \quad m_b = \min(n, k-l) \quad (\text{A2.10})$$

Empezaremos el cálculo de la función de carga efectiva realizando la primera integración de la integral que aparece en la ecuación (A2.1), para lo que tendremos en cuenta la expresión (A2.5).

$$\int \frac{P_{nl}^2}{r} dr = \frac{Z^2}{n} \sum_{k=2l+1}^{2n-1} b_k(l,n) \left(\frac{Z}{n}\right)^k \int e^{-2Zr/n} r^k dr \quad (A2.11)$$

La integral de la expresión anterior está dada por

$$\int e^{-2Zr/n} r^k dr = -\frac{e^{-2Zr/n}}{2Z/n} \sum_{i=0}^k \frac{k!}{(2Z/n)^i (k-i)!} r^{k-i} \quad (A2.12)$$

y definiendo el parámetro  $Z_n = 2Z/n$ , se obtiene

$$\int \frac{P_{nl}^2}{r} dr = -\frac{1}{2} Z e^{-Z_n r} \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \frac{1}{2^k} b_k(l,n) Z_n^k \sum_{i=0}^k \frac{k!}{Z_n^i (k-i)!} r^{k-i} \quad (A2.13)$$

A continuación realizamos la segunda integración, para lo que tendremos en cuenta los resultados anteriores.

$$\begin{aligned} \iint \frac{P_{nl}^2}{r} dr &= -\frac{1}{2} Z \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \frac{1}{2^k} b_k(l,n) Z_n^k \sum_{i=0}^k \frac{k!}{Z_n^i (k-i)!} \int e^{-Z_n r} r^{k-i} = \\ &= \frac{1}{2} Z e^{-Z_n r} \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \frac{1}{2^k} b_k(l,n) Z_n^{k-1} \sum_{i=0}^k \frac{k!}{Z_n^i (k-i)!} \sum_{j=0}^{k-i} \frac{(k-i)!}{Z_n^j (k-i-j)!} r^{k-i-j} = \\ &= Z e^{-Z_n r} \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} C_{k,i,j} r^{k-i-j} \end{aligned} \quad (A2.14)$$

donde los coeficientes  $C_{k,i,j}$  están dados por

$$C_{k,i,j} = \frac{1}{2^k} b_k(n,l) Z_n^{k-i-j-1} \frac{k!}{(k-i-j)!} \quad (A2.15)$$

Entonces la ecuación (A2.3) queda como

$$Z_{eo}^{H0}(r) = -Z e^{-Z_n r} \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} C_{k,i,j} r^{k-i-j} + D_1 r + D_2 \quad (A2.16)$$

Las constantes  $D_1$  y  $D_2$  las determinamos exigiendo que el límite en el infinito de la función de carga efectiva sea  $Z_{eo}(\infty) = -1$ . Esto lleva a las siguientes constantes

$$D_1 = 0 \quad ; \quad D_2 = Z_e(\infty) = -1 \quad (A2.17)$$

quedando la siguiente función de carga efectiva para el electrón óptico en la aproximación hidrogenoide de orden cero no relativista

$$Z_{eo}^{H0}(r) = -Z e^{-Z_n r} \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} C_{k,i,j} r^{k-i-j} + Z_{eo}(\infty) \quad (A2.18)$$

y además,

$$\tilde{Z}_{eo}^{H0}(r) = -Z e^{-Z_n r} \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} C_{k,i,j} r^{k-i-j} \quad (A2.19)$$

Con el objeto de determinar la función de carga efectiva en la aproximación de orden cero con electrón óptico hidrogenoide, evaluaremos las siguientes integrales

$$\int_0^\infty e^{-a|s-r|} \tilde{Z}_{eo}^{H0}(s) ds \quad ; \quad \int_0^\infty e^{-as} \tilde{Z}_{eo}^{H0}(s) ds \quad (A2.20)$$

que aparecen en (3.67) y (3.68) respectivamente. Para la primera integral se tiene

$$\int_0^\infty e^{-a|s-r|} \tilde{Z}_{eo}^{H0}(s) ds = e^{-ar} \int_0^r e^{as} \tilde{Z}_{eo}^{H0}(s) ds + e^{ar} \int_r^\infty e^{-as} \tilde{Z}_{eo}^{H0}(s) ds \quad (A2.21)$$

e introduciendo (A2.9) en la relación anterior obtenemos

$$\int_0^{\infty} e^{-a|s-r|} \tilde{Z}_{eo}^{H0}(s) ds =$$

$$= -Z \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} C_{k,i,j} \left\{ e^{-ar} \int_0^r e^{(a-Z_n)s} s^{k-i-j} ds + e^{ar} \int_r^{\infty} e^{-(a+Z_n)s} s^{k-i-j} ds \right\} \quad (\text{A2.22})$$

Las dos integrales que aparecen en la ecuación anterior tienen por solución

$$\int_0^r e^{-(Z_n-a)s} s^{k-i-j} ds = \frac{e^{-(Z_n-a)s}}{-(Z_n-a)} R_{k,i,j}^-(s) \Big|_0^r = -\frac{1}{(Z_n-a)} \left[ e^{-(Z_n-a)r} R_{k,i,j}^-(r) - R_{k,i,j}^-(0) \right] \quad (\text{A2.23})$$

$$\int_r^{\infty} e^{-(Z_n+a)s} s^{k-i-j} ds = \frac{e^{-(Z_n+a)s}}{-(Z_n+a)} R_{k,i,j}^+(s) \Big|_r^{\infty} = \frac{1}{(Z_n+a)} e^{-(Z_n+a)r} R_{k,i,j}^+(r) \quad (\text{A2.24})$$

donde las funciones  $R_{k,i,j}^+$  y  $R_{k,i,j}^-$  son los siguientes polinomios de orden  $k-i-j$

$$R_{k,i,j}^{\pm}(r) = \sum_{m=0}^{k-i-j} \frac{(k-i-j)!}{(Z_n \pm a)^m (k-i-j-m)!} r^{k-i-j-m} \quad (\text{A2.25})$$

Entonces la ecuación (A2.20) se puede expresar como

$$\int_0^{\infty} e^{-a|s-r|} \tilde{Z}_{eo}^{H0}(s) ds =$$

$$= -Z \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} C_{k,i,j} \left\{ -e^{-ar} \frac{\left[ e^{-(Z_n-a)r} R_{k,i,j}^-(r) - R_{k,i,j}^-(0) \right]}{(Z_n-a)} + e^{ar} \frac{e^{-(Z_n+a)r} R_{k,i,j}^+(r)}{(Z_n+a)} \right\}$$

$$= -Z \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} C_{k,i,j} \left\{ -\frac{\left[ e^{-Z_n r} R_{k,i,j}^-(r) - e^{-ar} R_{k,i,j}^-(0) \right]}{(Z_n-a)} + \frac{e^{-Z_n r} R_{k,i,j}^+(r)}{(Z_n+a)} \right\} \quad (\text{A2.26})$$

Teniendo en cuenta que las exponenciales y los denominadores que aparecen en la ecuación anterior no dependen de los subíndices  $k, i, j$ , la expresión anterior la podemos escribir en la forma

$$\int_0^{\infty} e^{-a|s-r|} \tilde{Z}_{eo}^{H0}(s) ds = -Z \left[ -\frac{[e^{-Z_n r} S_{nl}^-(r) - e^{-ar} S_{nl}^-(0)]}{(Z_n - a)} + \frac{e^{-Z_n r} S_{nl}^+(r)}{(Z_n + a)} \right] \quad (A2.27)$$

donde las funciones  $S_{nl}^+$  y  $S_{nl}^-$  son las siguientes funciones

$$S_{nl}^{\pm}(r) = \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} C_{k,i,j} R_{k,i,j}^{\pm}(r) \quad (A2.28)$$

y teniendo en cuenta las definiciones de los coeficientes  $C_{k,i,j}$  y de los polinomios  $R_{k,i,j}^{\pm}$ , también podemos expresar estas funciones como

$$S_{nl}^{\pm}(r) = \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} \sum_{m=0}^{k-i-j} D_{kijm}^{\pm} r^{k-i-j-m} \quad (A2.29)$$

con

$$D_{kijm}^{\pm} = \frac{1}{2^k} b_k(n,l) Z_n^{k-i-j-1} \frac{k!}{(Z_n \pm a)^m (k-i-j-m)!} \quad (A2.30)$$

Para calcular la segunda integral que aparece en (A2.20), usaremos el resultado obtenido en (A2.24) pero sustituyendo el límite de integración  $r$  por 0, con lo que tenemos

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-as} \tilde{Z}_{eo}^{H0}(s) ds &= -Z \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} C_{k,i,j} \int_0^{\infty} e^{-(Z_n+a)s} s^{k-i-j} ds = \\ &= -Z \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} C_{k,i,j} \frac{e^{-(Z_n+a)s}}{-(Z_n+a)} R_{k,i,j}^+(s) \Big|_0^{\infty} = -Z \sum_{k=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^k \sum_{j=0}^{k-i} C_{k,i,j} \frac{1}{(Z_n+a)} R_{k,i,j}^+(0) = \\ &= -Z \frac{1}{(Z_n+a)} S_{nl}^+(0) \end{aligned} \quad (A2.31)$$

Finalmente podemos expresar (A2.1) como



$$Z_{ef}^{H0}(r) = Z_{N-1}^0(r) - Z_{eo}(\infty) + C^{H0} e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} Z_{N-1}^0(s) ds + \frac{1}{2} aZ \left[ - \frac{[e^{-Z_n r} S_{nl}^-(r) - e^{-ar} S_{nl}^-(0)]}{(Z_n - a)} + \frac{e^{-Z_n r} S_{nl}^+(r)}{(Z_n + a)} \right] \quad (A2.32)$$

donde la constante  $C^{H0}$  viene dada por

$$C^{H0} = Z_{eo}(\infty) + \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-as} Z_{N-1}^0(s) ds - \frac{1}{2} aZ \frac{1}{(Z_n + a)} S_{nl}^+(0) \quad (A2.33)$$

Y teniendo en cuenta la relación entre ambas aproximaciones, vemos que

$$C^{H0} = C^{A0} - \frac{1}{2} aZ \frac{1}{(Z_n + a)} S_{nl}^+(0) \quad (A2.34)$$

y entonces podemos escribir la función de carga efectiva en la aproximación que nos ocupa como

$$Z_{ef}^{H0}(r) = Z_{N-1}^0(r) - Z_{eo}(\infty) + C^{A0} e^{-ar} - \frac{1}{2} a \int_0^\infty e^{-a|s-r|} Z_{N-1}^0(s) ds + \frac{1}{2} aZ \left[ \frac{S_{nl}^-(0)}{Z_n - a} - \frac{S_{nl}^+(0)}{Z_n + a} \right] e^{-ar} + \frac{1}{2} aZ \left[ \frac{S_{nl}^+(r)}{Z_n + a} - \frac{S_{nl}^-(r)}{Z_n - a} \right] e^{-Z_n r} \quad (A2.35)$$

o también como

$$Z_{ef}^{H0}(r) = Z_{ef}^{A0}(r) + \frac{1}{2} aZ \left[ \frac{S_{nl}^-(0)}{Z_n - a} - \frac{S_{nl}^+(0)}{Z_n + a} \right] e^{-ar} + \frac{1}{2} aZ \left[ \frac{S_{nl}^+(r)}{Z_n + a} - \frac{S_{nl}^-(r)}{Z_n - a} \right] e^{-Z_n r} \quad (A2.36)$$

con lo que queda determinada la función de carga efectiva en la aproximación hidrogenoide de orden cero.

## Estudio Perturbativo

El potencial efectivo viene dado por

$$U_{ef}^{H0}(r) = -\frac{Z_{ef}^{H0}(r)}{r} \quad (A2.37)$$

con lo que

$$U_{ef}^{H0}(r) = U_{ef}^{A0}(r) - \frac{1}{2}aZ \left[ \frac{S_{nl}^-(0)}{Z_n - a} - \frac{S_{nl}^+(0)}{Z_n + a} \right] \frac{e^{-ar}}{r} - \frac{1}{2}aZ \left[ \frac{S_{nl}^+(r)}{Z_n + a} - \frac{S_{nl}^-(r)}{Z_n - a} \right] \frac{e^{-Z_n r}}{r} \quad (A2.38)$$

Si consideramos los dos últimos términos de la expresión anterior como una perturbación de primer orden al potencial  $U_{ef}^{A0}(r)$ , la energía de un nivel  $nlj$  se puede expresar como

$$E_{nlj}^{H0} = E_{nlj}^{A0} + \delta E_{nl} \quad (A2.39)$$

donde  $\delta E_{nl}$  viene dada según el primer orden de la teoría de perturbaciones de primer orden por

$$\begin{aligned} \delta E_{nl} &= \langle P_{nl} | -\frac{1}{2}aZ \left[ \frac{S_{nl}^-(0)}{Z_n - a} - \frac{S_{nl}^+(0)}{Z_n + a} \right] \frac{e^{-ar}}{r} - \frac{1}{2}aZ \left[ \frac{S_{nl}^+(r)}{Z_n + a} - \frac{S_{nl}^-(r)}{Z_n - a} \right] \frac{e^{-Z_n r}}{r} | P_{nl} \rangle = \\ &= -\int_0^\infty \frac{P_{nl}^2}{r} \left( \frac{1}{2}aZ \left[ \frac{S_{nl}^-(0)}{Z_n - a} - \frac{S_{nl}^+(0)}{Z_n + a} \right] e^{-ar} + \frac{1}{2}aZ \left[ \frac{S_{nl}^+(r)}{Z_n + a} - \frac{S_{nl}^-(r)}{Z_n - a} \right] e^{-Z_n r} \right) dr \end{aligned} \quad (A2.40)$$

y  $P_{nl}$  son las funciones de onda hidrogenoides dadas por (A2.5). De la relación (A2.7) y la definición del parámetro  $Z_n$ , se tiene que

$$\begin{aligned} \delta E_{nl} = & -\frac{1}{2} a Z^2 \sum_{k=2l+1}^{2n-1} b_k(n,l) Z_n^{k+l} \left\{ \left[ \frac{S_{nl}^-(0)}{Z_n - a} - \frac{S_{nl}^+(0)}{Z_n + a} \right] \int_0^\infty r^k e^{-(Z_n+a)r} dr \right. \\ & \left. + \frac{1}{Z_n + a} \int_0^\infty r^k S_{nl}^+(r) e^{-2Z_n r} dr - \frac{1}{Z_n - a} \int_0^\infty r^k S_{nl}^-(r) e^{-2Z_n r} dr \right\} \end{aligned} \quad (A2.41)$$

y considerando la relación (A2.29), obtenemos

$$\begin{aligned} \delta E_{nl} = & -\frac{1}{2} a Z^2 \sum_{k=2l+1}^{2n-1} b_k(n,l) Z_n^{k+l} \left\{ \left[ \frac{S_{nl}^-(0)}{Z_n - a} - \frac{S_{nl}^+(0)}{Z_n + a} \right] \int_0^\infty r^k e^{-(Z_n+a)r} dr \right. \\ & + \frac{1}{Z_n + a} \sum_{q=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^q \sum_{j=0}^{q-i} \sum_{m=0}^{q-i-j} D_{qijm}^+ \frac{(q-i-j-m)!}{(2Z_n)^{q-i-j-m-1}} \int_0^\infty r^{k+q-i-j-m} e^{-2Z_n r} dr \\ & \left. - \frac{1}{Z_n - a} \sum_{q=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^q \sum_{j=0}^{q-i} \sum_{m=0}^{q-i-j} D_{qijm}^- \frac{(q-i-j-m)!}{(2Z_n)^{q-i-j-m-1}} \int_0^\infty r^{k+q-i-j-m} e^{-2Z_n r} dr \right\} \end{aligned} \quad (A2.42)$$

Las integrales que tenemos que resolver son todas del mismo tipo, y vienen dadas por

$$\int_0^\infty r^B e^{-Ar} dr = \frac{\Gamma(B+1)}{A^{B+1}} = \frac{B!}{A^{B+1}} \quad (A.43)$$

donde se ha considerado que  $B$  es un número natural.

$$\begin{aligned} \delta E_{nl} = & -\frac{1}{2} a Z^2 \sum_{k=2l+1}^{2n-1} b_k(n,l) Z_n^{k+l} \left\{ \left[ \frac{S_{nl}^-(0)}{Z_n - a} - \frac{S_{nl}^+(0)}{Z_n + a} \right] \frac{k!}{(Z_n + a)^{k+l}} \right. \\ & + \frac{1}{Z_n + a} \sum_{q=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^q \sum_{j=0}^{q-i} \sum_{m=0}^{q-i-j} D_{qijm}^+ \frac{(k+q-i-j-m)!}{(2Z_n)^{k+q-i-j-m-1}} \\ & \left. - \frac{1}{Z_n - a} \sum_{q=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^q \sum_{j=0}^{q-i} \sum_{m=0}^{q-i-j} D_{qijm}^- \frac{(k+q-i-j-m)!}{(2Z_n)^{k+q-i-j-m-1}} \right\} \end{aligned} \quad (A2.44)$$

Ahora consideramos la relación (A2.30) y que

$$S_{nl}^{\pm}(0) = \sum_{q=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^q \sum_{j=0}^{q-i} \sum_{m=0}^{q-i-j} D_{qijm}^{\pm} r^{q-i-j-m} = \sum_{q=2l+1}^{2n-1} \sum_{i=0}^q \sum_{j=0}^{q-i} \sum_{m=0}^{q-i-j} \frac{1}{2^q} b_q(n,l) Z_n^{q-i-j-l} \frac{(q-i-j)!}{(Z_n \pm a)^{q-i-j}} \quad (\text{A2.45})$$

obtenemos finalmente

$$\begin{aligned} \delta E_{nl} = & -\frac{1}{2} a Z^2 \sum_{kqijm} \frac{1}{2^q} b_k(n,l) b_q(n,l) Z_n^{k+q-i-j} \times \\ & \left\{ \left( \frac{1}{(Z_n - a)^{q-i-j+1}} - \frac{1}{(Z_n + a)^{q-i-j+1}} \right) \frac{(q-i-j)! k!}{(Z_n + a)^{k+1}} + \right. \\ & \left. \left( \frac{1}{(Z_n + a)^{m+1}} - \frac{1}{(Z_n - a)^{m+1}} \right) \frac{q! (k+q-i-j-m)!}{(2Z_n)^{k+q-i-j-m-1} (q-i-j-m)!} \right\} \quad (\text{A2.46}) \end{aligned}$$

Los desplazamientos que proporciona esta expresión han sido comparados con los desplazamientos obtenidos por Schlüter (1990) para el átomo de hidrógeno mediante procedimiento autoconsistente. El acuerdo es satisfactorio para el estado fundamental y los primeros estados excitados, como cabe esperar de un tratamiento perturbativo de primer orden. Para el resto de estados los desplazamientos de un nivel empiezan a ser comparables con las correspondientes energías y no es aplicable el primer orden de la teoría de perturbaciones.



## Apéndice 3

### Parámetros del potencial analítico de átomo aislado.

Con el objeto de facilitar la utilización del potencial efectivo propuesto en esta Tesis hemos creído conveniente reproducir las tablas de coeficientes a partir de los que se pueden determinar los parámetros  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$  del potencial analítico de átomo aislado utilizado (3.93) como función de  $Z$  de acuerdo con la siguiente expresión

$$a_k = c_{1k}Z^4 + c_{2k}Z^3 + c_{3k}Z^2 + c_{4k}Z + c_{5k} \quad (k = 1,2,3) \quad (\text{A3.1})$$

Estas tablas son una reproducción de las publicadas en:

Martel, P., Rubiano, J.G., Gil, J.M., Doreste, L. & Minguez, E. (1998)  
*Journal. Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **60** No. 4, 623-633.

Los coeficientes  $c_{ik}$  que se listan en dichas tablas corresponden a los iones pertenecientes a las secuencias isoelectronicas comprendidas entre la del helio y la del uranio, y fueron determinados para un rango de  $Z$  dado por  $N + 5 \leq Z \leq 103$ ; fuera de este intervalo los coeficientes deben usarse con cautela.

Table 1. Potential parameters of Eq. (21) for ions from He to U isoelectronic sequences

$N$	$a_k$	$c_{1k}$	$c_{2k}$	$c_{3k}$	$c_{4k}$	$c_{5k}$
2	$a_1$	9.7926557e-07	-3.6067055e-05	3.9548528e-03	2.5436047e-01	-0.3469006e+00
	$a_2$	-3.8732317e-07	-4.9936507e-05	1.3654140e-03	-1.8886141e+00	0.6315708e+00
3	$a_1$	8.8147000e-07	-7.2732000e-05	5.5550000e-03	1.2473000e+00	-0.4002000e+01
	$a_2$	-6.7607000e-07	5.6646000e-05	-4.4070000e-03	-0.5851000e+00	0.1696000e+00
4	$a_1$	2.7468297e-07	-2.2395569e-05	1.6998851e-03	0.5713509e+00	-0.4388313e+00
5	$a_1$	2.3483090e-07	-1.7088392e-05	1.2662128e-03	0.4950926e+00	-0.7008170e+00
6	$a_1$	2.2194795e-07	-1.6136147e-05	1.1594773e-03	0.4519126e+00	-0.8722253e+00
7	$a_1$	1.8822567e-07	-1.6055237e-05	1.2203682e-03	0.4178215e+00	-0.9003878e+00
	$a_2$	-2.0631197e-07	3.6812833e-05	-1.8846622e-03	0.6140578e+00	-2.9879715e+00
8	$a_1$	3.5728442e-07	-4.4664012e-05	2.4373410e-03	-0.2198401e+00	2.0774360e+00
	$a_2$	-1.8549565e-07	3.7508582e-05	-2.1824187e-03	0.6326403e+00	-3.2958854e+00
9	$a_1$	3.2508785e-07	-4.5673653e-05	2.7949664e-03	-0.2603945e+00	2.3258445e+00
	$a_2$	-1.7585557e-07	3.7085713e-05	-2.2365161e-03	0.6399676e+00	-3.5938389e+00
10	$a_1$	3.2809462e-07	-5.0269439e-05	3.2398982e-03	-0.2977566e+00	2.7232764e+00
	$a_2$	-2.3114348e-07	1.2806315e-05	1.2726830e-03	3.7907588e-01	-2.2557841e+00
11	$a_1$	2.4776261e-07	1.7317441e-07	-2.3237709e-03	1.8343686e-02	4.1715011e-01
	$a_2$	-4.0885949e-08	7.8916947e-06	-2.1568860e-04	3.2870015e-01	-1.8126021e+00
12	$a_1$	-7.7668059e-09	1.9997341e-06	-1.9716859e-04	8.6427630e-03	8.4001284e-01
	$a_3$	-4.5221765e-08	9.9441085e-06	-5.0905435e-04	3.0166834e-01	-1.8577726e+00
13	$a_1$	-1.5203510e-08	3.8516220e-06	-3.6412591e-04	1.5170887e-02	7.2689863e-01
	$a_3$	-3.3384361e-08	8.4348671e-06	-5.0131160e-04	2.7600552e-01	-1.8367160e00
14	$a_1$	-1.3073620e-08	3.4618910e-06	-3.4373394e-04	1.5126343e-02	6.9995817e-01
	$a_3$	4.0325347e-07	-1.0593548e-04	1.0182316e-02	-1.6906948e-01	4.2119193e+00
15	$a_1$	-1.5628316e-08	4.1368682e-06	-4.0934151e-04	1.7918828e-02	6.4576937e-01
	$a_3$	-3.6218431e-08	8.3328427e-06	-5.9880023e-04	2.4646476e-01	-1.8628768e+00
16	$a_1$	-9.3564985e-09	2.5882753e-06	-2.7392363e-04	1.3032323e-02	6.9902286e-01
	$a_3$	-4.1292139e-08	8.9156573e-06	-6.3900450e-04	2.3595588e-01	-1.8548847e+00
17	$a_1$	-9.8139449e-09	2.7015082e-06	-2.8646728e-04	1.3622649e-02	6.8449251e-01
	$a_3$	-3.7855887e-08	7.9483433e-06	-5.7973088e-04	2.2615530e-01	-1.8589099e+00
18	$a_1$	-1.0104839e-08	2.8015322e-06	-2.9714948e-04	1.4172348e-02	2.7241616e-01
	$a_3$	-3.3313708e-08	7.7397091e-06	-6.5087540e-04	2.0773243e-01	-1.7744978e+00
19	$a_1$	-1.2823379e-08	3.5526092e-06	-3.7332502e-04	1.7612169e-02	5.9319839e-01
	$a_3$	-2.8915638e-08	7.2842291e-06	-6.7719489e-04	1.9314008e-01	-1.7213426e+00
20	$a_1$	-1.5713356e-08	4.3556369e-06	-4.5533846e-04	2.1326582e-02	5.1338202e-01
	$a_3$	-3.6350681e-08	8.7971010e-06	-7.8193700e-04	1.9835207e-01	-1.9159150e+00
21	$a_1$	-1.0255630e-08	2.9543485e-06	-3.2682431e-04	1.6417288e-02	5.8547888e-01
	$a_3$	-3.3754327e-08	8.0582451e-06	-7.0753134e-04	1.9776530e-01	-2.0437765e+00
22	$a_1$	-1.1331579e-08	3.2675465e-06	-3.6083493e-04	1.8066435e-02	5.6285456e-01
	$a_3$	-3.3702487e-08	8.339049e-06	-7.0363638e-04	2.0014041e+01	-2.2146498e+00
23	$a_1$	-1.2969160e-08	3.7317446e-06	-4.0958116e-04	2.0332314e-02	5.3060850e-01
	$a_3$	-3.9457696e-08	9.5666058e-06	-8.4748031e-04	2.0843059e-01	-2.4686686e+00
24	$a_1$	-1.4812217e-08	4.2549408e-06	-4.6445925e-04	2.2871865e-02	4.9365259e-01
	$a_3$	-4.9564908e-08	1.1920019e-05	-1.0530990e-03	2.1877853e-01	-2.7511520e+00
25	$a_1$	-1.7308634e-08	4.9506378e-06	-5.3619075e-04	2.6132529e-02	4.4491668e-01
	$a_3$	-5.6413354e-08	1.3738993e-05	-1.2349075e-03	2.2919358e-01	-3.0500687e+00
26	$a_1$	-2.0442243e-08	5.8313304e-06	-6.2744188e-04	3.0280236e-02	3.8126200e-01
	$a_3$	-7.2270695e-08	1.7989981e-05	-1.6527024e-03	2.4932980e-01	-3.4932796e+00
27	$a_1$	-2.5370034e-08	7.1963253e-06	-7.6624266e-04	3.6434244e-02	2.8670060e-01
	$a_3$	-9.1839600e-08	2.3248654e-05	-2.1721666e-03	2.7410081e-01	-4.0181004e+00
28	$a_1$	-3.2603288e-08	9.1915234e-06	-9.6805248e-04	4.5315669e-02	1.4883312e-01
	$a_3$	-1.3654519e-07	3.5132462e-05	-3.3270059e-03	3.2505078e-01	-4.9357571e+00
29	$a_1$	-4.6771782e-08	1.3062693e-05	-1.3547099e-03	6.2035320e-02	-1.0966848e-01
	$a_3$	-7.5410123e-08	1.8856574e-05	-1.7525451e-03	2.6219163e-01	-4.1393746e+00
30	$a_1$	-2.0666014e-08	6.0681209e-06	-6.7461355e-04	3.3759000e-02	3.1693456e-01
	$a_3$	-8.4036663e-08	2.2352668e-05	-2.2037134e-03	2.7635587e-01	-4.5092375e+00
31	$a_1$	-2.9898555e-08	8.7263913e-06	-9.5727299e-04	4.7002235e-02	7.5271849e-02
	$a_3$					

continued

Table 1—continued

<i>N</i>	<i>a<sub>k</sub></i>	<i>c<sub>1k</sub></i>	<i>c<sub>2k</sub></i>	<i>c<sub>3k</sub></i>	<i>c<sub>4k</sub></i>	<i>c<sub>5k</sub></i>
32	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.0733312e-07	2.9282437e-05	-2.9445514e-03	3.0230792e-01	-5.0354123e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-4.2711518e-08	1.2369012e-05	-1.3392455e-03	6.4600236e-02	-2.3552529e-01
33	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.3820653e-07	3.8067693e-05	-3.8741888e-03	3.3737485e-01	-5.6948753e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-5.8539281e-08	1.6858406e-05	-1.8084998e-03	8.6078427e-02	-6.0849685e-01
34	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.6842206e-07	4.6825850e-05	-4.8157771e-03	3.7457420e-01	-6.3926094e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-7.8545484e-08	2.2518902e-05	-2.3979130e-03	1.1288707e-01	-1.0665332e+00
35	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.2225139e-07	3.4428420e-05	-3.6158660e-03	3.1910963e-01	-5.6172854e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-5.0956693e-08	1.5046662e-05	-1.6633133e-03	8.2054316e-02	-6.1183884e-01
36	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.3314519e-07	3.7777299e-05	-4.0019663e-03	3.3330496e-01	-5.9369494e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-6.0387627e-08	1.7792272e-05	-1.9591942e-03	9.6091941e-02	-8.6593760e-01
37	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.5604270e-07	4.4916518e-05	-4.8153370e-03	3.6426881e-01	-6.5590991e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-8.9965714e-08	2.6353242e-05	-2.8748192e-03	1.3911021e-01	-1.6331387e+00
38	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.2938175e-07	3.8060242e-05	-4.1824540e-03	3.3198325e-01	-6.1504603e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-7.8785772e-08	2.3545555e-05	-2.6306527e-03	1.3099845e-01	-1.5798758e+00
39	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.7747107e-06	6.2467403e-04	-8.2648209e-02	4.9749623e+00	-1.1224831e+02
	<i>a<sub>3</sub></i>	-7.7605701e-07	2.7146784e-04	-3.5661110e-02	2.0875874e+00	-4.5143719e+01
40	<i>a<sub>1</sub></i>	-9.5250748e-08	2.8682778e-05	-3.2558138e-03	2.8907961e-01	-5.6694672e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-4.9066825e-08	1.5260666e-05	-1.7902631e-03	9.4592451e-02	-1.0252000e+00
41	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.1090758e-07	3.3482390e-05	-3.8049398e-03	3.1504698e-01	-6.2310299e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-5.7545736e-08	1.7843221e-05	-2.0833718e-03	1.0934318e-01	-1.3058375e+00
42	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.2760697e-07	3.8782349e-05	-4.4276785e-03	3.4555396e-01	-6.8826568e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-6.8151989e-08	2.1061232e-05	-2.4465607e-03	1.2747097e-01	-1.6460466e+00
43	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.6537158e-07	4.9833185e-05	-5.6322114e-03	4.0194613e-01	-7.9534171e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-8.1867057e-08	2.5174725e-05	-2.9049722e-03	1.5001910e-01	-2.0614550e+00
44	<i>a<sub>1</sub></i>	-2.0711384e-07	6.2473188e-05	-7.0544301e-03	4.7094839e-01	-9.2783975e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-1.0116058e-07	3.0954168e-05	-3.5471395e-03	1.8142706e-01	-2.6338850e+00
45	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.3953263e-07	4.2950056e-05	-4.9853312e-03	3.7459158e-01	-7.7162767e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-6.4282933e-08	2.0250445e-05	-2.4040030e-03	1.2832958e-01	-1.7323072e+00
46	<i>a<sub>1</sub></i>	-1.8106647e-07	5.5617836e-05	-6.4209732e-03	4.4514391e-01	-9.0800224e+00
	<i>a<sub>3</sub></i>	-7.8023891e-08	2.4431738e-05	-2.8769289e-03	1.5193403e-01	-2.1721869e+00
47	<i>a<sub>1</sub></i>	-2.2583118e-07	6.9423846e-05	-8.0079644e-03	5.2465872e-01	-1.0634268e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-9.4854587e-08	2.9564925e-05	-3.4587928e-03	1.8101803e-01	-2.7138892e+00
48	<i>a<sub>1</sub></i>	-2.0499611e-07	6.3557921e-05	-7.4097298e-03	4.9788140e-01	-1.0276127e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-7.7409041e-08	2.4487564e-05	-2.9154780e-03	1.5577812e-01	-2.2863255e+00
49	<i>a<sub>1</sub></i>	-2.9455796e-07	9.1402127e-05	-1.0621526e-02	6.5743475e-01	-1.3325789e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-1.2462683e-07	3.9005176e-05	-4.5747520e-03	2.3948473e-01	-3.8691430e+00
50	<i>a<sub>1</sub></i>	-2.0774324e-07	6.5999117e-05	-7.8729792e-03	5.2526383e-01	-1.1079624e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-8.4442430e-08	2.7195145e-05	-3.2984839e-03	1.7961312e-01	-2.8533187e+00
51	<i>a<sub>1</sub></i>	-2.5067573e-07	7.9821836e-05	-9.5423696e-03	6.1059291e-01	-1.2804660e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-1.1196895e-07	3.5887242e-05	-4.3226901e-03	2.3308792e-01	-3.9062305e+00
52	<i>a<sub>1</sub></i>	-3.2914569e-07	1.0437358e-04	-1.2412155e-02	7.5614517e-01	-1.5642654e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-1.5569993e-07	4.9579946e-05	-5.9205013e-03	3.1553888e-01	-5.5023609e+00
53	<i>a<sub>1</sub></i>	-2.5917418e-07	8.3547681e-05	-1.0129440e-02	6.4451172e-01	-1.3709985e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-1.2013223e-07	3.8947047e-05	-4.7489904e-03	2.5937442e-01	-4.5247861e+00
54	<i>a<sub>1</sub></i>	-3.2644118e-07	1.0498397e-04	-1.2679137e-02	7.7617722e-01	-1.6316701e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-1.5229405e-07	4.9161643e-05	-5.9596022e-03	3.2291450e-01	-5.7780764e+00
55	<i>a<sub>1</sub></i>	-2.3657874e-07	7.8071948e-05	-9.7062378e-03	6.2950978e-01	-1.3758444e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-1.2254459e-07	4.0492826e-05	-5.0392558e-03	2.8127479e-01	-5.1281909e+00
56	<i>a<sub>1</sub></i>	-3.2804558e-07	1.0758264e-04	-1.3264637e-02	8.1652278e-01	-1.7530888e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-1.8845906e-07	6.1779531e-05	-7.6090036e-03	4.1891918e-01	-7.9032354e+00
57	<i>a<sub>1</sub></i>	-4.7637164e-07	1.5557164e-04	-1.9065737e-02	1.1282372e+00	-2.3867843e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-2.7305805e-07	8.8954700e-05	-1.0867608e-02	5.9190478e-01	-1.1333785e+01
58	<i>a<sub>1</sub></i>	-4.1514644e-07	1.3804597e-04	-1.7250082e-02	1.0498141e+00	-2.2780734e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-2.2017805e-07	7.3020560e-05	-9.0969571e-03	5.0624034e-01	-9.8179885e+00
59	<i>a<sub>1</sub></i>	-6.0937944e-07	2.0144034e-04	-2.4986714e-02	1.4694563e+00	-3.1374745e+01
	<i>a<sub>3</sub></i>	-3.2361837e-07	1.0667949e-04	-1.3187997e-02	7.2648297e-01	-1.4249815e+01

continued



Apéndice 3. Parámetros del potencial analítico de átomo aislado.

628

P. Martel et al

Table 1—continued

$N$	$a_k$	$c_{1k}$	$c_{2k}$	$c_{3k}$	$c_{4k}$	$c_{5k}$
60	$a_1$	-4.2926688e-07	1.4536056e-04	-1.8520395e-02	1.1439231e+00	-2.5415088e+01
	$a_3$	-2.0016749e-07	6.7727980e-05	-8.6221964e-03	4.9111765e-01	-9.7524521e+00
61	$a_1$	-5.6613604e-07	1.9142923e-04	-2.4330980e-02	1.4706384e+00	-3.2383037e+01
	$a_3$	-2.7597173e-07	9.2947219e-05	-1.1762040e-02	6.6462140e-01	-1.3343730e+01
62	$a_1$	-8.4543561e-07	2.8412078e-04	-3.5840970e-02	2.1057473e+00	-4.5585483e+01
	$a_3$	-4.2139917e-07	1.4098551e-04	-1.7694617e-02	9.8938972e-01	-1.9994688e+01
63	$a_1$	-7.5362017e-07	2.5674012e-04	-3.2866539e-02	1.9689659e+00	-4.3461680e+01
	$a_3$	-3.5066166e-07	1.1892092e-04	-1.5148047e-02	8.6091899e-01	-1.7613830e+01
64	$a_1$	-1.0881565e-06	3.6879290e-04	-4.6925207e-02	2.7533921e+00	-5.9952012e+01
	$a_3$	-5.2821804e-07	1.7817047e-04	-2.2544431e-02	1.2704485e+00	-2.6101775e+01
65	$a_1$	-7.3650309e-07	2.5582656e-04	-3.3438968e-02	2.0463508e+00	-4.6309786e+01
	$a_3$	-3.2069084e-07	1.1086428e-04	-1.4414669e-02	8.3738572e-01	-1.7525594e+01
66	$a_1$	-1.0784864e-06	3.7200396e-04	-4.8234901e-02	2.8850667e+00	-6.4235981e+01
	$a_3$	-4.6876598e-07	1.6115864e-04	-2.0313400e-02	1.1989599e+00	-2.5184937e+01
67	$a_1$	-1.5409064e-06	5.3007643e-04	-6.8484886e-02	4.0387515e+00	-8.8972977e+01
	$a_3$	-7.2964319e-07	2.4953648e-04	-3.2022121e-02	1.8299086e+00	-3.8488990e+01
68	$a_1$	-1.4285286e-06	4.9706898e-04	-6.5007250e-02	3.8882467e+00	-8.6944737e+01
	$a_3$	-6.2594642e-07	2.1670647e-04	-2.8174655e-02	1.6327569e+00	-3.4779217e+01
69	$a_1$	-2.1023722e-06	7.2880512e-04	-9.4873781e-02	5.5996060e+00	-1.2381124e+02
	$a_3$	-9.9647928e-07	3.4322587e-04	-4.4351318e-02	2.5509122e+00	-5.4302569e+01
70	$a_1$	-1.7747107e-06	6.2467403e-04	-8.2648209e-02	4.9749623e+00	-1.1224831e+02
	$a_3$	-7.7605701e-07	2.7146784e-04	-3.5661110e-02	2.0875874e+00	-4.5143719e+01
71	$a_1$	-2.7950326e-06	9.7646680e-04	-1.2812051e-01	7.5836790e+00	-1.6843059e+02
	$a_3$	-1.3155166e-06	4.5734760e-04	-5.9651053e-02	3.4623685e+00	-7.4672829e+01
72	$a_1$	-3.2543547e-06	1.1398748e-03	-1.4990002e-01	8.8741944e+00	-1.9720903e+02
	$a_3$	-1.5531012e-06	5.4149004e-04	-7.0824028e-02	4.1218739e+00	-8.9284276e+01
73	$a_1$	-3.5637655e-06	1.2544174e-03	-1.6578625e-01	9.8517532e+00	-2.1983634e+02
	$a_3$	-1.7108680e-06	5.9953064e-04	-7.8821621e-02	4.6112756e+00	-1.0051555e+02
74	$a_1$	-3.7621577e-06	1.3313109e-03	-1.7691597e-01	1.0564323e+01	-2.3697364e+02
	$a_3$	-1.8062581e-06	6.3649340e-04	-8.4162973e-02	4.9528270e+00	-1.0868244e+02
75	$a_1$	-4.1172822e-06	1.4630394e-03	-1.9524166e-01	1.1696796e+01	-2.6330407e+02
	$a_3$	-1.9543240e-06	6.9191758e-04	-9.1933005e-02	5.4365646e+00	-1.1997621e+02
76	$a_1$	-4.3376564e-06	1.5513468e-03	-2.0837271e-01	1.2556451e+01	-2.8433919e+02
	$a_3$	-2.0954129e-06	7.4568936e-04	-9.9594302e-02	5.9205307e+00	-1.3142434e+02
77	$a_1$	-4.5025941e-06	1.6208007e-03	-2.1914316e-01	1.3287717e+01	-3.0282797e+02
	$a_3$	-2.2011259e-06	7.8778043e-04	-1.0582892e-01	6.3283580e+00	-1.4138163e+02
78	$a_1$	-5.1131369e-06	1.8461987e-03	-2.5036301e-01	1.5210195e+01	-3.4732766e+02
	$a_3$	-2.3563016e-06	8.4730169e-04	-1.1437058e-01	6.8721820e+00	-1.5435272e+02
79	$a_1$	-4.8010031e-06	1.7484190e-03	-2.3922663e-01	1.4671111e+01	-3.3830861e+02
	$a_3$	-2.2905089e-06	8.2960168e-04	-1.1281444e-01	6.8305075e+00	-1.5462459e+02
80	$a_1$	-6.9458714e-06	2.5247830e-03	-3.4461457e-01	2.1029717e+01	-4.8227822e+02
	$a_3$	-2.9093010e-06	1.0553293e-03	-1.4369440e-01	8.7083793e+00	-1.9746628e+02
81	$a_1$	-6.8533782e-06	2.5090085e-03	-3.4499892e-01	2.1212262e+01	-4.9030330e+02
	$a_3$	-3.3495105e-06	1.2218499e-03	-1.6731445e-01	1.0197749e+01	-2.3270956e+02
82	$a_1$	-7.5806047e-06	2.7996223e-03	-3.8824439e-01	2.4054708e+01	-5.6011977e+02
	$a_3$	-3.7286276e-06	1.3732113e-03	-1.8982029e-01	1.1676788e+01	-2.6900535e+02
83	$a_1$	-7.8787840e-06	2.9370822e-03	-4.1108993e-01	2.5695968e+01	-6.0356855e+02
	$a_3$	-3.9083472e-06	1.4543177e-03	-2.0310469e-01	1.2621920e+01	-2.9381134e+02
84	$a_1$	-6.7908697e-06	2.5652048e-03	-3.6387264e-01	2.3061498e+01	-5.4933850e+02
	$a_3$	-3.5806727e-06	1.3487407e-03	-1.9068840e-01	1.1998031e+01	-2.8277915e+02
85	$a_1$	-5.7140404e-06	2.1855444e-03	-3.1398049e-01	2.0167516e+01	-4.8701157e+02
	$a_3$	-3.1299284e-06	1.1935268e-03	-1.7085402e-01	1.0886454e+01	-2.5983120e+02
86	$a_1$	-4.7199378e-06	1.8309463e-03	-2.6681342e-01	1.7396447e+01	-4.2651048e+02
	$a_3$	-2.7347695e-06	1.0555434e-03	-1.5295954e-01	9.8675760e+00	-2.3842735e+02
87	$a_1$	-5.7621375e-06	2.2508812e-03	-3.3019235e-01	2.1642539e+01	-5.3320933e+02
	$a_3$	-3.6846566e-06	1.4328175e-03	-2.0912314e-01	1.3582449e+01	-3.3057693e+02

continued

Charge distribution for ions

629

Table 1—continued

$N$	$a_k$	$c_{1k}$	$c_{2k}$	$c_{3k}$	$c_{4k}$	$c_{5k}$
88	$a_1$	-5.8814257e-06	2.3196606e-03	-3.4356150e-01	2.2729593e+01	-5.6522680e+02
	$a_3$	-4.1964656e-06	1.6473474e-03	-2.4269592e-01	1.5909154e+01	-3.9088149e+02
89	$a_1$	-7.0253029e-06	2.7921937e-03	-4.1663587e-01	2.7745048e+01	-6.9424391e+02
	$a_3$	-4.3005426e-06	1.7044466e-03	-2.5351037e-01	1.6775814e+01	-4.1609826e+02
90	$a_1$	1.2167002e-06	-3.7563056e-04	3.9333636e-02	-1.3822335e+00	2.3432742e+00
	$a_3$	6.0391222e-07	-1.8363430e-04	1.8743230e-02	-6.5053713e-01	1.6319769e+00
91	$a_1$	1.3469444e-06	-4.1704462e-04	4.3742710e-02	-1.5414703e+00	2.4981432e+00
	$a_3$	6.6140697e-07	-2.0185567e-04	2.0673938e-02	-7.1959677e-01	1.6991240e+00
92	$a_1$	1.5663172e-06	-4.8520084e-04	5.0838261e-02	-1.7919462e+00	2.7415916e+00
	$a_3$	7.4813325e-07	-2.2892481e-04	2.3501216e-02	-8.1936845e-01	1.7960954e+00



## Apéndice 4

### Aproximación analítica de la función $\eta(r)$ .

En este apéndice obtenemos una aproximación de la integral  $\eta(r)$ , que aparece en el potencial efectivo dado en (3.112), y está definida por

$$\eta(r) = \int_0^{\infty} e^{-a|s-r|} e^{-a_1 s^{a_3}} ds \quad (\text{A4.1})$$

la cual se puede escribir también como

$$\eta(r) = e^{-ar} \int_0^r e^{as-a_1 s^{a_3}} ds + e^{ar} \int_r^{\infty} e^{-as-a_1 s^{a_3}} ds \quad (\text{A4.2})$$

En la primera integral de la ecuación anterior hacemos el siguiente cambio de variable

$$t = a_1 s^{a_3} - as \quad (\text{A4.3})$$

y encontramos además, que  $s$  puede ser aproximada por

$$s \approx \frac{t^{p_1}}{(a_1 - a)^{p_1}} \quad (\text{A4.4})$$

siendo  $p_1$  una constante dada por

$$p_1 = \frac{a_1 - a}{a_1 a_3 - a} \quad (\text{A4.5})$$

Esto permite escribir la primera integral de (A4.2) como

$$\int_0^r e^{as - a_1 s^{a_3}} ds = \frac{p_1}{(a_1 - a)} \gamma(p_1, a_1 r^{a_3} - ar) \quad (\text{A4.6})$$

donde  $\gamma(c, x)$  es la función gamma incompleta dada por

$$\gamma(c, x) = \int_0^x s^{c-1} e^{-s} ds \quad (\text{A4.7})$$

De manera similar podemos tratar la segunda integral de (A4.2), obteniendo

$$\int_r^\infty e^{as - a_1 s^{a_3}} ds = \frac{p_1}{(a_1 - a)} \Gamma(p_1, a_1 r^{a_3} + ar) \quad (\text{A4.8})$$

siendo la función gamma incompleta dada por

$$\Gamma(c, x) = \int_x^\infty s^{c-1} e^{-s} ds \quad (\text{A4.9})$$

En este caso el cambio de variable realizado es

$$t = a_1 s^{a_3} + as \quad (\text{A4.10})$$

la variable  $s$  se puede aproximar como

$$s \approx \frac{t^{p_2}}{(a_1 + a)^{p_2}} \quad (\text{A4.11})$$

y la constante  $p_2$  viene dada por

$$p_2 = \frac{a_1 + a}{a_1 a_3 + a} \quad (\text{A4.12})$$

El resto del presente apéndice lo dedicaremos a discutir las aproximaciones asumidas para la variable  $s$ . Si consideramos nuevamente el cambio de variable  $a_1 s^{a_3} + as = t$  y el parámetro  $a_3$  es cercano a la unidad entonces,  $s$  es cercano a  $1/(a_1 + a)$  y a  $(1/a_1 + a)^{1/a_3}$ , por lo que proponemos para  $s$  la solución

$$s = \left( \frac{t}{a_1 + a} \right)^p \quad (\text{A4.13})$$

siendo  $p$  un parámetro a determinar que depende de  $a$ ,  $a_1$  y  $a_3$ . Introduciendo (A4.10) en la ecuación anterior y despejando el parámetro  $p$  se obtiene

$$p = \frac{\ln s}{\ln \left( \frac{as^{a_3} + as}{a_1 + a} \right)} \quad (\text{A4.14})$$

Aplicando la regla de H'Lopital cuando  $s$  tiende a 0 y  $\infty$ , se obtiene

$$p = \frac{a_1 + as^{1-a_3}}{a_1 a_3 + as^{1-a_3}} \quad (\text{A4.15})$$

siendo  $p = 1/a_3, 1$  para  $s = 0, \infty$  respectivamente. Haciendo un test numérico directo, se obtiene que el mejor resultado se encuentra para  $s = 1$  con lo que  $s = t^{p_2} / (a_1 + a)^{p_2}$ . La solución  $s = t^{p_1} / (a_1 + a)^{p_1}$  es obtenida realizando el cambio del  $a$  por  $-a$ .



## **Bibliografía.**

---

- ABRAMOWITZ, M. & STEGUN, A.I. (1972). *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications. New York
- ALYAMOVSKII, V.N. (1962). *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **42**. 1536.
- AYMAR, M., CRANCE, M. & KLAPISCH, M. (1970). *J. Phys.* **31**. 141.
- BALESCU, R. (1974). *Equilibrium and non equilibrium statistical mechanics*.
- BARCZA, S. (1979). *Astron. Astrophys.* **72**. 26.
- BAUS, M. & HANSEN, J.P. (1980). *Physics Reports.* **59**. 1.
- BRASDEN, B.H. & JOACHAIN, C.J. (1983). *Physics of Atoms and Molecules*. Longman Scientific and Technical. USA.
- BUSQUET, M. (1990). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **43**. 91.
- CAUBLE, R., BLAHA, M. & DAVIS, J.  
(1984). *Phys. Rev. A.* **29**. 3280.
- CLAAS, W.J. (1951). *Rech. Astr. Obs. Utrecht.* **12**. 1.
- COHEN, R.S., SPITZER, L. & ROUTLY, P.M. (1950). *Phys. Rev.* **80**. 230.
- CONDON, E.U. & SHORTLEY, F. (1957). *Theory the Atomic Spectra*. Cambridge University Press. Londres.
- COWAN, R.D. & ASKHIN, J. (1957). *Phys. Rev.* **105**. 144.
- COWAN, R.D. (1981). *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. University of California Press. Berkeley.
- COWLING, T.G. (1945). *Proc. R. Soc. London. A* **183**. 453.
- DÄPPEN, W. (1980). *Astr. Ap.* **91**. 212.



- DÄPPEN, W., ANDERSON, L. & MIHALAS, D. (1987). *The Astrophysical Journal*. **319**. 195.
- DARMA-WARDAMA, M.W.C. & TAYLOR, R.J. (1981). *J. Phys. C*. **14**. 629.
- DE JAGER, C. & NEVEN, L. 1960. *Bull. Astr. Inst. Netherlands*. **15**. 55.
- DEBYE, P. & HÜCKEL, E. (1923). *Physik. Zeitschr.* **9**. 185.
- DHARMA-WARDAMA, M.W.C. (1982). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. **27**. 315-328.
- DUTT, R., CHOWDHURY, K. & VARSHNI, Y.P. (1985). *J. Phys. A*. **18**. 1379.
- ECKER, G. & WEIZEL, W. (1956). *Ann. Phys.* **17**. 126.
- FEYMAN, R.P., METROPOLIS, N. & TELLER, E. (1949). *Phys. Rev.* **75**. 1561.
- FISCHEL, D. & SPARKS, W.M. (1971). *Ap. J.* **164**. 359.
- FONTAINE, G., GRABOSKE, H.C. & VAN HORN, H.M. (1977). *Ap. J. Suppl.* **35**. 293.
- GALINDO, A. Y PASCUAL, P. (1978). *Mecánica Cuántica*. Alhambra. Madrid.
- GERRY, C.C. & LAUB, J. (1984). *Phys. Rev. A*. **30**. 1229.
- GRABOSKE, H.C., HARWOOD, D.J. & ROGERS, F.J. (1969). *Phys. Rev.* **186**. 210.
- GRABOSKE, H.C., HARWOOD, D.J. & DEWITT, H.E. (1971). *Phys. Rev. A*. **3**. 1419.
- GRANT, M. & LAI, C.S. (1979). *Phys. Rev. A*. **20**. 718.
- GREEN, A.E.S., SELLIN, D.L. & ZACHOR, A.S. (1969). *Phys. Rev.* **184**. 1.
- GREEN, A.E.S. (1982). *Phys. Rev. A*. **26**. 1759.
- GUNNARSSON, O. & LUNDQVIST, B. (1976). *Phys. Rev. B*. **13**. 4274.
- GUPTA, U. & RAJAGOPAL, A.K. (1980). *Phys. Rep.* **87**. 259.
- HANSEN, J.P. (1973). *Phys. Rev. A*. **8**. 3096.
- HARRIS, G.M., ROBERTS, J.E. & TRULIO, J.G. (1960). *Phys. Rev.* **119**. 1832.
- HARRIS, G.M. (1962). *Phys. Rev.* **125**. 1131.
- HARRIS, G.M. (1964). *Phys. Rev. A*. **133**. 427.
- HOCKNEY, R.W. & EASTWOOD, J.W. (1981). *Computer Simulation Using particles*. MacGraw-Hill. New York.
- HULTHÉN, L. & LAURIKAINEN, K.V. (1951). *Rev. Mod. Phys.* **23**. 1.

- IAFRATE, G.J. & MENDELSON, L.B. (1969). *Phys. Rev.* **182**. 244.
- JACKSON, J.L. & KLEIN, L.S. (1969). *Phys. Rev.* **177**. 352.
- JACKSON, J.L. & KLEIN, L.S. (1969). *Phys. Rev.* **177**. 352.
- KESARWANI, R.N. & VARSHNI, Y.P. (1978). *J. Math. Phys.* **19**. 819.
- KLAPISCH, M. (1967). *C.R. Acad. Sci. Paris.* **265**. 914.
- KLAPISCH, M. (1971). *Comput. Phys. Commun.* **2**. 239.
- KURDIN, L.P. & TARASOV, YU. A. (1962). *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **43**. 1504.
- LANDAU, L.D. & LIFSHITZ, E.M. (1975). *Teoría Cuántica Relativista. Parte I*. Reverté. Barcelona.
- LIBERMAM, D.A. & ALBRITON, J.R. (1995). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **53**. 729.
- LIBERMAN, D.A. (1979). *Phys. Rev. B.* **20**. 4981.
- LIBERMAN, D.A., WABER, J.T. & CROMER, D.T. (1965). *Phys. Rev. A.* **137**. 27.
- LIBERMAN, D.A., CROMER, D.T. & WABER, J.T. (1971). *Comp. Phys. Commun.* **2**. 107.
- LOVELACE, C. & MASSON, D. (1962). *Nuovo Cimento.* **26**. 472.
- MARGENAU, H. & LEWIS, M. (1959). *Rev. Mod. Phys.* **31**. 569.
- MARTEL, P., DORESTE, L., MÍNGUEZ, E. & GIL, J.M. (1995). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **54**. 621.
- MASSACRIER, G. (1994). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **51**. 221.
- MESSIAH, ALBERT (1975). *Mecánica Cuántica*. Tomo II. Tecnos. Madrid.
- MEYER-TER-VEHN, J. & ZITTEL, W. (1988). *Phys. Rev. B.* **37**. 8674.
- MORE, R.M. (1979). *Phys. Rev. A.* **19**. 1234.
- MORE, R.M. (1981). *Atomic Physics in Inertial Confinement Fusion*. Preprint: UCRL-84991 (Part I and II). Lawrence Livermore National Laboratory.
- MORE, R.M. (1982). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **27**. 345.
- MORE, R.M. (1984). *Pressure Ionization, Resonances, and the Continuity of Bound and Free States*. Preprint: UCRL-91452. Lawrence Livermore National Laboratory.
- MORE, R.M. (1986). *Atoms in dense plasmas*. Preprint: UCRL-93926. Lawrence Livermore National Laboratory.
- MURILLO, M.S. & WEISHEIT, J.C. (1995). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **54**. 271.

- NAUENBERG, M. (1972). *Phys. Rev. A*. **8**. 2217.
- NGYEN, H., KOENIG, M. & COULAUD, G. (1984). *Physics Letter*. **106A**. 34.
- NGYEN, H., KOENIG, M., BENREDJEM, D., CABY, M. & COULAUD, G. (1986). *Phys. Rev. A*. **33**. 1279.
- NISHIKAWA, K. & WAKATANI, M. (1994). *Plasma Physics (Basic Theory with Fusion Applications)*. Springer-Verlag. Berlin.
- NÚÑEZ, M.A. (1993). *Phys. Rev. A*. **47**. 3620.
- PANNEKOEK, A. (1938). *M.N.R.A.S.* **98**. 694.
- PATIL, S.H. (1984). *J. Phys. A*. **17**. 575.
- PEI, W. & CHANG, T. (1999). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. **64**. 15.
- ROBINSON, P.D., WARNOCK, T.T. & ANDERSON, N. (1970). *Phys. Rev. A*. **1**. 1314.
- ROGERS, F.J. (1971). *Phys. Rev. A*. **4**. 1145.
- ROGERS, F.J. & DEWITT, H.E. (1973). *Phys. Rev. A*. **8**. 1061.
- ROGERS, F.J. (1974). *Phys. Rev. A*. **10**. 2441.
- ROGERS, F.J. (1981 a). *Phys. Rev. A*. **24**. 1531.
- ROGERS, F.J. (1981 b). *Phys. Rev. A*. **23**. 1008.
- ROGERS, F.J., WILSON, B.G. & IGLESIAS, C.A.. (1988). *Phys. Rev. A*. **38**. 5007.
- ROUSE, C.A. (1967). *Phys. Rev.* **163**. 62.
- ROUSE, C.A.. (1968). *Phys. Rev.* **176**. 423.
- ROUSSEL, K.M. & O'CONNELL, R.F. (1974). *Phys. Rev. A*. **9**. 52.
- RUBIANO, J.G., RODRÍGUEZ, R., GIL, J.M., MARTEL, P. & MÍNGUEZ, E. (1999). *Laser and Particle Beams*. **17**. 635.
- SACHS, R.G. & GOEPPERT-MAYER, M. (1938). *Phys. Rev.* **53**. 991.
- SALZMANN, D., YIN, Y.R. & PRATT, R.H.. (1985). *Phys. Rev. A*. **32**. 3627.
- SALZMANN, D. & SZCHMAN, H..(1987). *Phys. Rev. A*. **35**. 807.
- SCHEY, H.M. & SCHWARTZ, J.L. (1965). *Phys. Rev.* **139**. B1428.
- SCHEY, H.M. & SCHWARTZ, J.L. (1965). *Phys. Rev.* **139**. B1428.
- SCHLÜTER, D. (1990). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*. **43**. 407.
- SHALITIN, D. (1965). *Phys. Rev. A*. **140**. 1857.

- SHALITIN, D., RON, A. & REISS, Y. (1982). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **27**. 219.
- SHIVAMOGGI, B.K. & MUSLER, P. (1996). *Phys. Rev. A.* **54**. 4830.
- SINGH, D. & VARSHNI, Y.P. 1984. *Phys. Rev. A.* **29**. 2895.
- SLATER, J.C. (1960). *Quantum Theory of Atomic Structure.* Mc-Graw Hill. New York.
- SMITH, C.R. (1964). *Phys. Rev.*, **134**.A1235.
- SOBELMAN, I.I. (1992) *Atomic Spectra and Radiative Transitions.* Spriger-Verlag. Berlin.
- STEWART, J.C. & PYATT, K.D. (1966). *Ap. J.* **144**. 1203.
- SWEENEY, M.A. (1978). *Ap. J.* **220**. 335.
- THEIMER, O. & KEPPLER, P. (1970). *Phys. Rev. A.* **1**. 957.
- TRUBNIKOV, B.A. & YAVLINSKII, YU. N. (1965). *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **48**. 1618.
- UNSÖLD, A. (1948). *Zs. Ap.* **24**. 355.
- VRSCAY, E.R. (1986). *Phys. Rev. A.* **33**. 1433.
- WIESE, W.L. & KELLEHER, D.E. (1971). *Astrophys. J.* **166**. L59.
- WILSON, B.G. (1993). *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* **49**. 241.
- YUKAWA, H. (1934).
- YUNTA, J., RODRÍGUEZ MAYQUEZ, E. Y SÁNCHEZ DEL RÍO (1973). *An. Fis.* **69**. 380.

